

**SECTIUNEA 1**  
**RAPORTUL STIINTIFIC SI TEHNIC**  
**(RST)**

**FAZA DE EXECUTIE NR. V**

**CU TITLUL:**

***Continuarea activitatilor de modelare, consolidarea setului de date prin metode extensive, elaborarea produsului "Procedura de fitoremediere si evaluare a riscului***

**RST - raport stiintific si tehnic in extenso**

**PVAI - proces verbal de avizare interna**

## **Cuprins**

- 1.Obiective generale**
- 2.Obiectivele fazei**
- 3.Rezumatul fazei**
- 4.Descrierea stiintifica si tehnica**
- 5.Concluzii**
- 6.Bibliografie**
- 7.Comunicari si Publicatii**

### **1. OBIECTIVE GENERALE**

Activitatea intreprinsa pe parcursul acestei etape au avut un caracter de documentare si cercetare matematica in vederea stabilirii unor modele matematice utile in evaluarea riscului asociat contaminarii cu metale si proiectarea unor tehnologii de fitoremediere. Au fost urmarite obiectivele generale:

*Caracterizarea si modelarea matematica a circuitelor biogeochimice ale metalelor in zonele contaminate*

*Optimizarea experimentală si prin modelare matematica a solutiilor de remediere a zonelor contaminate*

### **2. OBIECTIVELE FAZEI**

In vederea realizarii celor doua obiective generale in aceasta faza a proiectului au fost investigate o serie de modele de evaluare a riscului ecologic asociat solurilor contaminate cu metale. Aceasta activitate de documentare a urmarit:

*Stabilirea modelelor matematice optime pentru expunerea la metale pe cai biologice*

*Stabilirea modelelor matematice optime pentru circulatia metalelor in conditii de bioremediere*

### **3. REZUMATUL FAZEI**

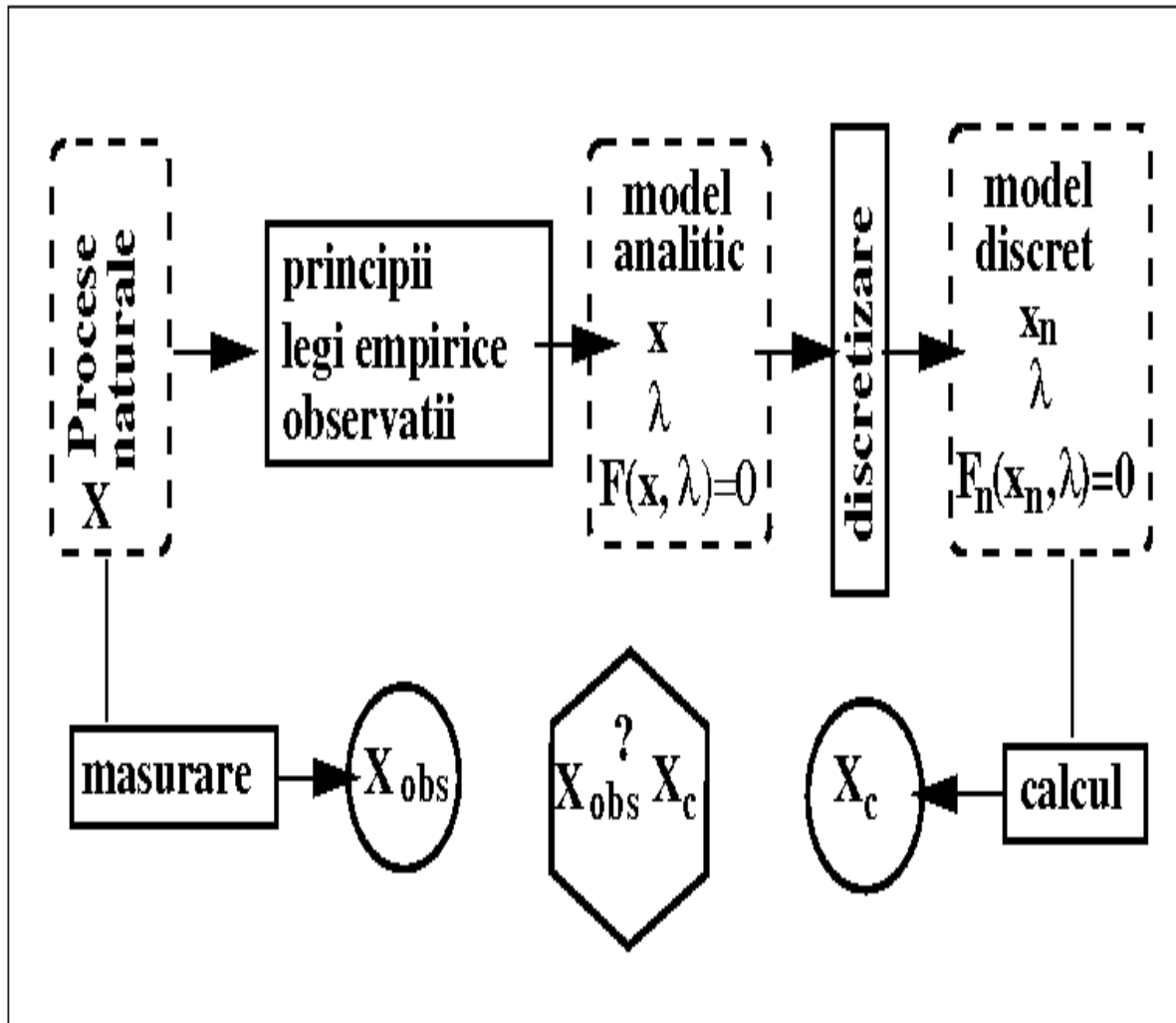
O provocare majora ale civilizatie umane este controlul si mentinerea calitatii mediului natural. In decursul anilor activitatea umana a produs serioase pagube acestuia prin contaminarea cu substante chimice printre care si metalele. Remediera solului si a apelor subterane si de suprafata necesita efort uman, material si finaciar. Pentru a reduce aceste costuri este nevoie de tehnologii de remediere eficiente si ieftine. Proiectarea unor astfel de tehnologii presupune un model care sa cuantifice procesele bio- fizico- chimice esentiale si care sa poata face predictii privind efectele tehnologiilor propuse.

Avand in vedere aceste lucruri in aceasta faza a fost intreprinse doua activitatii de baza. Identificarea unor principii mecanice de modelare care sa permita o tratare unitara a circulatiei metalelor in sistemul apa-sol-plante. In baza acestor principii au fost obtinute un set de ecuatii fundamentale general valabile in sistemul apa subterana- sol- plante. Sistemul fundamental de ecuatii se completeaza cu un set de relatii empirice relativ la interactiile planta- apa subterana si apa subterana- sol.

O alta activitate a privit modelarea eroziunii solurilor. Este o problema de interes intrucat prin eroziune solurile contaminate sau haldele de steril din exploatarile miniere ajung in apele de suprafata .

#### **4. DESCRIERE STIINTIFICA SI TEHNICA**

Procesele bio- fizico- chimice care au loc in solurilor contaminate cu metale sunt extrem complexe si necesita simplificari pentru a fi modelate. Simplificarile produse trebuie sa fie de asa natura incat pe deoparte modelul matematic sa fie tratat iar pe de alta parte natura proceselor sa nu fie distorsionata.



Cuantificare proceselor naturale. Etapele principale ale procesului de cuantificare sunt

- identificarea proceselor si marimilor cheie;
- investigarea principiilor bio-fizico-chimici, a legilor empirice si a observatiilor directe asupra proceselor cheie si adiacente necesare elaborarii modelului matematic;
- modelul matematic, acesta consta din vectorul de stare, parametrii si ecuatiile matematice care guverneaza evolutai stari;
- discretizare, daca modelul matematic nu poate fi rezolvat analitic atunci este nevoie de rezolvarea lui numerica. Pentru. aceasta este nevoie sa se discretizeza vectorul de stare si ecuatiile modelului;
- varianta discreteziata a modelului matematic furnizeaza solutia numerica.

Valoara lui  $X_c$  este informatia cantitativa pe care o avem despre procesul natural supus modelari. Problema fundamentala a modelari poate fi formulata astfel:

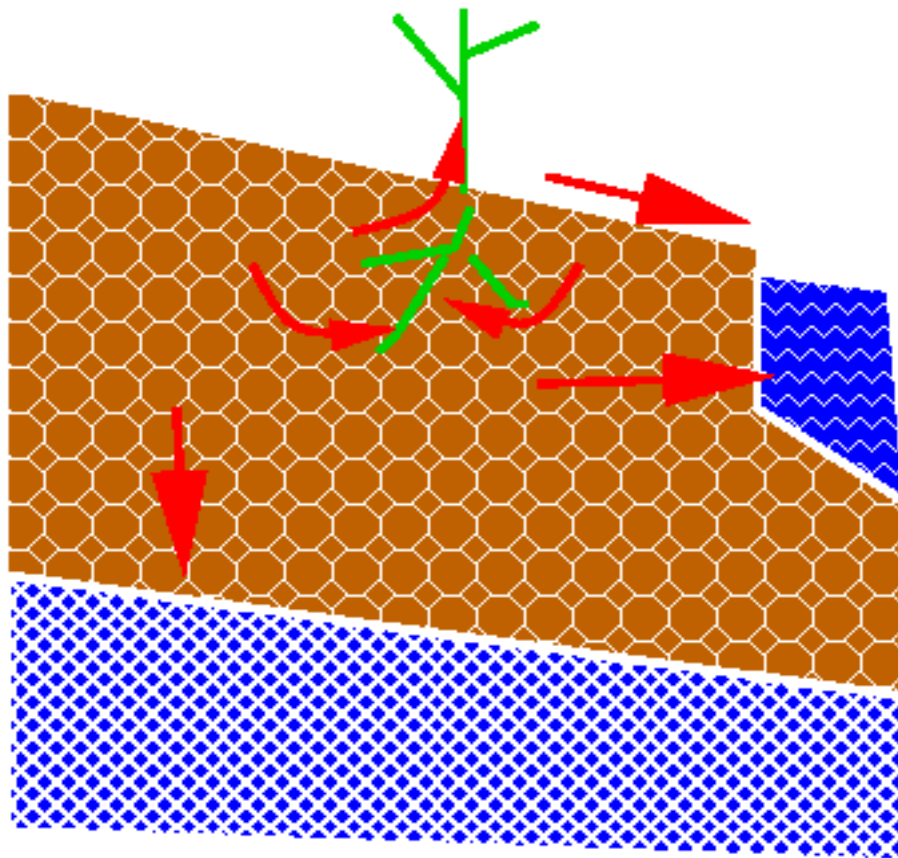
**Cat de apropiata este valoarea calculata  $X_c$  de valoarea adevarata  $X$  ?**

Matematica singura nu poate raspunde la aceasta problema. Tot ce se poate face din punct de vedere matematic este sa estimeze distanta dintre solutia,  $x$ , a modelului matematic si valoarea calculata  $X_c$ . Validarea modelului se poate face numai prin compararea valorilor calculate cu valorile masurate.

**1. Modelare matematica in Fitoremediere.** Fitoremedierea este o tehnologie de remediere a solurilor contaminate cu ajutorul plantelor. In principal se bazeaza pe capacitatea plantelor de extrage metale din mediul apos al solului prin

intermediul radacinilor. Elaborarea unui model matematic utilizabil in proiectarea tehnologiilor de fitoremediere va trebui sa tina cont si sa se limiteze la procesele dominante implicate in transferul metalelor din sol in radacinile plantelor. Modelul are ca scop calculul cantitati de metal extras din sol de catre plante. Plantele pot stoca metalul extras in radacini, partile aeriene ale plantelor sau poate fi eliberat in atmosfera in procesul de transpiratie.

In literatura au fost propuse foarte multe modele matematice ale circulatiei metalelor in medii poroase si plante, o trecere in revista a acestora a fost facuta in lucrarea, *Iordache et al.* nu insistam aici. Ce ne a interesat a fost elaborarea unui *sistem de ecuatii fundamentale*, si identificare unui set de *legii empirice* utilizabile in sistemul de ecuatii care sa poata fi aplicat la cazuri concrete si care sa poata fi matematic studiat. Rezultatele obtinute pot fi consultate in anexa la raport, *Mathematical modelling of metals mobility in the soil root zone.*



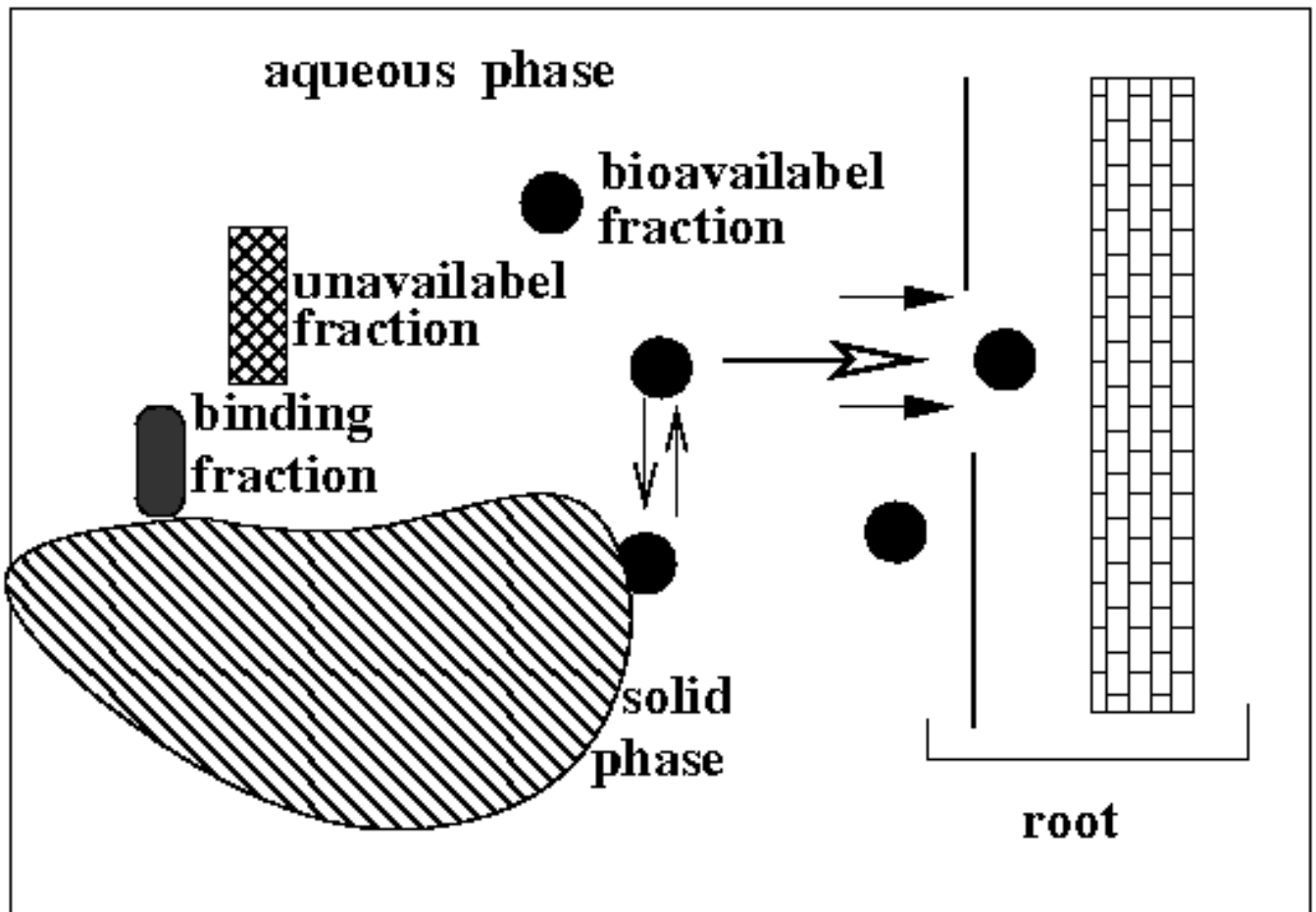
*Circulatia metalelor in sistemul sol-apa-plante. Miscarea apei antreneaza metalele catre panza freatica si apele de suprafat. O parte din contaminanti sunt preluati de radacinile plantelor. Din faza solida metalele pot trece in faza fluida, desorbție, din faza fluida*

*metalele sunt imobilizate in faza solida, absorbtie.*

**Sistemul sol- apa- contaminati- radacini** este modelat ca un mediu continuu compus dintr- o faza solida si o faza fluida. Faza fluida este o solutie formata din apa, formele solubile ale metalelor si particule in suspensie. Faza solida este compusa din particule solide aflate in contact. Structura fazei solide este astfel incat exista un spatiu vid, spatiul porilor, care poate fi ocupat de faza fluida si radacinile plantelor. Radacinile plantelor impreuna cu faza solida sunt in general considerate imobile.

Elaborarea unui model la scara microlocala este fara utilitate practica din cel putin doua motive: a) configuratia spatiala si procesele nu poat fi determinate si b) numarul variabilelor si configuratia spatiala complicata fac imposibila solutionara, numerica sau analitica, a sistemului de ecuatii.

In aceste conditii modelele utilizate sunt *modele mediate*. Prin mediere orice marime fizica atasata unei faze este definita in orice punct din spatiu. In acest mod avem un nou concept mediu poros a carui stare este descrisa de un set marimii fizico- chimice. Ecuatiile fundamentale guverneaza evolutia in timp a marimilor de stare.



*Sistemul sol-apa- contaminant- radacini. Procesul de extractie a metalelor din sol cu ajutorul plantelor este mediat de prezenta apei in spatiul porilor. Din faza solida metalele sunt eliberate in faza fluida. Dintre toate speciile chimice ale metalului prezente in faza fluida numai o parte sunt disponibile plantelor. Fractiile disponibile sunt preluate de radacini odata cu preluarea solutiei apoase, transport pasiv. Exista si situatii cand planta stimuleaza preluarea fractiilor disponibile, transport activ.*

*Prezenta ciupercilor pe radaciniile plantelor pot influenta cantitatea de metal preluata de catre plante.*

**Faza fluida.** Faza fluida este un amestec de fluide miscibile, componentele fazei fluide sunt speciile solubile ale metalului/metalelor contaminante.

Componentele mixturi pot suferi transformarii de faza, starea unui faze este cuantificata prin *concentratia fazei* in solutia apoasa. Concentratia unei faze se modifica datorita proceselor de:

- a) convecție și difuzie,
- b) absorbție- desorbție,
- c) transformărilor din interiorul solutiei apoase,
- d) preluării fazei de către radacinile plantelor

Faza fluida in ansamblu este un fluid inert chimic. Starea fazei fluide este descrisa de presiunea mixturi și concentrațiile fazelor componente.

**Faza solida.** Componenta solida contine metalele contaminante, prin contact cu apa acestea sunt eliberate in faza fluida. Starea acestei faze este cuantificata prin volumul ocupat in mediul poros si *concentratiile de metal* continut.

**Radacinile plantelor.** Radacinile plantelor formeaza componenta mediului poros care preia o parte din metalele existente in faza fluida. Interfata radacina- mediu fluid este tratata ca o membrana permeabila astfel incat *aria suprafetei de contact* este o caracteristica importanta a distributiei radacinilor in sistem. Starea acestei componente este descrisa de *functia de distributie* a radacinilor in mediul poros.

**Ecuatiile fundamentale.** Ecuatiile care guverneaza evolutia marimilor de stare sunt toate obtinute din principiul de bilant al masei. Principiul este formulat pentru fiecare componenta in parte la nivel microlocal apoi prin mediere spatiala se obtine forma mediata a acestuia. Pentru a obtine un sistem de ecuatii suficient pentru determinarea starii, la principiul de bilant al masei se aduga un prim set de relatii empirice: *Legea lui Darcy* si *legea lui Fick*. Legea lui Darcy impreuna cu ecuatia de bilant a masei pentru mixtura dau nastere ecuatiei lui Richards iar legea lui Fick impreuna cu principiul conservarii masei dau nastere ecuatiei de convecție reactie- difuzie care guverneaza evolutia concentratiilor partiale. Ecuatiile fundamentale ale miscarii metalelor in mediul poros sunt: *ecuatia lui Richards* si *ecuatia de convecție reactie- difuzie*

**Procesele de absorbtie- desorbtie.** Sunt procesele care au loc la interfata solid-fluid. Inglobeaza toate formele de transfer dintre faza solida si faza fluida. Pentru o clasa larga de sisteme procesele de absorbtie- desorbtie pot fi considerate in echilibru astfel incat concentratiile fazei solide sunt determinate in mod algebric, *isoterme*, de concentratiile fazei fluide.

**Procesele de preluare de catre radacini.** Mecanismul prin care metalele ajung din faza fluida in plante este extrem de complex si inca neinteles in totalitate. Drept urmare aceste procese sunt simplist formulate de tipul iso- terme, cantitatea de metal preluata este o functie algebrica de concentratia metalului in faza fluida.

Este de remarcat ca modelul matematic format din ecuatiile fundamentale plus legile empirice ale proceselor de absorbtie- desorbtie si preluare de catre radacini a metalelor este un *sistem de ecuatii cu derivate partiale de tip parabolic*. Pentru o clasa larga de legi empirice se poate demonstra ca acest sistem *are solutie* si deasemenea exista algoritmi si programe de calcul *validate, eficiente* si cu mare grad de *acuratete*.

**Activitatea microbiologica.** Prezenta microorganismelor, cipurilor si a bacteriilor influenteaza puternic procesele de absorbtie- desorbtie si de

preluare de catre radacini. Cuantificarea acestor procese este extrem de greu de facut asa incat cele maimulte abordari inglobeaza aceste efecte in valorile parametrilor specifici modelelor elaborate in absenta acestor factori biologici.

**2. Modelarea matematica a eroziuni solului.** Eroziunea solului este o problema de interes atat pentru agricultura cat si pentru evaluarea ris-culului contaminarii apelor de suprafata cu metale provenite din haldele de steril sau in urma transportului de sol de pe suprafetele cultivate agricol pe care au fost administrate ingrasaminte si pesticide.

Cantiatea de metal care ajunge in apele de suprafata este direct legata de cantitatea de sediment transportat de apa si de concentratia metalului in sol. Prin urmare este de interes predictia cantitatii de sol transportata de apa pluviala de pe o suprafata de teren. Actualmente exista trei abordari: metode statistice, modele cu ecuatii cu derivate partiale si modele bazate pe automate celulare.

**Ecuatia universala a pierderi de sol USLE.** Este o ecuatie de tip statistisc care determina cantitatea de sol pierdut de o suprafata de teren pe baza unei relatii empirice.

**Automate celulare.** Modelele cu automate celulare au castigat in interes prin simplitate programarii lor si cel mai important prin posibilitatea de a obtine proprietati macroscopice din legi de interactie microlocale.

**Ecuatii cu derivate partiale.** Sunt modele obtinute prin cuantificarea proceselor fizice care au loc la impactul picaturilor de ploaie cu suprafata solului, a infiltratiei apei in sol si a antrenarii particulelor solide de catre stratul de apa care curge pe suprafata solului. Sunt modele adecvate studiilor locale.

Detalii asupra modelarii si o prezentare a unor modele utilizate se gasesc in lucrarea anexata raportului, *Mathematical Modelling of Soil Erosion Process*.

## 6. BIBLIOGRAFIE

1. Stelian Ion, Anca Veronica Ion, *Mathematical modelling of the soil erosion*, [http://www.ima.ro/PNII\\_programme/FITORISC/publicatii/rth\\_31012\\_01.pdf](http://www.ima.ro/PNII_programme/FITORISC/publicatii/rth_31012_01.pdf)
2. Stelian Ion, *Mathematical modelling of metals mobility in the soil root zone*, [http://www.ima.ro/PNII\\_programme/FITORISC/publicatii/rth\\_31012\\_02.pdf](http://www.ima.ro/PNII_programme/FITORISC/publicatii/rth_31012_02.pdf)
3. Virgil Iordache, Stelian Ion and Alin Pohoata, *Integrated modeling of metals biogeochemistry: potential and limits*, *Chemie der Erde-Geochemistry*, Vol. 69, Supplement 2, pp.125- - 169, 2009

## 6. CONCLUZII

Obiectivele asumate pentru aceasta faza au fost indeplinite integral si la termen. Lucrarile corespund clauzelor contractuale. Rezultatele obtinute in aceasta faza a facut obiectul a doua comunicari stiintifice, a unui articol acceptat pentru publicare si a unei lucrari stiintifice.

Perspective de dezvoltare: a) Utilizarea modelelor analizate la unel cazuri concrete de studiu, b) Dezvoltarea unor pachete de programe pe baza modelelor analizate.

## 7. COMUNICARI SI PUBLICATII

1. Virgil Iordache, Stelian Ion and Alin Pohoata, *Integrated modeling of metals biogeochemistry: potential and limits*, Chemie der Erde-Geochemistry, Vol. 69, Supplement 2, pp.125- - 169, 2009
2. **Stelian Ion**, *Mathematical modelling of metals mobility in the soil root zone*, CAIM 2010, Iasi, Romania, 15- 17 Octombrie 2010
3. **Stelian Ion** and **Anca Veronica Ion**, *Cellular automaton model of the soil erosion*, 8<sup>th</sup> Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problem, Constanta, Romania, Octombrie 2010
4. Adrian Carabineanu , **Stefan Gicu Cruceanu** , *The Study of Free Boundary Flow by Means of Integral Equations Method* , ICAM7 - 7th International Conference on Applied Mathematics, Baia Mare, Romania, 1- 4 Septembrie 2010.
5. **Stefan Cruceanu** and Ana Maria Raducan, *Numerically tracing homotopy paths for nonlinear systems*, CAIM 2010, Iasi, Romania, 15- 17 Octombrie 2010
6. **Stelian Ion**, **Anca Veronica Ion**, *Mathematical modelling of the soil erosion*, [http://www.ima.ro/PNII\\_programme/FITORISC/publicatii/rth\\_31012\\_01.pdf](http://www.ima.ro/PNII_programme/FITORISC/publicatii/rth_31012_01.pdf)
7. **Stelian Ion**, *Mathematical modelling of metals mobility in the soil root zone*, [http://www.ima.ro/PNII\\_programme/FITORISC/publicatii/rth\\_31012\\_02.pdf](http://www.ima.ro/PNII_programme/FITORISC/publicatii/rth_31012_02.pdf)