



Výzkumné centrum
Pokročilé sanační technologie a procesy

Transport

Software pro simulace kolonových experimentů

Autor: Ing. Vratislav Žabka

Vedoucí práce: doc. Ing. Jan Šembera, Ph.D.



Průběh prezentace

- **Motivace pro vytvoření programu**
- **Stručný popis softwaru**
- **Odlišnosti programu Transport a jednoduchých modelů kolonových experimentů**
- **Příklad práce s programem**
- **Současný výzkum**



Představení programu

■ K čemu slouží?

- Je to model pro simulaci kolonových experimentů.
- Klade důraz na reakční složku procesů.

■ Proč ho vytváříme?

- Pro lepší pochopení dějů probíhajících uvnitř kolony.
- Pro odhadnutí vlivu těchto jevů na výsledek kolonových testů.



Model kolony – trojí porózita

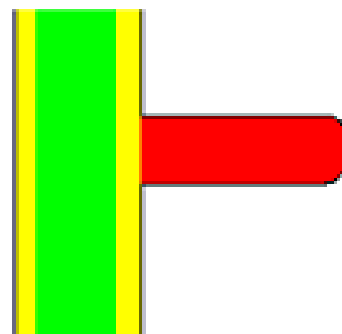
■ 1D model na základě metody konečných objemů

- Konvekce $\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \cdot \mathbf{v}) = q_i$

■ 3D efekt pomocí trojí porózity

- Výměny $\frac{\partial c_i^a}{\partial t} = D_2 \cdot \frac{N_{ln}}{N_a + N_{ln}} \cdot (c_i^{ln} - c_i^a),$

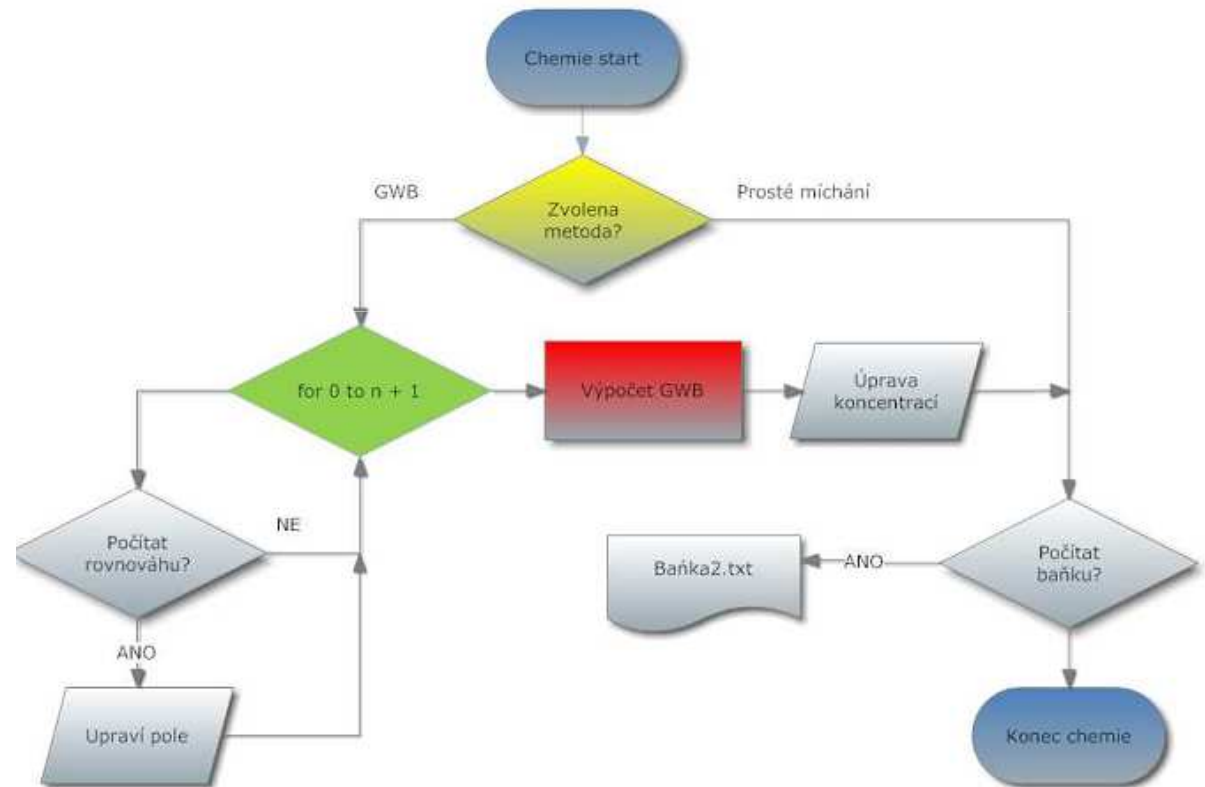
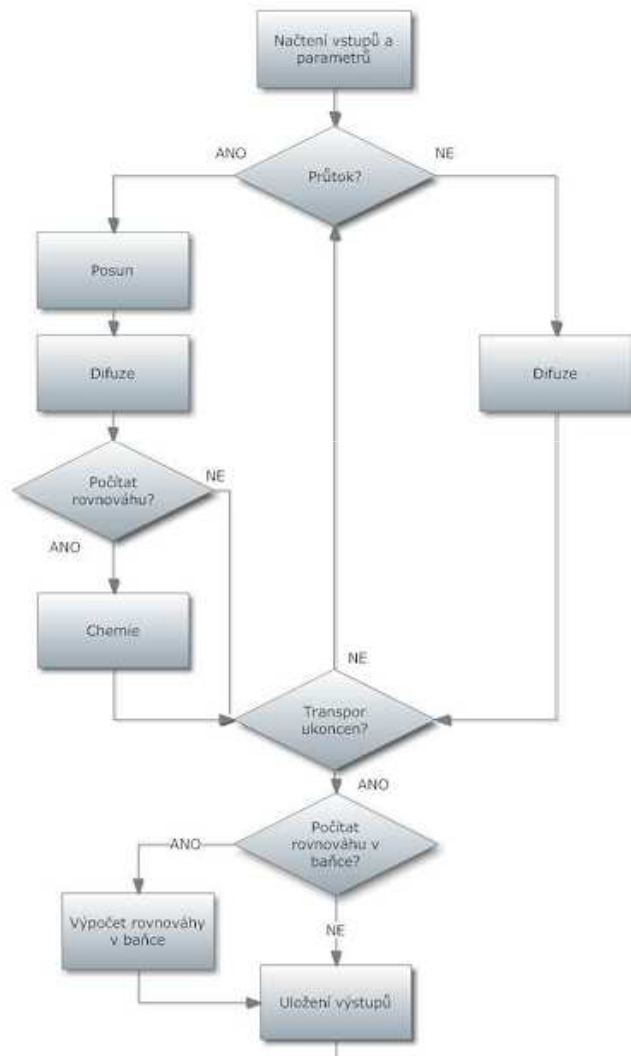
$$\frac{\partial c_i^{ln}}{\partial t} = -D_2 \cdot \frac{N_a}{N_a + N_{ln}} \cdot (c_i^{ln} - c_i^a)$$



Legenda:

- - aktivní oblast
- - 1. neaktivní oblast
- - 2. neaktivní oblast

Schéma programu





Úpravy programu Transportu

■ Úpravy fyzického modelu kolony

- Přidání výpočtu vstupní a výstupní komory
- Přidání výpočtu situace v nádobě

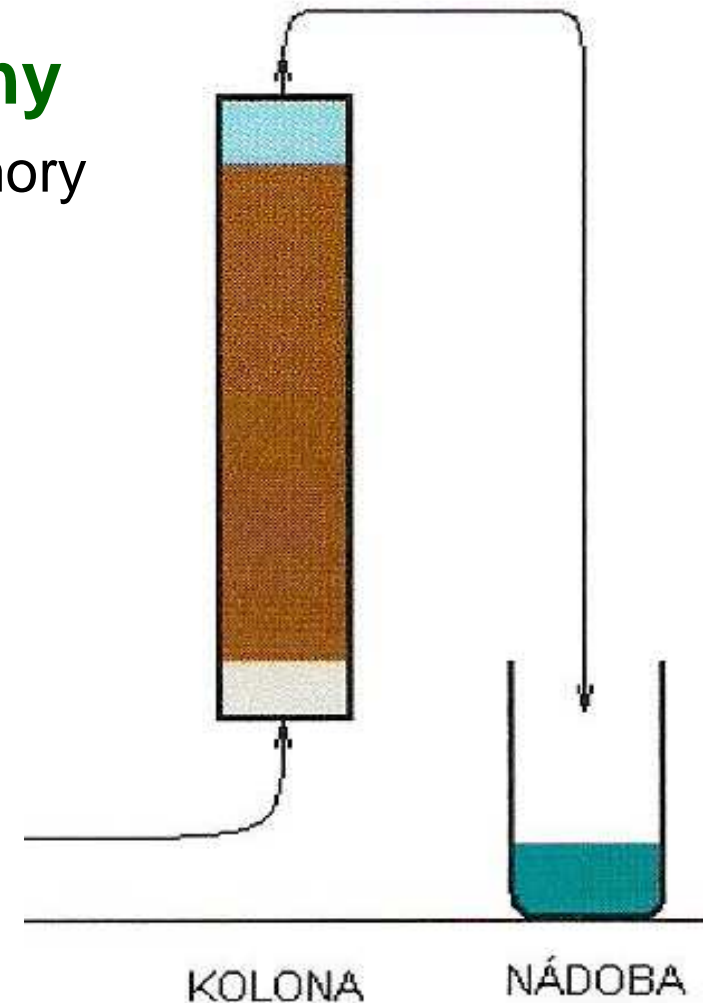
■ Zahrnutí výstupní nádoby

- Postupné naplňování

$$V_{N+2}(t + \Delta t) = V_{N+2}(t) + \Delta t \cdot Q(t)$$

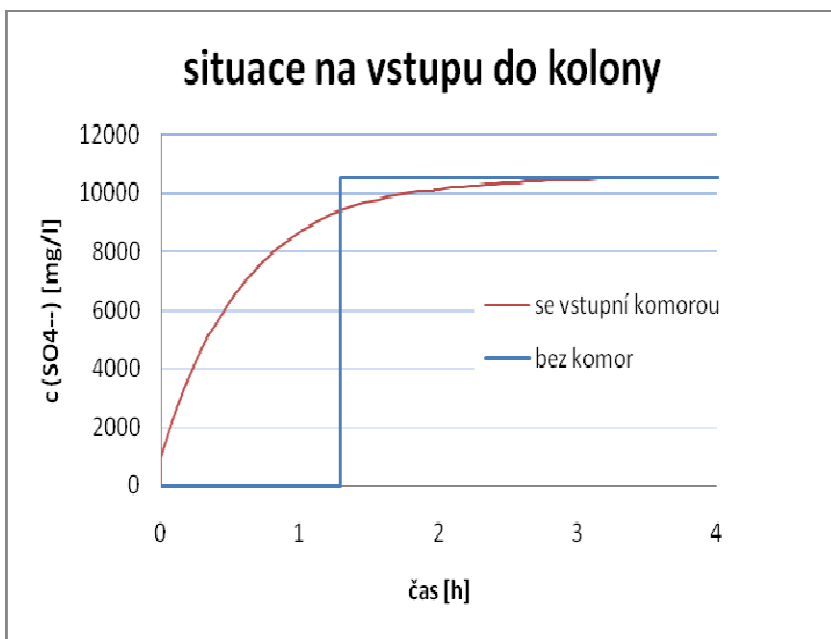
$$C_{N+2}(t + \Delta t) = \frac{C_{N+2}(t) \cdot V_{N+2}(t) + \Delta t \cdot Q(t) \cdot C_{N+1}(t)}{V_{N+2}(t + \Delta t)}$$

- Vylití se změřením

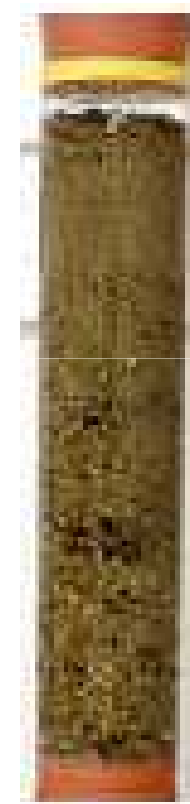
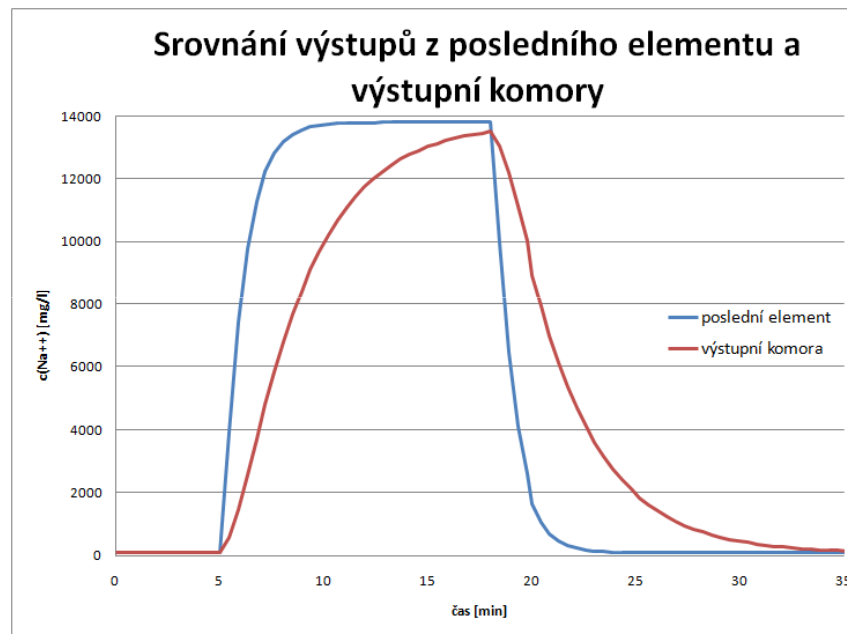


Porovnání výsledků se zahrnutím komor

■ Vstupní komora



■ Výstupní komora



Sorpce - Langmuir

■ Analytické řešení

- Hledáme řešení soustavy dvou rovnic

1. Předpis pro Langmuirovu izotermu

$$C_s = C_{max} \frac{C_r K_L}{1 + C_r K_L}$$

2. Hmotnostní bilance

$$C_{s_0} + C_{r_0} = M = C_s + C_r$$

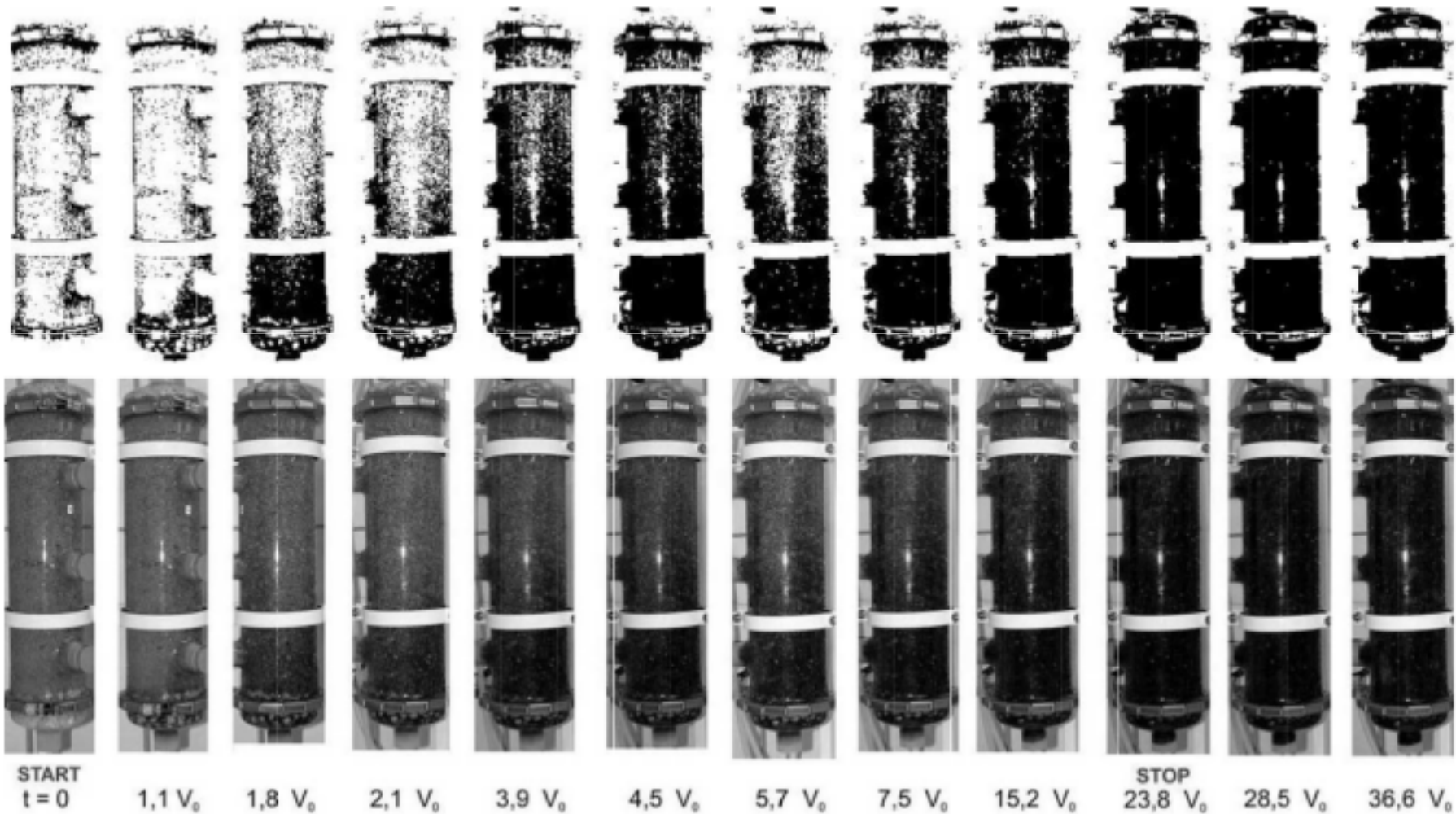
■ Newton – Rapsonova metoda

- Řešení rovnice hledáme jako posloupnost bodů

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

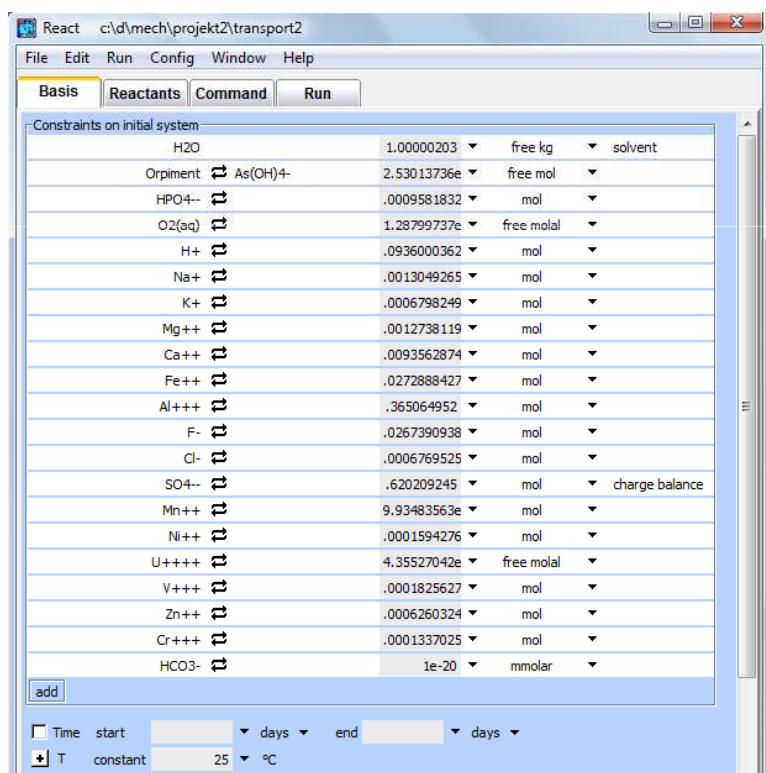
$$C_{r(i+1)} = C_{r(i)} - \frac{C_{r(i)} - M + \frac{C_{r(i)} K_L C_{max}}{1 + C_{r(i)} K_L}}{1 + \frac{K_L C_{max}}{(1 + C_{r(i)} K_L)^2}}$$

Kolonové experimenty s nano Fe



Kolonové experimenty s nano Fe

■ Současný stav řešených problémů



React c:\d\mech\projekt2\transport2

File Edit Run Config Window Help

Basis Reactants Command Run

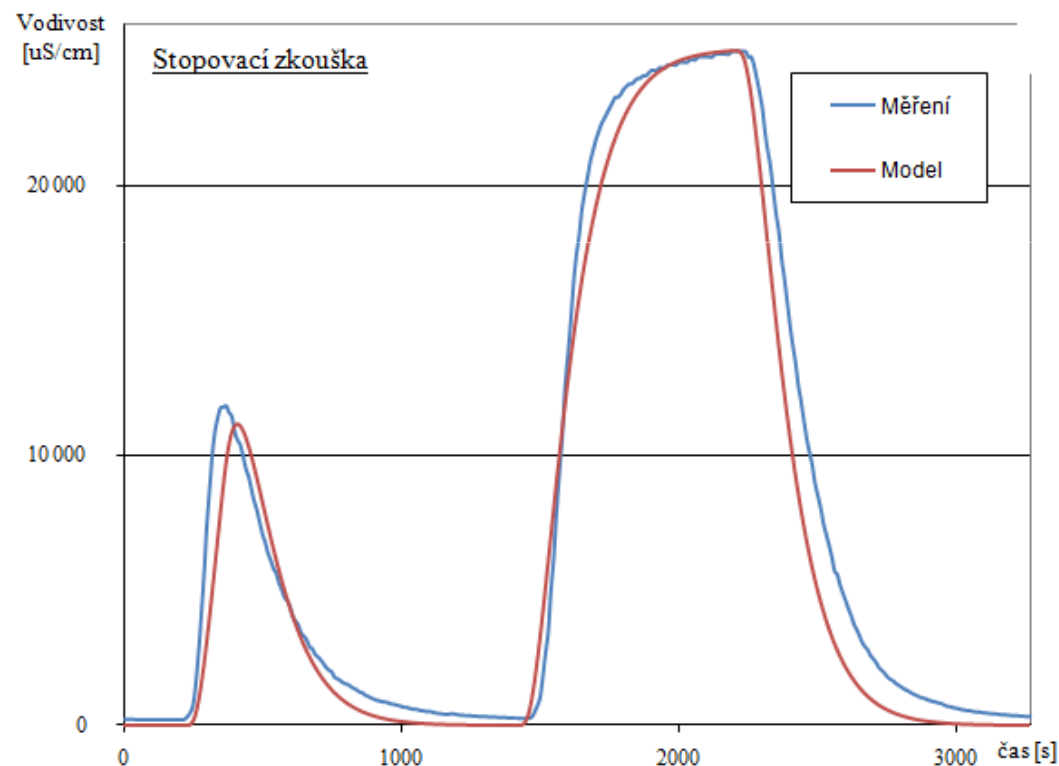
Constraints on initial system

| | | | |
|-------------------|-------------|------------|----------------|
| H2O | 1.00000203 | free kg | solvent |
| Orpiment As(OH)4- | 2.53013736e | free mol | |
| HPO4-- | .0009581832 | mol | |
| O2(aq) | 1.28799737e | free molal | |
| H+ | .0936000362 | mol | |
| Na+ | .0013049265 | mol | |
| K+ | .0006798249 | mol | |
| Mg++ | .0012738119 | mol | |
| Ca++ | .0093562874 | mol | |
| Fe++ | .0272888427 | mol | |
| Al+++ | .365064952 | mol | |
| F- | .0267390938 | mol | |
| Cl- | .0006769525 | mol | |
| SO4-- | .620209245 | mol | charge balance |
| Mn++ | 9.93483563e | mol | |
| Ni++ | .0001594276 | mol | |
| U++++ | 4.35527042e | free molal | |
| V+++ | .0001825627 | mol | |
| Zn++ | .0006260324 | mol | |
| Cr+++ | .0001337025 | mol | |
| HCO3- | 1e-20 | mmolar | |

add

Time start days end days

T constant 25 °C





■ Hlavní význam

- Výukový a testovací software
- Pomáhá správně pochopit děje probíhající při kolonových experimentech

■ Další funkce

- Návrh kolonových experimentů
- Získání parametrů pro 3D modely reálných oblastí
- Modely chemických roztoků



Děkuji za pozornost