

Μοντελοποίηση της απορρύπανσης εδαφών με διοχέτευση αιωρημάτων νανοσωματιδίων

Αλεξάνδρα Σικινιώτη-Λοκ, Χρήστος Τσακίρογλου

Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής – Ίδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας

Για να μοντελοποιηθούν μακροσκοπικά οι αλληλεπιδράσεις νανοσωματιδίων και ρύπου μέσα σε ένα πορώδες μέσο υπό μεταβλητές συνθήκες (π.χ. ταχύτητα ροής, παλμική/βηματική μεταβολή στην είσοδο, χωρική κατανομή ρύπων), οι κλασσικές εξισώσεις που περιγράφουν ροή και μεταφορά πολλών φάσεων (π.χ. ροή υδατικής φάσης, κορεσμός ελεύθερου ρύπου, διαλυτοποίηση & υδροδυναμική διασπορά υγρού ρύπου) πρέπει να συζευχθούν με εξισώσεις που περιγράφουν τη μεταφορά των νανοσωματιδίων και τις φυσικοχημικές τους αλληλεπιδράσεις με τη στερεή επιφάνεια, τις διεπιφάνειες νερού / ελεύθερου ρύπου, τον διαλυτοποιημένο και τον προσροφημένο ρύπο. Για να περιγραφούν όλοι οι γνωστοί μηχανισμοί και η δυναμική της εναπόθεσης (π.χ. προσκόλληση σε στερεή επιφάνεια, προσρόφηση σε διεπιφάνειες, φράξιμο πόρων, εναπόθεση μικρών σωματιδίων σε μεγαλύτερα) χρησιμοποιούνται φαινομενολογικές εξισώσεις λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση του κολλοειδούς στο πορώδες και τη σχετική διαπερατότητα. Η κλασσική εξίσωση συναγωγής - διασποράς για τη συγκέντρωση των νανοσωματιδίων στο νανορευστό συμπληρώνεται με ρυθμούς εναλλαγής που παριστάνουν τον τοπικό ρυθμό απώλειας νανοσωματιδίων. Οι αλληλεπιδράσεις των αιωρούμενων και προσροφημένων σωματιδίων με διαλυτοποιημένο, προσροφημένο και ελεύθερο ρύπο περιγράφονται από γραμμικά και μη γραμμικά κινητικά μοντέλα του τοπικού ρυθμού κατανάλωσης ρύπου σαν συνάρτηση της συγκέντρωσης (αιωρούμενων ή προσροφημένων) σωματιδίων και της συγκέντρωσης διαλυμένου / προσροφημένου ρύπου ή του κορεσμού ελεύθερου ρύπου. Τελικά προκύπτει ένα σύστημα εξισώσεων που συνδυάζουν τις διεργασίες της διήθησης σωματιδίων με τη μεταφορά ρύπου και τις αντιδράσεις που συμβαίνουν σε υδατική και μη υδατική φάση. Το μακροσκοπικό μοντέλο εμπεριέχει ένα μεγάλο αριθμό απροσδιόριστων παραμέτρων. Για να εκτιμηθούν όλες αυτές οι παράμετροι αξιοποιούνται πειραματικά αποτελέσματα διοχέτευσης νανοσωματιδίων σιδήρου μηδενικού σθένους σε πορώδη μέσα ρυπασμένα με τετραχλωρο-αιθυλένιο (PCE) με συστηματικό και συνεπή τρόπο. Αφού σταθεροποιηθούν κάποιες παράμετροι που προκύπτουν άμεσα από τα πειράματα, οι υπόλοιπες εκτιμώνται με δυναμική προσαρμογή (inverse modeling) του μοντέλου στα πειραματικά αποτελέσματα.