



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΗΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Χρήση αναλυτικών λύσεων της εξίσωσης μεταφοράς  
για την προσομοίωση πειραμάτων με ιχνηθέτες  
σε φυσικούς υδροφορείς**

Μαρίνα Γιαμαλάκη

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ:

Μαρίνα Πανταζίδου

Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Μάρτιος 2016, Αθήνα







ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΗΣ

**Χρήση αναλυτικών λύσεων της εξίσωσης μεταφοράς  
για την προσομοίωση πειραμάτων με ιχνηθέτες  
σε φυσικούς υδροφορείς**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της

Μαρίνας Γιαμαλάκη

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ:

Μαρίνα Πανταζίδου

Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Μάρτιος 2016, Αθήνα



## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την επιβλέπουσα καθηγήτρια κ. Μαρίνα Πανταζίδου για το χρόνο που αφιέρωσε καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης αυτής της διπλωματικής εργασίας και για τις πολύτιμες συμβουλές της. Η παρούσα διπλωματική εργασία δεν θα μπορούσε να ολοκληρωθεί χωρίς τη συνεχή καθοδήγησή της.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου και τον Δημήτρη Τζαγκαράκη για τη συνεχή υποστήριξη και ενθάρρυνση σε όλο τον κύκλο των σπουδών μου.

Μαρίνα Γιαμαλάκη



## Πίνακας Περιεχομένων

<b>Περίληψη</b> .....	<b>xxii</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>xxiv</b>
<b>Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή</b> .....	<b>1</b>
1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής .....	1
1.2 Οργάνωση κειμένου .....	2
<b>Κεφάλαιο 2 Μεταφορά διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό</b> .....	<b>4</b>
2.1 Αναλυτικές εξισώσεις μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό .....	4
2.1.1 Αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή .....	5
2.1.2 Αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή .....	6
2.1.3 Αναλυτική εξίσωση έκλυσης ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης .....	8
2.2 Μηχανισμοί μεταφοράς και σχετικές παράμετροι .....	10
2.2.1 Μεταγωγή-ταχύτητα μεταγωγής .....	10
2.2.2 Διάχυση-συντελεστής διάχυσης .....	11
2.2.3 Διασπορά-συντελεστές μηχανικής διασποράς .....	12
2.2.4 Ρόφηση-συντελεστής υστέρησης .....	18
2.2.5 Υποβάθμιση-χρόνος ημιζωής και ρυθμός μετασχηματισμού .....	19
2.3 Πειράματα μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς .....	21
<b>Κεφάλαιο 3 Στιγμιαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή</b> .....	<b>23</b>
3.1 Πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν, Οντάριο, Καναδά .....	23
3.1.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα .....	23
3.1.2 Πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων .....	24
3.1.2.1 Περιγραφή πειράματος .....	24
3.1.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	27
3.1.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη .....	27
3.1.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	29
3.1.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη .....	30
3.1.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	32



3.1.2.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο .....	34
3.1.2.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο .....	35
3.1.2.2.7 Σύγκριση των κατανομών του τετραχλωρομεθανίου (CTET) για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	36
3.1.3 Πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) .....	38
3.1.3.1 Περιγραφή πειράματος .....	38
3.1.3.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	40
3.1.3.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη .....	40
3.1.3.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	42
3.1.3.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη .....	43
3.1.3.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη.....	45
3.1.3.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο .....	48
3.1.3.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο .....	48
3.1.3.2.7 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	49
3.1.4 Πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και πρόσθετων βενζίνης .....	51
3.1.4.1 Περιγραφή πειράματος .....	51
3.1.4.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	53
3.1.4.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη .....	54
3.1.4.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	55
3.1.4.2.3 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	56
3.1.4.2.4 Περιγραφή προσομοίωσης για τους οργανικούς ρύπους .....	59
3.1.4.2.5 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τους οργανικούς ρύπους .....	59
3.1.4.2.6 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	61
3.1.4.2.7 Σύγκριση των κατανομών του MTBE για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	62
3.2 Πείραμα μεταφοράς στο Κέιπ Κοντ, Μασαχουσέτη, ΗΠΑ .....	64
3.2.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα .....	64
3.2.2 Πείραμα εισπίεσης ανόργανων ρύπων .....	65
3.2.2.1 Περιγραφή πειράματος .....	66

3.2.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	68
3.2.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη .....	68
3.2.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	70
3.2.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη .....	70
3.2.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	71
3.2.2.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ανόργανο ρύπο που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση .....	74
3.2.2.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ανόργανο ρύπο που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση .....	74
3.2.2.2.7 Σύγκριση των κατανομών του μολυβδαινικού ιόντος ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	75
3.3 Πείραμα μεταφοράς στο Κολόμπους, Μισισίπι, ΗΠΑ .....	77
3.3.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα .....	78
3.3.2 Δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς στο Κολόμπους (MADE-2) .....	79
3.3.2.1 Περιγραφή πειράματος .....	80
3.3.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	81
3.3.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη .....	82
3.3.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	83
3.3.2.2.3 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη .....	84
3.3.2.2.4 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο .....	86
3.3.2.2.5 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο .....	86
3.3.2.2.6 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	87
<b>Κεφάλαιο 4 Στιγμαία έκλυση ρύπου από ορθογώνια παράλληλεπίπεδη πηγή .....</b>	<b>90</b>
4.1 Πειράματα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ, Οντάριο, Καναδά .....	90
4.1.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα .....	90
4.2 Πρώτο πείραμα εισπίεσης ραδιοϊσοτόπου στο Τουίν Λέικ .....	91
4.2.1 Περιγραφή πειράματος.....	91
4.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	92
4.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για το ιώδιο-131 .....	93

4.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το ιώδιο-131 .....	95
4.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για το ιώδιο-131 .....	95
4.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για το ιωδίου-131 .....	97
4.2.2.5 Συμπερασματικά σχόλια .....	100
<b>Κεφάλαιο 5 Έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης .....</b>	<b>102</b>
5.1 Τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους, Μισισίπι, ΗΠΑ .	102
5.1.1 Περιγραφή πειράματος.....	102
5.1.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος .....	104
5.1.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης .....	105
5.1.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης για τους οργανικούς ρύπους .....	106
5.1.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για το ρ-ξυλόλιο .....	108
5.1.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για το ρ-ξυλόλιο .....	110
5.1.2.5 Σύγκριση των κατανομών της ναφθαλίνης για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς .....	112
5.1.3 Συμπερασματικά σχόλια .....	114
<b>Κεφάλαιο 6 Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις .....</b>	<b>115</b>
6.1 Συγκριτική ανάλυση της ταχύτητας μεταγωγής των ιχνηθετών των πειραμάτων μεταφοράς .....	115
6.2 Ο ρόλος της μηχανικής διασποράς .....	116
6.2.1 Ευρήματα για τους συντελεστές διαμήκους μηχανικής διασποράς .....	117
6.2.2 Ευρήματα για τους συντελεστές εγκάρσιας μηχανικής διασποράς .....	118
6.2.3 Συγκριτική ανάλυση των συντελεστών μηχανικής διασποράς των πειραμάτων μεταφοράς .....	119
6.3 Πρόβλεψη για τη μεταφορά των διαλυμένων ρύπων των πειραμάτων μεταφοράς σε μεταγενέστερες χρονικές στιγμές .....	121
<b>Κεφάλαιο 7 Σύνοψη και συμπεράσματα .....</b>	<b>125</b>
<b>Βιβλιογραφία .....</b>	<b>128</b>

<b>Παραρτήματα</b> .....	<b>134</b>
A. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν .....	134
B. Τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) στο πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν .....	136
Γ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν .....	137
Δ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν .....	139
E. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης ανόργανων ρύπων στο Κέιπ Κοντ .....	143
Z. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους .....	145
H. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πρώτου πειράματος εισπίεσης ραδιοϊσοτόπου στο Τουίν Λέικ .....	147
Θ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους .....	148
I. Παραδείγματα υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν .....	149
K. Παραδείγματα υπολογισμού των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν .....	156
Λ. Παραδείγματα υπολογισμού των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν .....	161

## Λίστα Πινάκων

<b>Πίνακας 2.1</b> Εμπειρικές σχέσεις υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_L$ από τη βιβλιογραφία .....	14
<b>Πίνακας 3.1</b> Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Μπόρντεν .....	24
<b>Πίνακας 3.2</b> Οι εισπιασθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986) .....	25
<b>Πίνακας 3.3</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν .....	34
<b>Πίνακας 3.4</b> Οι εισπιασθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν (Patrick και Barker 1985) .....	39
<b>Πίνακας 3.5</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν .....	47
<b>Πίνακας 3.6</b> Οι εισπιασθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στα διαλύματα του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν (American Petroleum Institute 1994) .....	52
<b>Πίνακας 3.7</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν .....	58
<b>Πίνακας 3.8</b> Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Κέιπ Κοντ .....	65
<b>Πίνακας 3.9</b> Οι εισπιασθείσες ουσίες, οι συγκεντρώσεις υποβάθρου (πριν τη δοκιμή) και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος στο Κέιπ Κοντ (LeBlanc et al. 1991) .....	66
<b>Πίνακας 3.10</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα στο Κέιπ Κοντ .....	73
<b>Πίνακας 3.11</b> Συντελεστές διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης $K_p$ του διοξειδιο(διοξο)μολυβδαινίου ( $\text{MoO}_4^{2-}$ ) που προκύπτουν από τη θεώρηση γραμμικής ισόθερμης στα αποτελέσματα εργαστηριακής δοκιμής (Stollenwerk 1998) και οι συντελεστές υστέρησης R που προκύπτουν .....	75
<b>Πίνακας 3.12</b> Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Κολόμπους .....	79

<b>Πίνακας 3.13</b> Οι εισπνεσθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους (Boggs et al. 1993) .....	80
<b>Πίνακας 3.14</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους. ....	86
<b>Πίνακας 4.1</b> Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Τουίν Λέικ .....	91
<b>Πίνακας 4.2</b> Η εισπνεσθείσα ουσία και η ποσότητά της στο διάλυμα του πρώτου πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Killley και Moltzner 1988) .....	92
<b>Πίνακας 4.3</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του πρώτου πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ .....	101
<b>Πίνακας 5.1</b> Σύνθεση και χημικές ιδιότητες των συστατικών στο οργανικό μείγμα του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους (Brauner και Widdowson 2001) .....	103
<b>Πίνακας 5.2</b> Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους .....	112
<b>Πίνακας 6.1</b> Τιμές της μέσης ταχύτητας μεταγωγής $v_x$ .....	115
<b>Πίνακας 6.2</b> Τα στοιχεία της προσομοίωσης των πειραμάτων μεταφοράς και οι τιμές των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψαν .....	117
<b>Πίνακας 6.3</b> Οι λόγοι $\alpha_y/\alpha_x$ και $\alpha_z/\alpha_x$ που προέκυψαν από την προσομοίωση των πειραμάτων μεταφοράς .....	119
<b>Πίνακας 6.4</b> Συγκριτικός πίνακας των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση με τιμές που βρέθηκαν στη βιβλιογραφία .....	120
<b>Πίνακας 6.5</b> Η διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας και οι ασυμπτωτικές τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από το στοχαστικό μοντέλο των Gelhar και Axness (1983) .....	121

## Λίστα Σχημάτων

<b>Σχήμα 2.1</b> Εξέλιξη της ρύπανσης σε κάτοψη, για σημειακή πηγή στιγμιαίας έκλυσης ρύπου σε τρεις διαφορετικές χρονικές στιγμές (Domenico και Schwartz 1998) .....	6
<b>Σχήμα 2.2</b> Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή (Batu 2005) .....	7
<b>Σχήμα 2.3</b> Γεωμετρικές εξάπλωσης της ρυπασμένης περιοχής για διαφορετικές διευθύνσεις εγκάρσιας εξάπλωσης (Domenico και Robbins 1985) .....	9
<b>Σχήμα 3.1</b> Κάτοψη (α) και τομή (β) κατά μήκος της ευθείας AA' του δικτύου δειγματοληψίας του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986) .....	26
<b>Σχήμα 3.2</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές μέσων συγκεντρώσεων κατά την κατακόρυφη έννοια .....	29
<b>Σχήμα 3.3</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=5,2m$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,52m$ .....	30
<b>Σχήμα 3.4</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς α) $\alpha_x=3m$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,3m$ και β) $\alpha_x=3m$ , $\alpha_y=0,3m$ και $\alpha_z=0,03m$ .....	32
<b>Σχήμα 3.5</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	33
<b>Σχήμα 3.6</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ .....	34
<b>Σχήμα 3.7</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	37
<b>Σχήμα 3.8</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ .....	38
<b>Σχήμα 3.9</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων, τη χρονική στιγμή 108 ημέρες	

μετά την εισπίεση, ενώ το διάγραμμα (γ) αντιστοιχεί σε κατανομή συγκεντρώσεων σε πηγάδι δειγματοληψίας, 53 ημέρες μετά την εισπίεση .....	42
<b>Σχήμα 3.10</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,2m$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$ , στους άξονες x (α) και z (β). Η κατανομές του διαγράμματος (α) προκύπτουν από ολοκλήρωση ως προς το βάθος .....	43
<b>Σχήμα 3.11</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,2m$ , $\alpha_y=0,12m$ και $\alpha_z=0,012m$ .....	44
<b>Σχήμα 3.12</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,1m$ , $\alpha_y=0,02m$ και $\alpha_z=0,001m$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	45
<b>Σχήμα 3.13</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 53 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,1m$ , $\alpha_y=0,02m$ και $\alpha_z=0,001m$ .....	47
<b>Σχήμα 3.14</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,1m$ , $\alpha_y=0,02m$ και $\alpha_z=0,001m$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	50
<b>Σχήμα 3.15</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα z από την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 108 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,1m$ , $\alpha_y=0,02m$ και $\alpha_z=0,001m$ .....	51
<b>Σχήμα 3.16</b> Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν (American Petroleum Institute 1994) .....	53
<b>Σχήμα 3.17</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων .....	55
<b>Σχήμα 3.18</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	57



<b>Σχήμα 3.19</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ .....	58
<b>Σχήμα 3.20</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ ) .....	61
<b>Σχήμα 3.21</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ .....	62
<b>Σχήμα 3.22</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του MTBE από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ ) .....	63
<b>Σχήμα 3.23</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του MTBE κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,5m$ , $\alpha_y=0,025m$ και $\alpha_z=0,0025m$ .....	64
<b>Σχήμα 3.24</b> Κάτοψη ( $\alpha$ ) και τομή ( $\beta$ ) κατά την κατεύθυνση της υπόγειας ροής του δικτύου δειγματοληψίας στο Κέιπ Κοντ (LeBlanc et al. 1991) .....	67
<b>Σχήμα 3.25</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του βρωμιόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) ( $\alpha$ ) και στους άξονες y ( $\beta$ ) και z ( $\gamma$ ). Τα διαγράμματα ( $\alpha$ ) και ( $\beta$ ) προκύπτουν από τις μέγιστες συγκεντρώσεις από κάθε πηγάδι δειγματοληψίας .....	69
<b>Σχήμα 3.26</b> Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha$ ) $\alpha_x=5,3m$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,53m$ και $\beta$ ) $\alpha_x=5,3m$ , $\alpha_y=0,53m$ και $\alpha_z=0,053m$ .....	71
<b>Σχήμα 3.27</b> Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,1m$ , $\alpha_y=0,03m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ ) .....	72
<b>Σχήμα 3.28</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του βρωμιόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,1m$ , $\alpha_y=0,03m$ και $\alpha_z=0,003m$ .....	73

<b>Σχήμα 3.29</b> Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του μολυβδαινικού ιόντος ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ), από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,1\text{m}$ , $\alpha_y=0,03\text{m}$ και $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στους άξονες x (α) και y (β) .....	76
<b>Σχήμα 3.30</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του μολυβδαινικού ιόντος ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) από εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο $x=v_x t/R$ (κέντρο βάρους της μάζας), για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,1\text{m}$ , $\alpha_y=0,03\text{m}$ και $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στους άξονες y (α) και z (β). Το διάγραμμα (α) προκύπτει από τις μέγιστες συγκεντρώσεις σε κάθε σημείο του άξονα x .....	77
<b>Σχήμα 3.31</b> Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους (Boggs et al. 1993) .....	81
<b>Σχήμα 3.32</b> Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του τριτίου από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 328 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις) .....	83
<b>Σχήμα 3.33</b> Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του τριτίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=7\text{m}$ , $\alpha_y=0,7\text{m}$ και $\alpha_z=0,07\text{m}$ , στους άξονες x (α), y (β) και z (γ) .....	85
<b>Σχήμα 3.34</b> Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=7\text{m}$ , $\alpha_y=0,7\text{m}$ και $\alpha_z=0,07\text{m}$ , στους άξονες x (α) και z (β) .....	88
<b>Σχήμα 3.35</b> Κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα y από την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 328 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=7\text{m}$ , $\alpha_y=0,7\text{m}$ και $\alpha_z=0,07\text{m}$ .....	89
<b>Σχήμα 4.1</b> Κάτοψη του δικτύου παρακολούθησης της εξέλιξης της ρύπανσης του πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Killley και Molyaner 1988) .....	92
<b>Σχήμα 4.2</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 13 ημέρες μετά την εισπίεση, στους άξονες x (α, β) και z (γ) .....	94
<b>Σχήμα 4.3</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής $z=1\text{m}$ (α) και $z=3,8\text{m}$ (β) και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=2\text{m}$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,2\text{m}$ .....	96
<b>Σχήμα 4.4</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής $z=1\text{m}$ και για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,03\text{m}$ , $\alpha_y=0,0015\text{m}$ και $\alpha_z=0,00015\text{m}$ .....	97
<b>Σχήμα 4.5</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας	

της πηγής  $z=3.8\text{m}$  και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0015\text{m}$  ..... 98

**Σχήμα 4.6** Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα  $z$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,03\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,0015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,00015\text{m}$  ( $\alpha$ ) και  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0015\text{m}$  ( $\beta$ ) ..... 99

**Σχήμα 4.7** Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα  $y$ , από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,03\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,0015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,00015\text{m}$  ( $\alpha$ ) και  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0015\text{m}$  ( $\beta$ ) ..... 100

**Σχήμα 5.1** Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας και της τάφρου του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους (Brauner και Widdowson 2001) ..... 104

**Σχήμα 5.2** Κατανομές των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 278 ημέρες μετά την έναρξη του πειράματος, στους άξονες  $x$  ( $\alpha$ ) και  $z$  ( $\beta$ ) ..... 106

**Σχήμα 5.3** Κατανομή των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2\text{m}$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12\text{m}$  ..... 108

**Σχήμα 5.4** Κατανομή των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $z$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2\text{m}$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12\text{m}$  ..... 109

**Σχήμα 5.5** Κατανομές των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,12\text{m}$  και  $\alpha_z=0,012\text{m}$ , στους άξονες  $x$  ( $\alpha$ ) και  $z$  ( $\beta$ ) ..... 110

**Σχήμα 5.6** Κατανομές των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,1\text{m}$  και  $\alpha_z=0,01\text{m}$ , στους άξονες  $x$  ( $\alpha$ ) και  $z$  ( $\beta$ ) ..... 111

**Σχήμα 5.7** Κατανομή των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $y$ , από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,1\text{m}$  και  $\alpha_z=0,01\text{m}$  ..... 112

**Σχήμα 5.8** Κατανομές των συγκεντρώσεων της ναφθαλίνης, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,1\text{m}$  και  $\alpha_z=0,01\text{m}$ , στους άξονες  $x$  ( $\alpha$ ) και  $z$  ( $\beta$ ) ..... 113

**Σχήμα 5.9** Κατανομή των συγκεντρώσεων της ναφθαλίνης κατά τη διεύθυνση του άξονα  $y$ , από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,1\text{m}$  και  $\alpha_z=0,01\text{m}$  ..... 113

<b>Σχήμα 6.1</b> Διάγραμμα των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς, που προέκυψαν από την προσομοίωση, ως προς την κλίμακα του πειράματος .....	118
<b>Σχήμα 6.2</b> Διάγραμμα των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς υψηλής αξιοπιστίας ως προς την κλίμακα του πειράματος .....	118
<b>Σχήμα 6.3</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ ), τη χρονική στιγμή $t=647$ ημέρες μετά την εισπίεση .....	122
<b>Σχήμα 6.4</b> Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=1,1m$ , $\alpha_y=0,03m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ ), τη χρονική στιγμή $t=461$ ημέρες μετά την εισπίεση .....	123
<b>Σχήμα A.1</b> Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων (κατά την κατακόρυφη έννοια) του ιόντος χλωρίου και του τετραχλωρομεθανίου (CTET) (το διάστημα εύρεσης των μέσων συγκεντρώσεων για το χλώριο είναι από $Z=-1,5$ έως $Z=-7,5m$ και για το τετραχλωρομεθάνιο από $Z=-1,5$ έως $Z=-6m$ ). Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος για τις χρονικές στιγμές 462, 647 ημέρες μετά την εισπίεση ξεκινούν από τα 5mg/l και αυξάνονται κατά 5mg/l. Αντίστοιχα, του τετραχλωρομεθανίου για τις χρονικές στιγμές 380 και 633 ημέρες ξεκινούν από 0,1μg/l και αυξάνονται κατά 0,1μg/l (Mackay et al. 1986) .....	134
<b>Σχήμα A.2</b> Κατακόρυφες κατανομές των συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων για τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση είναι 10,30,100 και 300 mg/l (Mackay et al. 1986) .....	135
<b>Σχήμα B.1</b> Τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling- MLS) του δικτύου δειγματοληψίας στο Μπόρντεν (Patrick και Barker 1985) .....	136
<b>Σχήμα Γ.1</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση του ιόντος χλωρίου, βενζολίου και τολουολίου. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος ξεκινούν από τα 100 (mg/l)m και αυξάνονται κατά 100 (mg/l)m. Αντίστοιχα, του βενζολίου ξεκινούν από τα 200 (mg/l)m και αυξάνονται κατά 200 (mg/l)m. Τέλος, για το τολουόλιο, 53 ημέρες μετά την εισπίεση, οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων ξεκινούν από τα 100 (mg/l)m και αυξάνονται κατά 100 (mg/l)m ενώ 108 ημέρες μετά την εισπίεση, η καμπύλη αντιστοιχεί σε 50(mg/l)m (Barker, Patrick και Major 1987) .....	137
<b>Σχήμα Γ.2</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος και του p-ξυλολίου, 53 ημέρες μετά την εισπίεση, σε πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται 3m από το σημείο εισπίεσης (Patrick και Barker 1985) .....	138

<b>Σχήμα Δ.1</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος έχουν τιμές 10, 20 και 50 (mg/l)m και για τα τρία διαλύματα εισπίεσης και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994) .....	139
<b>Σχήμα Δ.2</b> Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος που προκύπτει από το διάλυμα εισπίεσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε τιμές συγκεντρώσεων ίσες με 2, 10, 30 και 50 mg/l, για τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994) .....	140
<b>Σχήμα Δ.3</b> Κατανομές των συγκεντρώσεων του βενζολίου που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βενζολίου έχουν τιμές 1, 100, 500 και 1000 (μg/l)m και για τα τρία διαλύματα εισπίεσης και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994) .....	141
<b>Σχήμα Δ.4</b> Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου που προκύπτει από το διάλυμα εισπίεσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε τιμές συγκεντρώσεων ίσες με 1, 10, 50, 100, 500 και 1000 μg/l, για τη χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994) .....	142
<b>Σχήμα Δ.5</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του MTBE που προκύπτει από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του MTBE έχουν τιμές 1, 20 και 50 (mg/l)m και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994) .....	142
<b>Σχήμα Ε.1</b> Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου και διοξίδο(διοξο)μολυβδαινίου και η κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού όπως προκύπτει από τις ισοδυναμικές γραμμές στις 2 Αυγούστου 1985. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος αντιστοιχούν σε 1 και 10 mg/l και του μολυβδαινίου ιόντος σε 0,1 και 1 mg/l (LeBlanc et al. 1991) .....	143
<b>Σχήμα Ε.2</b> Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου, τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε 1, 10 και 50mg/l (LeBlanc et al. 1991) .....	144
<b>Σχήμα Ζ.1</b> Κατακόρυφη κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του τριτίου (α) και βενζολίου (β), κατά τη κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (άξονας x), 328 ημέρες μετά την εισπίεση (Boggs et al. 1993) .....	145

<b>Σχήμα Ζ.2</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του τριτίου σε οριζόντια τομή σε υψόμετρο 59,5m, τη χρονική στιγμή $t=328$ ημέρες μετά την εισπίεση (Boggs et al. 1993) .....	146
<b>Σχήμα Η.1</b> Κατακόρυφη κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του ιωδίου-131, κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (άξονας x), 13 ημέρες μετά την εισπίεση (Killey και Molyaner 1988) .....	147
<b>Σχήμα Θ.1</b> Κατακόρυφες κατανομές των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου ( $\alpha$ ) και της ναφθαλίνης ( $\beta$ ) κατά τη κατεύθυνση της τομής (I-I) που απέχει 4m από τον άξονα x, 278 ημέρες μετά την έναρξη του πειράματος (Brauner και Widdowson 2001) .....	148
<b>Σχήμα Ι.1</b> Κατανομή των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ , στον άξονα x .....	150
<b>Σχήμα Ι.2</b> Πηγάδια δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986) ...	150
<b>Σχήμα Ι.3</b> Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν .....	151
<b>Σχήμα Ι.4</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα $x=41,2m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ ...	152
<b>Σχήμα Ι.5</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα $x=30,7m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με $\alpha_x=3m$ , $\alpha_y=0,3m$ και $\alpha_z=0,03m$ .....	153
<b>Σχήμα Ι.6</b> Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) .....	154
<b>Σχήμα Ι.7</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα $x=16,7m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με $\alpha_x=0,3m$ , $\alpha_y=0,06m$ και $\alpha_z=0,003m$ ...	155
<b>Σχήμα Κ.1</b> Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν και το βενζόλιο .....	156
<b>Σχήμα Κ.2</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα $x=3m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με $\alpha_x=1,2m$ και $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$ .....	157
<b>Σχήμα Κ.3</b> Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα $x=3m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με $\alpha_x=0,1m$ , $\alpha_y=0,02m$ και $\alpha_z=0,001m$ ...	158

**Σχήμα Κ.4** Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=7,6\text{m}$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,1\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,02\text{m}$  και  $\alpha_z=0,001\text{m}$  ... 160

**Σχήμα Λ.1** Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν , το βενζόλιο και το MTBE ..... 161

**Σχήμα Λ.2** Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=45\text{m}$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,5\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,025\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0025\text{m}$  ..... 162

# Άδειες

Τα Σχήματα 3.1, 3.24, 4.1, Α.1, Α.2, Ε.1, Ε.2, Η.1 και Ι.2 χρησιμοποιούνται με άδεια για χρήση σε διπλωματική εργασία από τον εκδοτικό οίκο John Wiley and Sons του περιοδικού Water Resources Research μέσω της εφαρμογής RightsLink του Copyright Clearance Center.

Τα Σχήματα 2.3, 5.1 και Θ.1 χρησιμοποιούνται με άδεια για χρήση σε διπλωματική εργασία από τον εκδοτικό οίκο John Wiley and Sons του περιοδικού Ground Water μέσω της εφαρμογής RightsLink του Copyright Clearance Center.

Το Σχήμα Γ.1 χρησιμοποιείται με άδεια για χρήση σε διπλωματική εργασία από τον εκδοτικό οίκο John Wiley and Sons του περιοδικού Ground Water Monitoring and Remediation μέσω της εφαρμογής RightsLink του Copyright Clearance Center.

Το Σχήμα 2.1 χρησιμοποιείται με άδεια για χρήση σε διπλωματική εργασία από τον εκδοτικό οίκο John Wiley and Sons του βιβλίου Physical and Chemical Hydrogeology, 2nd Edition μέσω της εφαρμογής RightsLink του Copyright Clearance Center.

Για τα Σχήματα 2.2, 3.16, 3.31, Β.1, Γ.2, Δ.1, Δ.2, Δ.3, Δ.4, Δ.5, Ζ.1 και Ζ.2 δεν κατέστη δυνατόν να κατατεθεί αίτηση για άδεια.



## Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία εξετάζεται η μεταφορά των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό φυσικών υδροφορέων. Η ανάγκη πρόβλεψης της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων οδήγησε στην ανάπτυξη μοντέλων μεταφοράς, απλών ή περίπλοκων. Αυτά τα μοντέλα απαιτούν τον προσδιορισμό ενός μεγάλου αριθμού παραμέτρων που περιγράφουν τους φυσικούς και χημικούς μηχανισμούς της μεταφοράς. Εκτός από τον προσδιορισμό των παραμέτρων των μηχανισμών της μεταγωγής, διάχυσης και διασποράς, απαιτείται και ο προσδιορισμός παραμέτρων που περιγράφουν τις χημικές διεργασίες που καθορίζουν τη μεταφορά των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Επίσης, εξαιτίας της δυσκολίας προσδιορισμού από τη μορφή της ρυπασμένης περιοχής της συνεισφοράς των παραπάνω διεργασιών στη μεταφορά των διαλυμένων ρύπων, τα προβλήματα μεταφοράς καθίστανται ανεπαρκώς ορισμένα. Ο σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι να αξιολογηθεί κατά πόσο η ρυπασμένη περιοχή μπορεί να προσομοιωθεί από ένα απλό μοντέλο μεταφοράς, όπως οι αναλυτικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς.

Για το σκοπό αυτό, αναζητήθηκαν στην επιστημονική βιβλιογραφία πειράματα μεταφοράς με ιχνηθέτες σε φυσικούς υδροφορείς, όπου τα υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά των υδροφορέων και οι ποσότητες των ρύπων που εισήχθησαν στην κορεσμένη ζώνη ήταν επαρκώς προσδιορισμένα. Παράλληλα, αναζητήθηκαν αναλυτικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης τριδιάστατης μεταφοράς διαλυμένου ρύπου που υπόκειται σε μονοδιάστατη μεταγωγή και τριδιάστατη υδροδυναμική διασπορά. Επιλέχθηκαν επτά δοκιμές πεδίου που διενεργήθηκαν σε τέσσερις ήδη ρυπασμένους χώρους, και αναζητήθηκαν αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς που να αντιστοιχούν στις αρχικές συνθήκες των επί τόπου δοκιμών. Τα πειράματα μεταφοράς που παρουσιάζονται αντιστοιχούν σε στιγμιαία έκλυση ρύπου από σημειακή ή ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή καθώς και σε συνεχή έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης.

Για την απάντηση του βασικού ερωτήματος, έγινε προσπάθεια προσομοίωσης της περιοχής στην οποία εξαπλώθηκαν οι ιχνηθέτες με την εφαρμογή των αναλυτικών εξισώσεων. Στις περιπτώσεις που δεν βρέθηκαν πειραματικά δεδομένα για τη μεταφορά των ιχνηθετών, επιλέχθηκαν κατάλληλες τιμές των παραμέτρων των μηχανισμών της ρόφησης και υποβάθμισης, ώστε να προκύψουν αξιόπιστα αναλυτικά αποτελέσματα. Με δεδομένες τις υπόλοιπες παραμέτρους των αναλυτικών λύσεων της εξίσωσης μεταφοράς, αναζητήθηκαν

εκείνες οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες επιτυγχάνεται προσαρμογή των αναλυτικών στα πειραματικά δεδομένα. Αρχικά, οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς προσδιορίστηκαν από εμπειρικές σχέσεις και έγινε προσπάθεια σύγκλισης του εύρους και της μέγιστης συγκέντρωσης των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση. Εφόσον δεν επιτεύχθηκε σύγκλιση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς από τις εμπειρικές σχέσεις, πραγματοποιήθηκαν προσπάθειες σύγκλισης με τη μέθοδο δοκιμής-λάθους. Τέλος, για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που επιλέχτηκαν, πραγματοποιήθηκε σύγκριση των πειραματικών και αναλυτικών δεδομένων για ρύπους που παρουσιάζουν ρόφηση και υποβάθμιση, επιλέγοντας τις αντίστοιχες παραμέτρους από την επιστημονική βιβλιογραφία ή από εργαστηριακές δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν παράλληλα με τα πειράματα μεταφοράς.

Το βασικό συμπέρασμα που προέκυψε είναι ότι η επάρκεια προσομοίωσης της ρυπασμένης περιοχής με την εφαρμογή αναλυτικών εξισώσεων εξαρτάται από τη διακύμανση των τιμών των υδρογεωλογικών παραμέτρων του υδροφορέα. Η διαδικασία προσομοίωσης έδειξε ότι οι αναλυτικές εξισώσεις μπορούν να προσομοιώσουν επαρκώς το εύρος της ρυπασμένης περιοχής σε σχετικά ομοιογενείς υδροφορείς. Επιπλέον, για αυτή την κατηγορία υδροφορέων παρατηρήθηκε σχετικά ικανοποιητική προσομοίωση της μέγιστης συγκέντρωσης των κατανομών του πειράματος. Αντίθετα, σε υδροφορέα που παρουσιάζει μεγάλη ανομοιογένεια, δεν επιτεύχθηκε επαρκής προσομοίωση του πραγματικού εύρους της ρυπασμένης περιοχής. Παράλληλα, οι συντελεστές μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από τη διαδικασία της προσομοίωσης παρουσίασαν τάση αύξησης με την κλίμακα, όπως αναμένονταν με βάση τα θεωρητικά δεδομένα για το φαινόμενο της διασποράς, και ήταν γενικά ίδιας τάξης μεγέθους με τις αντίστοιχες μετρημένες τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που βρέθηκαν στην επιστημονική βιβλιογραφία.

Το παραπάνω συμπέρασμα ενθαρρύνει την χρησιμοποίηση απλών αναλυτικών εξισώσεων για την πρόβλεψη της μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό σχετικά ομοιογενών υδροφορέων. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό, καθώς για αυτή την κατηγορία υδροφορέων, απλά μοντέλα μεταφοράς όπως οι αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς μπορούν να δώσουν μια πρώτη εκτίμηση για τη μεταφορά των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό, πριν χρησιμοποιηθούν πολυπλοκότερα και ακριβέστερα μοντέλα μεταφοράς.

**Λέξεις κλειδιά:** μεταφορά διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό, πειράματα μεταφοράς με ιχνηθέτες, αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς, συντελεστές μηχανικής διασποράς, ανομοιογένεια υδροφορέα

**Title:** Simulation of tracer tests in aquifers  
with analytical solutions of the solute transport equation

## **Abstract**

This thesis examines the transport of dissolved contaminants in the groundwater of natural aquifers. The need to predict solute transport led to the development of transport models, simple or complex. These models require the determination of a large number of parameters that describe the physical and chemical mechanisms of transport. Apart from determining the parameters for advection, diffusion and dispersion, it is required to define parameters that describe the chemical processes that dissolved contaminants are subjected to during their transport in groundwater. What is more, because of the difficulty in identifying, on the basis of the contaminant plume shape, the contribution of these processes to the transport of dissolved contaminants, transport problems are ill defined. The thesis aims to evaluate whether contaminant plumes can be simulated by a simple transport model such as the analytical solutions of the differential transport equation.

In order to achieve this goal, a search was conducted in the scientific literature for transport experiments with tracers in natural aquifers, with well defined (a) the hydrogeological characteristics of the aquifer and (b) the quantities of contaminants introduced into the saturated zone. Moreover, analytical solutions of the three-dimensional solute transport differential equation were sought, where dissolved contaminants are subjected to one-dimensional advection and three-dimensional hydrodynamic dispersion. Seven field-scale natural gradient tests were selected, which were conducted in four already contaminated aquifers. Analytical solutions of the transport equation were matched to the initial conditions of the field-scale tests. The chosen transport experiments represent instantaneous pulse release from a point or rectangular parallelepiped source, and continuous contaminant release from rectangular parallelogram source of constant concentration.

To answer the basic question, it was attempted to simulate the tracer plumes with analytical equations. When experimental data on tracer transport were missing, sorption and degradation parameters were selected from the literature, in order to generate reliable analytical results. With known values for all the other parameters, dispersivity values were sought to achieve reasonable matching between analytical and experimental data. At first, dispersivity values were determined from empirical

relationships and it was attempted to match the range and maximum concentration of the experimental and analytical distributions, in the longitudinal and transverse direction. If convergence of experimental and analytical concentration distributions was not achieved for the dispersivities determined from the empirical relationships, it was attempted to achieve convergence by applying the trial-and-error method. Finally, for the dispersivities selected, a comparison of the experimental and analytical data for contaminants that exhibit sorption and degradation was conducted, by selecting the corresponding parameters from the scientific literature or from laboratory tests accompanying the transport experiments.

The main conclusion drawn is that the adequacy of contaminant plume simulation by applying analytical equations depends on the variance of the aquifer's hydrogeological parameters. Simulation results indicated that the analytical equations can adequately reproduce the range of contaminant plumes in relatively homogeneous aquifers. Furthermore, for this aquifer category, the simulation of the maximum concentration of the experimental concentration distributions was relatively satisfactory. On the contrary, in an aquifer that is very heterogeneous, adequate simulation of the real extent of contaminant plumes was not achieved. The dispersivities that emerged from the simulation process tended to increase with scale, as expected based on the theory behind mechanical dispersion, and were generally of the same order of magnitude as the corresponding measured dispersivities found in the scientific literature.

These conclusions encourage the use of simple analytical equations for predicting the transport of dissolved contaminants in relatively homogeneous aquifers. This is particularly important, because for this aquifer category, a simple transport model, such as the analytical solutions of the transport equation, can give an initial estimate of the solute transport in groundwater before applying more complex and more accurate transport models.

**Key words:** solute transport in groundwater, tracer tests, analytical solutions of the solute transport equation, dispersivities, aquifer heterogeneity

## Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή

Η ρύπανση του υπόγειου νερού από επικίνδυνα οργανικά χημικά έχει προκαλέσει τις τελευταίες τέσσερις δεκαετίες μεγάλη ανησυχία στην παγκόσμια επιστημονική κοινότητα. Στις ΗΠΑ και σε άλλες βιομηχανικές χώρες, έχουν καταγραφεί στο διάστημα αυτό πολλά περιστατικά εκτεταμένης ρύπανσης από χλωριωμένους διαλύτες, φυτοφάρμακα και αρωματικούς υδρογονάνθρακες. Ένας παράγοντας που καθιστά τη ρύπανση του υπόγειου νερού, λόγω φυσικών διεργασιών ή ανθρώπινης παρέμβασης, ένα σοβαρό πρόβλημα είναι η μακρόχρονη φύση του. Οι ρύποι εισχωρούν σταδιακά στο υπόγειο νερό και μεταφέρονται στην κατεύθυνση της υπόγειας ροής, ενώ σε πολλές περιπτώσεις παραμένουν σε αυτό για μεγάλες χρονικές περιόδους.

Η ανησυχία για τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις της ρύπανσης του υπόγειου νερού έδωσε έναυσμα για την βελτίωση των μεθόδων πρόβλεψης της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Τα πειράματα μεταφοράς με ιχνηθέτες σε φυσικούς υδροφορείς βοήθησαν σημαντικά στην κατανόηση των φυσικών και χημικών μηχανισμών της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων και στην βελτίωση και ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων περιγραφής των μηχανισμών αυτών. Στις ελεγχόμενες δοκιμές πεδίου, τα χαρακτηριστικά του υδροφορέα, οι ποσότητες και οι συνθήκες εισαγωγής των ρύπων στο υπόγειο νερό είναι επαρκώς προσδιορισμένες. Έτσι ο ρόλος αυτών των δοκιμών είναι καθοριστικός για την κατανόηση της επιρροής των ανομοιογενειών των φυσικών υδροφορέων στους φυσικούς μηχανισμούς της μεταφοράς.

### 1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής

Η παρούσα διπλωματική εστιάζει στη μεταφορά διαλυμένων ρύπων σε κορεσμένους υδροφορείς. Η κατανομή των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό περιγράφεται από την διαφορική εξίσωση μεταφοράς, η εφαρμογή της οποίας απαιτεί αφ' ενός γνώση των ταχυτήτων του πεδίου ροής και αφ' ετέρου προσδιορισμό των παραμέτρων που περιγράφουν τις διεργασίες: μεταγωγή, μηχανική διασπορά, μοριακή διάχυση, ρόφηση και υποβάθμιση.

Ο μεγάλος αριθμός παραμέτρων της εξίσωσης μεταφοράς και το γεγονός ότι η συμβολή κάθε διεργασίας δεν μπορεί να διαγνωστεί «εκ του αποτελέσματος» (δηλαδή από τη μορφή της κατανομής), καθιστά τα προβλήματα μεταφοράς ανεπαρκώς ορισμένα (ill-defined).

Το γεγονός ότι η πιο πάνω δυσκολία δεν μπορεί να ξεπεραστεί ούτε με περίπλοκα μοντέλα μεταφοράς έδωσε το κίνητρο για να εξεταστεί στην παρούσα διπλωματική πόσο καλά μπορεί να προσομοιωθεί η ρυπασμένη περιοχή, στο πεδίο, από απλές αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς.

Για να διερευνηθεί το πιο πάνω ερώτημα, αναζητήθηκαν στην επιστημονική βιβλιογραφία δοκιμές πεδίου στις οποίες έγινε εισαγωγή διαλυμάτων ρύπων σε κορεσμένους υδροφορείς υπό συνθήκες τέτοιες που να μπορούν να προσομοιωθούν από τις συνοριακές συνθήκες κατάλληλων αναλυτικών λύσεων. Επιλέχθηκαν επτά δοκιμές, οι οποίες έγιναν σε τέσσερις ήδη ρυπασμένους χώρους, στο Μπόρντεν (Borden) του Καναδά, στο Κέιπ Κοντ (Cape Cod), στο Κολόμπους (Columbus) των ΗΠΑ και στο Τουίν Λέικ (Twin Lake) του Καναδά.

Τα πειραματικά δεδομένα συγκρίνονται με τα αποτελέσματα των αναλυτικών λύσεων ως προς δύο κύρια χαρακτηριστικά της κατανομής των συγκεντρώσεων, (1) τη μέγιστη συγκέντρωση και (2) το εύρος της ρυπασμένης περιοχής στις τρεις διαστάσεις. Οι αρχικές απόπειρες προσομοίωσης των πειραματικών αποτελεσμάτων ανέδειξαν τον καθοριστικό ρόλο της μηχανικής διασποράς, όπως ίσως ήταν αναμενόμενο σε περιστατικά στα οποία υπάρχει αρκετά καλή γνώση των υπολοίπων παραμέτρων. Κατόπιν τούτου, η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε συνίστατο στον προσδιορισμό, μέσω δοκιμών, εκείνων των τιμών της μηχανικής διασποράς για τις οποίες η προσαρμογή της αναλυτικής λύσης στα πειραματικά δεδομένα (fitting) είναι ικανοποιητική. Όπου δεν ήταν δυνατόν να ταιριάξουν και τα δύο κύρια χαρακτηριστικά, προτεραιότητα δόθηκε στην προσομοίωση του εύρους της ρυπασμένης περιοχής.

### 1.2 Οργάνωση κειμένου

Το *Κεφάλαιο 2* περιέχει το απαραίτητο υπόβαθρο για το φαινόμενο της μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό και δίνει ιδιαίτερη έμφαση στο φαινόμενο της διασποράς. Στα επόμενα κεφάλαια παρουσιάζονται η διαδικασία και τα αποτελέσματα της σύγκρισης πειραματικών και αναλυτικών αποτελεσμάτων, ομαδοποιημένα σύμφωνα με την κατηγορία της αναλυτικής λύσης που κρίθηκε ότι προσομοιώνει καλύτερα τις συνοριακές συνθήκες στην πηγή σε κάθε πείραμα.

Στο *Κεφάλαιο 3* παρουσιάζονται οι δοκιμές, τα αποτελέσματα των οποίων προσομοιώθηκαν με την λύση της εξίσωσης μεταφοράς για σημειακή πηγή στιγμιαίας έκλυσης μάζας ρύπου. Αρχικά, παρουσιάζονται τρεις επί τόπου δοκιμές στο Μπόρντεν, όπου η προσαρμογή έγινε με βάση τα πειραματικά αποτελέσματα του χλωριόντος που αποτελεί τον ιχνηθέτη των πειραμάτων. Επιπλέον, για κάθε δοκιμή πραγματοποιήθηκε σύγκριση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για οργανικούς ρύπους που ανήκουν στις κατηγορίες των χλωριωμένων οργανικών ρύπων (CHC), των αρωματικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX) και των προσθέτων βενζίνης (μεθυλο-τριτοταγής-βουτυλαιθέρας-MTBE). Στη συνέχεια, παρουσιάζονται τα πειραματικά και αναλυτικά αποτελέσματα του πειράματος μεταφοράς στο Κέιπ Κοντ, που περιελάμβανε την εισπίεση ιχνηθέτη και ανόργανων ρύπων. Στο τέλος του κεφαλαίου παρουσιάζεται η δεύτερη επί τόπου δοκιμή στο Κολόμπους, όπου σε

## Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

σχέση με τις δοκιμές στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ έγινε σε υδροφορέα με μεγάλη ανομοιογένεια.

Στο *Κεφάλαιο 4* παρουσιάζεται η επί τόπου δοκιμή στο Τουίν Λέικ, τα αποτελέσματα της οποίας προσομοιώθηκαν με την λύση της εξίσωσης μεταφοράς για στιγμιαία έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή. Το πείραμα μεταφοράς περιελάμβανε την εισπίεση σε μεγάλο κατακόρυφο διάστημα ενός ραδιοϊσοτόπου.

Στο *Κεφάλαιο 5* παρουσιάζεται η τρίτη επί τόπου δοκιμή στο Κολόμπους, τα αποτελέσματα της οποίας προσομοιώθηκαν με την λύση της εξίσωσης μεταφοράς για έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης. Το πείραμα μεταφοράς αφορούσε την εισαγωγή στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα ενός ιχνηθέτη και συστατικών καυσίμων σε μη υδατική φάση (NAPL).

Το *Κεφάλαιο 6* παρουσιάζει συγκριτικά τα αποτελέσματα από την προσομοίωση κάθε επί τόπου δοκιμής ξεχωριστά και αξιολογεί κατά πόσο οι αναλυτικές λύσεις, πέρα από την προσαρμογή στα πειραματικά δεδομένα, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για προβλέψεις.

Το *Κεφάλαιο 7* δίνει μια σύνοψη της δουλειάς που έγινε και των συμπερασμάτων στα οποία αυτή κατέληξε.

Τέλος, στα *Παραρτήματα*, που ακολουθούν μετά την βιβλιογραφία, παρουσιάζονται οι κατανομές συγκεντρώσεων που προέκυψαν από τις επί τόπου δοκιμές και δίνονται αναλυτικά παραδείγματα υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων και των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων που προέκυψαν από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης.

## Κεφάλαιο 2 Μεταφορά διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό

Αναζητήθηκαν αναλυτικές και ημιαναλυτικές (δηλαδή προσεγγιστικές αναλυτικές) λύσεις της διαφορικής εξίσωσης τριδιάστατης μεταφοράς διαλυμένου ρύπου στο υπόγειο νερό, για την προσομοίωση των πειραμάτων μεταφοράς που επιλέχτηκαν. Τα πειράματα μεταφοράς που παρουσιάζονται στην διπλωματική αυτή αντιστοιχούν σε στιγμιαία έκλυση ρύπου από σημειακή ή ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή καθώς και σε συνεχή έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης. Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται οι αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς που αντιστοιχούν στις παραπάνω αρχικές συνθήκες των πειραμάτων. Αυτές οι εξισώσεις που επιλέχτηκαν αφορούν μονοδιάστατη μεταγωγή και τριδιάστατη υδροδυναμική διασπορά του διαλυμένου ρύπου στο υπόγειο νερό πορώδους μέσου, με θεώρηση υποβάθμισης πρώτης τάξης στην υδατική και στερεά φάση καθώς και γραμμική ρόφηση. Παράλληλα παρουσιάζονται οι μηχανισμοί μεταφοράς και οι σχετικές παράμετροι που συνδέονται με αυτούς.

### 2.1 Αναλυτικές εξισώσεις μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \pm \frac{r}{n} \quad (2.1)$$

Η διαφορική εξίσωση (2.1) περιγράφει την τριδιάστατη μεταφορά διαλυμένου ρύπου σε κορεσμένο μέσο υπό ομοιόμορφη ροή, ο οποίος υπόκειται σε μονοδιάστατη μεταγωγή και τριδιάστατη διασπορά (εξίσωση 18.17, Domenico και Schwartz 1998). Στην παραπάνω διαφορική εξίσωση,  $C=C(x,y,z,t)$  είναι η συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου ( $M/L^3$ ),  $x,y,z$  είναι η διαμήκης (δηλαδή στην κατεύθυνση της ροής), η οριζόντια και η κατακόρυφη εγκάρσια συντεταγμένη αντίστοιχα,  $t$  είναι ο χρόνος και  $v_x$  είναι η ταχύτητα μεταγωγής ( $L/T$ ). Επίσης  $D_x$ ,  $D_y$ ,  $D_z$  είναι οι συντελεστές διαμήκους, οριζόντιας και κατακόρυφης εγκάρσιας υδροδυναμικής διασποράς αντίστοιχα. Τέλος το  $r$  χρησιμοποιείται συμβολικά ως η μάζα που παράγεται ή καταναλώνεται ανά μονάδα όγκου και χρόνου ( $M/L^3T$ ) λόγω κάποιας αντίδρασης και  $n$  είναι το πορώδες.

Αν θεωρήσουμε υποβάθμιση πρώτης τάξης λόγω ραδιενεργού υποβάθμισης, βιοαποδόμησης ή υδρόλυσης, τότε ο όρος  $\pm r/n$  της διαφορικής εξίσωσης (2.1) μπορεί να αντικατασταθεί από τον όρο  $-\lambda C$ , όπου  $\lambda$  είναι ο ρυθμός υποβάθμισης πρώτης τάξης ( $T^{-1}$ ) του ρύπου. Παράλληλα ο ίδιος όρος της εξίσωσης (2.1) αντικαθίσταται και από τον όρο  $(K_p \rho_d/n) \partial C / \partial t$  ώστε να περιγραφεί η γραμμική ρόφηση του διαλυμένου ρύπου όπου η ισορροπία μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης επέρχεται στιγμιαία. Στον παραπάνω όρο το  $K_p$  είναι ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης ( $L^3/M$ ) και το  $\rho_d$  ( $M/L^3$ ) είναι η ξηρή πυκνότητα του εδάφους.



Με βάση τα παραπάνω και θεωρώντας υποβάθμιση διαλυμένου και ροφημένου ρύπου με τον ίδιο ρυθμό  $\lambda$ , προκύπτει η μορφή της διαφορικής εξίσωσης (2.1) για την οποία αναζητηθήκαν αναλυτικές λύσεις για τις διαφορετικές συνοριακές συνθήκες που παρουσιάζονται στις παρακάτω υποενότητες:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_y}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{D_z}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{v_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (2.2)$$

Στη διαφορική εξίσωση (2.2) το  $R$  είναι ο συντελεστής υστέρησης του ρύπου και ισούται με  $1+(K_p \rho_d/n)$ .

### 2.1.1 Αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή

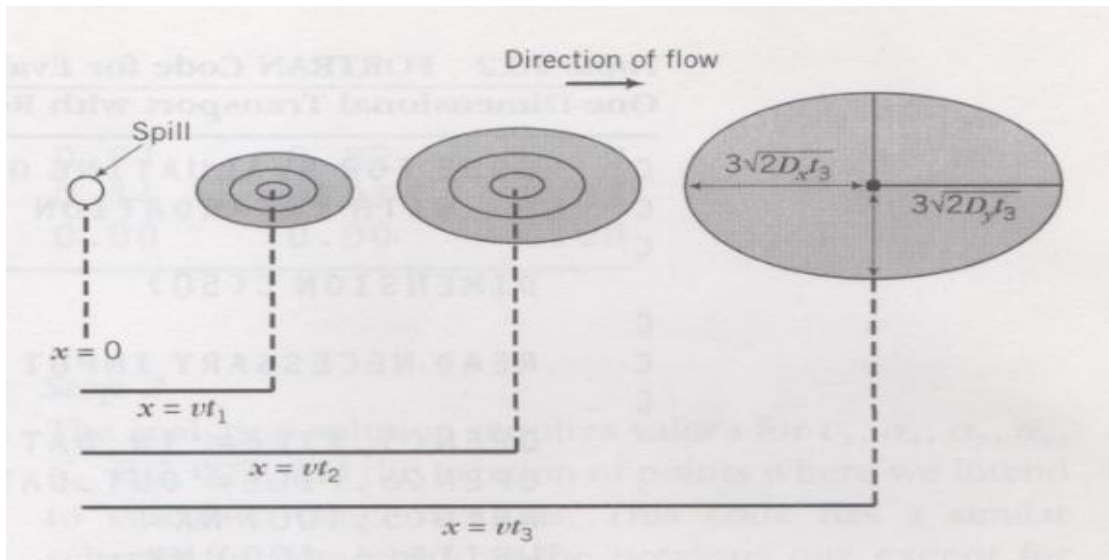
Η λύση της διαφορικής εξίσωσης (2.2) για σημειακή πηγή στιγμιαίας έκλυσης ρύπου μάζας  $M$  που δεν ροφάται ( $R=1$ ) είναι η εξίσωση (2.3). Η έκλυση της μάζας  $M$  γίνεται τη χρονική στιγμή  $t=0$  στη θέση  $x=0, y=0, z=0$ . Η αναλυτική εξίσωση (2.3) ισχύει για μεταγωγή της μάζας  $M$  κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$  με ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$ , θεωρώντας μέσο που εκτείνεται στο άπειρο κατά την οριζόντια και κατακόρυφη εγκάρσια διεύθυνση και μόνο κατά το θετικό ημιάξονα στην κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού.

$$C(x, y, z, t) = \frac{M/n}{[8(\pi t)^{\frac{3}{2}}(D_x D_y D_z)^{0,5}]} \exp\left(-\frac{(x-v_x t)^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t} - \lambda t\right) \quad (2.3)$$

Η εξίσωση (2.3) είναι η λύση της διαφορικής εξίσωσης (2.2) που παρουσιάστηκε από τον Baetsle (1969) διαιρεμένη με το πορώδες  $n$ . Η διαίρεση της εξίσωσης του Baetsle (1969) με το πορώδες έγινε έπειτα από την μελέτη των αντίστοιχων εξισώσεων για ρύπο που δεν ροφάται ή διασπάται που παρουσιάστηκαν από τον Sun (1996) και τον Hunt (1978). Οι αναλυτικές εξισώσεις των Sun (εξίσωση 3.1.22, 1996) και Hunt (εξίσωση 10, 1978) για στιγμιαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή διαφέρουν από αυτή του Baetsle (1969) μόνο ως προς την παρουσία του πορώδους. Παράλληλα, οι εξισώσεις των Sun (1996) και Hunt (1978) προέκυψαν με βάση τη θεώρηση ότι η μάζα  $M$  που εισπιάστηκε τη χρονική στιγμή  $t=0$  προκύπτει κάθε χρονική στιγμή (συμπεριλαμβανομένης της χρονικής στιγμής  $t=0$ ) από την ολοκλήρωση της συγκέντρωσης στο συνολικό όγκο κενών που καταλαμβάνει η ρυπασμένη περιοχή ( $4\pi n \int_0^\infty C r^2 dr = M$ , η συνθήκη σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων). Έπειτα από την μελέτη των αρχικών συνθηκών των παραπάνω εξισώσεων κατέστη σαφές ότι η εξίσωση του Baetsle (1969) που προέκυψε από την επέκταση στο τριδιάστατο επίπεδο της μονοδιάστατης λύσης του Crank (1956) δεν ικανοποιούσε την παραπάνω συνθήκη καθώς απουσίαζε το πορώδες. Επομένως επιλέχτηκε η εξίσωση του Baetsle (1969) καθώς συμπεριλαμβάνεται η υποβάθμιση πρώτης τάξης στην διορθωμένη της μορφή, δηλαδή διαιρέθηκε με το πορώδες ώστε να ικανοποιείται η παραπάνω απαραίτητη συνθήκη.

Στην εξίσωση (2.3) η ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$  μπορεί να αντικατασταθεί από την ταχύτητα κίνησης του ρύπου  $v_c = v_x/R$  ενσωματώνοντας έτσι την υστέρηση λόγω γραμμικής ρόφησης. Σε αυτήν την περίπτωση, οι συντελεστές υδροδυναμικής διασποράς  $D_x$ ,  $D_y$ ,  $D_z$  διαιρούνται επίσης με τον συντελεστή υστέρησης  $R$  και έτσι η εξίσωση (2.3) μπορεί να περιγράψει και γραμμική ρόφηση του ρύπου.

Το κέντρο μάζας της ρυπασμένης περιοχής σε κάθε χρονική στιγμή  $t$  βρίσκεται κατά μήκος του άξονα  $x$ , δηλαδή κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού στη θέση  $x=v_x t$  (ή  $x=v_x t/R$ ),  $y=z=0$ . Όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.1, η ρυπασμένη περιοχή έχει ελλειπτική μορφή αφού η διαδικασία της μηχανικής διασποράς είναι ανισοτροπική. Η διασπορά είναι μεγαλύτερη κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (διαμήκης μηχανική διασπορά) σε σχέση με τις εγκάρσιες διευθύνσεις. Σε μικρές ταχύτητες μεταγωγής η μοριακή διάχυση είναι ο κύριος μηχανισμός της διασποράς και σε αυτήν την περίπτωση η ρυπασμένη περιοχή έχει κυκλική μορφή αφού η διαμήκης και εγκάρσια διασπορά είναι σχεδόν ίσες. Η εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής γύρω από το κέντρο μάζας είναι ίση με  $3\sigma$ , όπου  $\sigma$  είναι η τυπική απόκλιση σε κάθε διεύθυνση που είναι ίση με  $(2Dt)^{0.5}$ . Εντός της ρυπασμένης περιοχής που ορίζεται από τις τυπικές αποκλίσεις  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  και  $\sigma_z$  βρίσκεται το 99,7% της μάζας  $M$ .

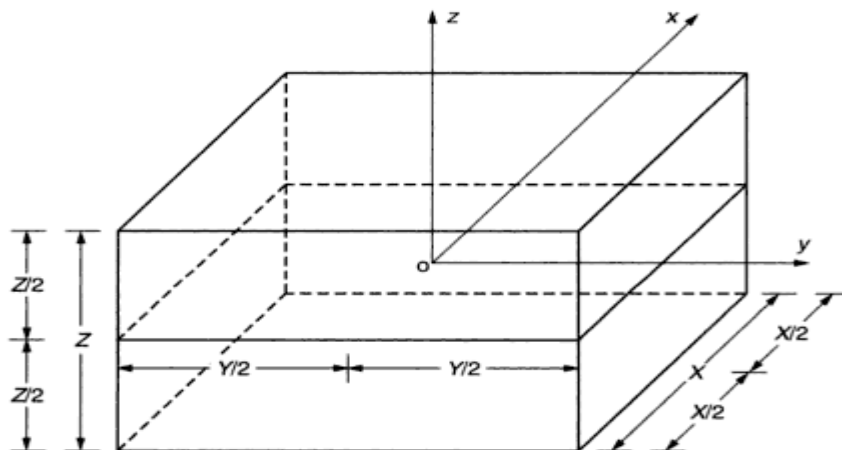


Σχήμα 2.1 Εξέλιξη της ρύπανσης σε κάτοψη, για σημειακή πηγή στιγμιαίας έκλυσης ρύπου σε τρεις διαφορετικές χρονικές στιγμές (Domenico και Schwartz 1998)

### 2.1.2 Αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή

Την επίλυση της εξίσωσης (2.2) για στιγμιαία έκλυση ρύπου με μηδενική υποβάθμιση και συντελεστή υστέρησης  $R=1$  έδωσε πρώτος ο Hunt (εξίσωση 33, 1978). Θεώρησε πηγή μορφής κύβου και ολοκλήρωσε το μοντέλο σημειακής πηγής ως προς τις διαστάσεις της.

Οι αρχικές διαστάσεις της πηγής ως προς τους άξονες  $x, y, z$  είναι  $X, Y, Z$  αντίστοιχα. Η συγκέντρωση εντός του παραλληλεπιπέδου τη χρονική στιγμή  $t=0$  είναι  $C_0 = M/(nXYZ)$ , όπου  $M$  είναι η μάζα του ρύπου που εκλύθηκε και  $n$  είναι το πορώδες. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.2, η αρχή του συστήματος αξόνων βρίσκεται στο κέντρο μάζας του παραλληλεπιπέδου και ο υδροφόρας εκτείνεται στο άπειρο σε όλες τις διαστάσεις του συστήματος αξόνων. Η μάζα εντός του παραλληλεπιπέδου είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη και η ταχύτητα μεταγωγής σταθερή προς την κατεύθυνση  $x$ .



Σχήμα 2.2 Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή (Batu 2005)

Ο Batu (2005) έλυσε τη διαφορική εξίσωση (2.2) για γραμμική ρόφηση με μηδενική υποβάθμιση, θεωρώντας πηγή μορφής ορθογωνίου παραλληλεπιπέδου. Με βάση τις παραπάνω παραδοχές και θεωρώντας ότι η συγκέντρωση εκτός του παραλληλεπιπέδου τη χρονική στιγμή  $t=0$  είναι μηδενική όπως και όταν οι συντεταγμένες  $x, y, z$  τείνουν στο άπειρο, προέκυψε η παρακάτω λύση:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \left( \operatorname{erf} \left( \frac{x - \frac{v_x t}{R} + \frac{X}{2}}{2\sqrt{D_x t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - \frac{v_x t}{R} - \frac{X}{2}}{2\sqrt{D_x t/R}} \right) \right) \left( \operatorname{erf} \left( \frac{y + Y/2}{2\sqrt{D_y t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - Y/2}{2\sqrt{D_y t/R}} \right) \right) \left( \operatorname{erf} \left( \frac{z + Z/2}{2\sqrt{D_z t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - Z/2}{2\sqrt{D_z t/R}} \right) \right) \quad (2.4)$$

Θα πρέπει να τονιστεί ότι για το πείραμα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Κεφάλαιο 4), για την προσομοίωση του οποίου θα χρησιμοποιηθεί η εξίσωση (2.4), υπάρχει στη βιβλιογραφία μελέτη (Moltzaner και Killely 1988) στην οποία προσομοιώνονται τα αποτελέσματα του πειράματος με την ίδια εξίσωση.

### 2.1.3 Αναλυτική εξίσωση έκλυσης ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης

Τα αναλυτικά μοντέλα έχουν αποδειχθεί να είναι ένα σημαντικό εργαλείο στη μελέτη της κίνησης των ρύπων στο υπόγειο νερό. Τα μοντέλα τριών διαστάσεων είναι συχνά προϊόν επιλύσεων μιας διάστασης γι' αυτό και η κατανόησή τους απαιτεί τη γνώση αυτών των μονοδιάστατων λύσεων. Έτσι αν προσδιοριστούν τρεις μονοδιάστατες λύσεις, η λύση στις τρεις διαστάσεις μπορεί να δοθεί προσεγγιστικά από τη σχέση  $C(x,y,z,t) = C(x,t) \times C(y,t) \times C(z,t)$ .

Η τεχνική αυτή χρησιμοποιήθηκε από τους Domenico και Robbins (1985) για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης (2.2) για πηγή σταθερής έντασης, συνεχούς έκλυσης ρύπου, για μηδενική υποβάθμιση ( $\lambda=0$ ) και για συντελεστή υστέρησης  $R=1$ . Αντίστοιχα ο Domenico (1987) έκανε επίλυση της διαφορικής εξίσωσης (2.2) θεωρώντας υποβάθμιση πρώτης τάξης στην υδατική φάση με την απουσία ρόφησης. Τέλος παραλλαγές της εξίσωσης του Domenico (1987) έχουν χρησιμοποιηθεί σε λογισμικά παρακολούθησης της φυσικής εξασθένησης των ρύπων όπως το BIOCHLOR (U.S.EPA 2000, 2002).

Για ορθογωνική πηγή διαστάσεων  $Y, Z$  ως προς τον οριζόντιο και κατακόρυφο εγκάρσιο άξονα αντίστοιχα που βρίσκεται στη θέση  $x=0$  και μεταξύ  $-Y/2 < y < Y/2$ ,  $-Z/2 < z < Z/2$ , έγινε χωρισμός της διαφορικής εξίσωσης (2.2) σε τρεις επιμέρους μονοδιάστατες διαφορικές εξισώσεις:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{v_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{D_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda C, \quad 0 \leq x \leq \infty \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_y}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}, \quad -\infty \leq y \leq \infty \quad (2.6)$$

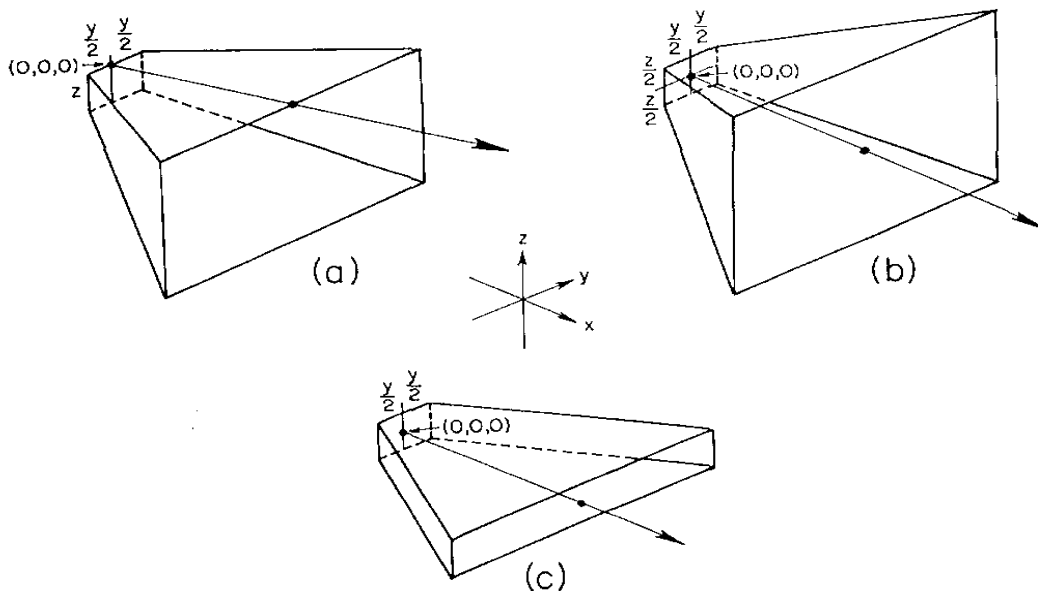
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_z}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad -\infty \leq z \leq \infty \quad (2.7)$$

Η αναλυτική λύση της διαφορικής εξίσωσης (2.5) για συντελεστή υστέρησης  $R=1$ , δόθηκε από τον Bear (εξίσωση 7-133, 1979) για αρχικές και συνοριακές συνθήκες  $C(0,t)=C_0$ ,  $C(x,0)=0$  και  $C(\infty,t)=0$ . Από τις παραπάνω αρχικές συνθήκες η πρώτη ορίζει τη σταθερή συγκέντρωση στην πηγή για κάθε χρονική στιγμή, ενώ η δεύτερη ορίζει ότι τη χρονική στιγμή μηδέν κάθε σημείο σε απόσταση  $x$  από την πηγή έχει συγκέντρωση μηδέν. Παράλληλα η αναλυτική λύση του Bear (1979) προσαρμόστηκε για να περιληφθεί γραμμική ρόφηση με την αντικατάσταση των συντελεστών υδροδυναμικής διασποράς  $D$  από  $D/R$  και της ταχύτητας μεταγωγής  $v_x$  από την ταχύτητα κίνησης του ρύπου  $v_x/R$ . Αντίστοιχα οι αναλυτικές λύσεις των διαφορικών εξισώσεων (2.6) και (2.7) για συντελεστή υστέρησης  $R=1$  δόθηκαν από τον Crank (εξίσωση 2.15, 1975) και προσαρμόστηκαν αντίστοιχα για να περιλαμβάνουν γραμμική ρόφηση.

Η ημιαναλυτική λύση που προκύπτει από το γινόμενο των τριών μονοδιάστατων λύσεων είναι:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \left[ \exp\left(\frac{xv_x}{2D_x} \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda R D_x}{v_x^2}\right)^{0,5}\right)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v_x t/R \left(1 + \frac{4\lambda R D_x}{v_x^2}\right)^{0,5}}{2\sqrt{D_x t/R}}\right) + \right. \\ \left. \exp\left(\frac{xv_x}{2D_x} \left(1 + \left(1 + \frac{4\lambda R D_x}{v_x^2}\right)^{0,5}\right)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + v_x t/R \left(1 + \frac{4\lambda R D_x}{v_x^2}\right)^{0,5}}{2\sqrt{D_x t/R}}\right) \right] \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{y+Y/2}{2\sqrt{D_y t/R}}\right) - \right. \\ \left. \operatorname{erf}\left(\frac{y-Y/2}{2\sqrt{D_y t/R}}\right) \right] \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{z+Z/2}{2\sqrt{D_z t/R}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{z-Z/2}{2\sqrt{D_z t/R}}\right) \right] \quad (2.8)$$

Η εξίσωση (2.8) περιγράφει μεταγωγή του διαλυμένου ρύπου μόνο κατά τη θετική διεύθυνση του άξονα  $x$  και εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής τόσο κατά τη θετική όσο και την αρνητική διεύθυνση των εγκάρσιων αξόνων. Εάν η πάνω επιφάνεια της ρυπασμένης περιοχής συμπίπτει με τον υδροφόρο ορίζοντα παρέχοντας εξάπλωση μόνο προς τη μια διεύθυνση του κατακόρυφου άξονα όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3(α), οι ποσότητες  $Z/2$  στον τρίτο όρο της εξίσωσης (2.8) αντικαθίστανται από  $Z$ . Επίσης, για διδιάστατο πρόβλημα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3(c), τότε στην εξίσωση (2.8) ο όρος  $C_0/8$  αντικαθίσταται από  $C_0/4$  και οι συναρτήσεις σφάλματος που περιέχουν τους όρους  $Z$  απαλείφονται.



**Σχήμα 2.3** Γεωμετρίες εξάπλωσης της ρυπασμένης περιοχής για διαφορετικές διευθύνσεις εγκάρσιας εξάπλωσης (Domenico και Robbins 1985)

Η εξίσωση (2.8) όπως και οι παραλλαγές της (Domenico 1987, BIOCHLOR U.S.EPA 2000, 2002) που προέκυψαν από την απλοποιητική θεώρηση του γινομένου μονοδιάστατων αναλυτικών εξισώσεων υποεκτιμούν τις συγκεντρώσεις σε σχέση με τις ακριβείς αναλυτικές επιλύσεις της εξίσωσης (2.2) (Cleary και Unga 1978, Wexler 1992).

## 2.2 Μηχανισμοί μεταφοράς και σχετικές παράμετροι

Στη συγκεκριμένη ενότητα θα παρουσιαστεί το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο για τους μηχανισμούς μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Αρχικά θα παρουσιαστούν οι φυσικοί μηχανισμοί μεταφοράς (μεταγωγή, διάχυση, διασπορά) που εξαπλώνουν τη διαλυμένη μάζα των ρύπων στο υπόγειο νερό. Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν οι αντιδράσεις μεταξύ των διαλυμένων ρύπων και των επιφανειών της στερεάς φάσης που έχουν ως αποτέλεσμα την καθυστέρηση της προώθησης του μετώπου της ρύπανσης, καθώς μέρος του διαλυμένου ρύπου μεταφέρεται στη στερεά φάση του εδάφους και δεν παρακολουθεί την κίνηση του υπόγειου νερού. Τέλος, θα αναλυθούν οι διεργασίες υποβάθμισης εξαιτίας της παρουσίας μικροοργανισμών στο υπόγειο νερό (βιοαποδόμηση), που μειώνουν τη συγκέντρωση των διαλυμένων ρύπων και παράλληλα θα γίνει συνοπτική αναφορά στις διεργασίες της υδρόλυσης και της ραδιενεργού υποβάθμισης.

### 2.2.1 Μεταγωγή-ταχύτητα μεταγωγής

Ο κύριος μηχανισμός μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό είναι η μεταγωγή (advection), κατά την οποία ο ρύπος παρασύρεται από το υπόγειο νερό κατά την κίνησή του διαμέσου των πόρων λόγω υδραυλικής κλίσης. Κατά τη μεταγωγή η συγκέντρωση του ρύπου σε μία συγκεκριμένη θέση γενικώς μεταβάλλεται με την πάροδο του χρόνου, καθώς από τη θέση αυτή διέρχονται συνεχώς νέα μόρια νερού στα οποία η συγκέντρωση του ρύπου γενικώς διαφέρει. Αντίθετα, κατά τη μεταγωγή η συγκέντρωση του ρύπου σε κάποιον συγκεκριμένο όγκο νερού δε μεταβάλλεται, καθώς ο όγκος αυτός μετακινείται παρακολουθώντας τη ροή, λόγω της αρχής διατηρήσεως της μάζας του ρύπου εντός του όγκου. Τέλος, αν δεν υπάρχει ροή του υπόγειου νερού (δηλαδή αν η υδραυλική κλίση είναι μηδενική), η μεταγωγή δεν προκαλεί μεταφορά του ρύπου από θέση σε θέση. Επομένως, η ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$  ισούται με την μέση γραμμική ταχύτητα ή ταχύτητα διήθησης που αντιστοιχεί στην ταχύτητα του υπόγειου νερού διαμέσου των πόρων:

$$V_x = \frac{K_i}{n} \quad (2.9)$$

όπου  $v_x(L/T)$  είναι η ταχύτητα μεταγωγής,  $K(L/T)$  είναι η υδραυλική αγωγιμότητα,  $i$  είναι η υδραυλική κλίση και  $n$  είναι το πορώδες. Σημειώνεται ότι τα παραπάνω ισχύουν με την θεώρηση ότι η μεταφορά της διαλυμένης μάζας του ρύπου δεν επηρεάζει την υπόγεια ροή. Όταν η θεώρηση αυτή αποτυγχάνει, για παράδειγμα, σε ρυπασμένο υπόγειο νερό με διαφορετική πυκνότητα από το φυσικό υπόγειο νερό, τότε η κίνηση του υπόγειου νερού και της μάζας μπορεί να αποκλίνει.

### 2.2.2 Διάχυση-συντελεστής διάχυσης

Ένας διαλυμένος ρύπος στο νερό θα κινηθεί από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης σε περιοχές χαμηλής συγκέντρωσης, έως ότου τελικώς οι συγκεντρώσεις εξισωθούν παντού. Ο μηχανισμός αυτός ονομάζεται διάχυση ή μοριακή διάχυση κατά την οποία ο ρύπος διαχέεται στο υδατικό διάλυμα λόγω διαφοράς συγκέντρωσης από θέση σε θέση και συμβαίνει ακόμα και όταν το νερό δεν κινείται. Η μάζα που διαχέεται είναι ανάλογη της διαφοράς συγκέντρωσης όπως εκφράζεται από τον Πρώτο Νόμο του Fick:

$$F = -D_{\delta} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.10)$$

Στην εξίσωση (2.10) το  $F$  είναι η μάζα που διαχέεται ανά επιφάνεια και χρόνο ( $M/L^2T$ ), το  $D_{\delta}$  είναι ο συντελεστής διάχυσης σε υδατικό διάλυμα ( $L^2/T$ ) και  $C$  είναι η συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου ( $M/L^3$ ). Το αρνητικό σύμβολο στην εξίσωση (2.10) υποδηλώνει ότι η κίνηση γίνεται από τις περιοχές υψηλών συγκεντρώσεων προς τις περιοχές χαμηλών συγκεντρώσεων. Οι τιμές του συντελεστή διάχυσης σε υδατικό διάλυμα  $D_{\delta}$  διαφέρουν ανάλογα με τον ρύπο που διαχέεται και την θερμοκρασία. Για παράδειγμα η τιμή του συντελεστή  $D_{\delta}$  για το ιόν χλωρίου σε θερμοκρασία  $25^{\circ}C$  είναι  $2,03 \times 10^{-9} m^2/s$  και για το ιόν βρωμίου στην ίδια θερμοκρασία, ο συντελεστής  $D_{\delta}$  ισούται με  $2,01 \times 10^{-9} m^2/s$  (Fetter 1999). Τέλος μία συνήθης εκτίμηση του συντελεστή διάχυσης σε υδατικό διάλυμα είναι ίση με  $D_{\delta} = 10^{-9} m^2/s$ .

Σε πορώδες μέσο όπως το έδαφος, η διάχυση των ρύπων δεν γίνεται το ίδιο γρήγορα όπως στο υδατικό διάλυμα, καθώς η διαλυμένη μάζα πρέπει να ακολουθήσει μεγαλύτερες διόδους ροής διαμέσου των πόρων. Για να συνοπολογιστεί αυτό, χρησιμοποιείται ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e(L^2/T)$  που προκύπτει από την εξίσωση:

$$D_e = \omega D_{\delta} \quad (2.11)$$

Στην εξίσωση (2.11), το  $\omega$  είναι συντελεστής που σχετίζεται με την στρεβλότητα (tortuosity, Bear 1972). Η στρεβλότητα μετράει την επίδραση του σχήματος των διόδων ροής που ακολουθούν τα μόρια νερού σε ένα πορώδες μέσο. Σε καλώς διαβαθμισμένα στρώματα εδάφους η στρεβλότητα (tortuosity) τείνει να έχει μικρότερη τιμή από ότι σε κακώς διαβαθμισμένα στρώματα. Οι Perkins και Johnson (1963) βρήκαν ότι ο συντελεστής  $\omega$  είναι ίσος με 0,7 για στρώματα από ομοιόμορφη άμμο. Τέλος, σύμφωνα με τους Freeze και Cherry (1979), το  $\omega$  κυμαίνεται μεταξύ 0,01 και 0,5 από εργαστηριακές μελέτες σε γεωλογικά υλικά.

### 2.2.3 Διασπορά-συντελεστές μηχανικής διασποράς

Η διασπορά ή μηχανική διασπορά είναι το φαινόμενο κατά το οποίο οι ρύποι εξαπλώνονται πέρα από την περιοχή που θα καταλάμβαναν μόνο λόγω του φαινομένου της μεταγωγής. Κατά τη διασπορά η κίνηση του ρύπου οφείλεται στην παρουσία αλληλοσυνδεδεμένων πόρων του εδαφικού σκελετού με τυχαίες διευθύνσεις και σχήματα. Έτσι στη μικροκλίμακα των εδαφικών πόρων, η ταχύτητα κίνησης του υπόγειου νερού εντός των πόρων μεταβάλλεται ακανόνιστα, αποκλίνοντας έτσι από τη μέση μακροσκοπική ταχύτητα της υπόγειας ροής. Αυτό έχει ως συνέπεια ο ρύπος να παρασύρεται από το νερό και να διασπείρεται τόσο κατά μήκος όσο και εγκάρσια προς τη μέση διεύθυνση της κίνησης του υπόγειου νερού. Σε επίπεδο μακροκλίμακας, η διασπορά οφείλεται στις διακυμάνσεις της κατεύθυνσης της υπόγειας ροής και της ταχύτητας μεταγωγής, που οφείλονται με τη σειρά τους στην ανομοιογένεια του υδροφορέα. Σε αυτή την περίπτωση η διασπορά (μακροδιασπορά) εξαρτάται από την διακύμανση στο χώρο των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας και του πορώδους. Ένα παράδειγμα ανομοιογένειας που ευθύνεται για την μηχανική διασπορά στην μακροκλίμακα είναι η μεγάλη οριζόντια στρωμάτωση του υδροφορέα, όπου κάθε στρώμα έχει διαφορετική περατότητα.

#### Μελέτη του μηχανισμού της διασποράς στην μικροκλίμακα

Η μελέτη της διασποράς στη μικροκλίμακα έγινε από πειράματα μεταφοράς σε εδαφικές στήλες στο εργαστήριο (Perkins και Johnson 1963). Από τις εργαστηριακές δοκιμές μελετήθηκε η διαμήκης και εγκάρσια διασπορά των ρύπων, σε σχετικά ομοιογενή δείγματα, όπου η διασπορά οφείλεται σε διαφοροποιήσεις της ταχύτητας ροής διαμέσου των πόρων του εδαφικού υλικού. Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της μελέτης της διασποράς στη μικροκλίμακα του εργαστηρίου είναι ότι η διαμήκης διασπορά είναι ανάλογη της ταχύτητας μεταγωγής των διαλυμένων ρύπων. Επίσης κατέστη σαφές ότι η διαμήκης διασπορά των ρύπων είναι μεγαλύτερη από την εγκάρσια.

Οι εργαστηριακές δοκιμές σε εδαφικές στήλες ήταν χρήσιμες για τον προσδιορισμό των σχέσεων μεταξύ των συντελεστών μηχανικής διασποράς και της ταχύτητας μεταγωγής των διαλυμένων ρύπων. Οι σχέσεις που προέκυψαν ήταν:

$$D_L' = \nu \alpha_L \quad (2.12) \quad \text{και} \quad D_T' = \nu \alpha_T \quad (2.13),$$

όπου  $\alpha_L$  και  $\alpha_T(L)$  είναι οι συντελεστές μηχανικής διασποράς κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση αντίστοιχα και  $\nu(L/T)$  είναι η ταχύτητα μεταγωγής. Υπάρχουν δύο εγκάρσιοι συντελεστές μηχανικής διασποράς σε διευθύνσεις που δημιουργούν γωνία  $90^\circ$ . Επομένως, για οριζόντια ροή, θα υπάρχει συντελεστής οριζόντιας και κατακόρυφης μηχανικής διασποράς. Οι συντελεστές μηχανικής διασποράς θεωρούνται, όπως και η υδραυλική αγωγιμότητα, χαρακτηριστικά του μέσου. Τέλος, οι εξισώσεις (2.12) και (2.13) χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της διασποράς και σε μεγαλύτερες κλίμακες από την μικροκλίμακα του εργαστηρίου.



Μελέτη του μηχανισμού της διασποράς στην μακροκλίμακα

Στη μελέτη του μηχανισμού της διασποράς στη μακροκλίμακα (μακροδιασπορά) συνέβαλαν σημαντικά τα πειράματα μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς, όπως αυτά που παρουσιάζονται στα επόμενα κεφάλαια. Από τις δοκιμές πεδίου στις οποίες έγινε εισαγωγή γνωστής μάζας διαλυμένου συντηρητικού ρύπου στο υπόγειο νερό, προέκυψαν επαρκείς περιγραφές των κατανομών των συγκεντρώσεων στο χώρο και τον χρόνο. Έτσι υπολογίστηκαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς από την ανάλυση των κατανομών των συγκεντρώσεων με τη μέθοδο των ροπών (spatial moments analysis). Παράλληλα, από την εφαρμογή μοντέλων μεταφοράς ρύπων για την προσομοίωση περιστατικών ρύπανσης, φυσικών ή λόγω ανθρώπινης παρέμβασης, προέκυψαν τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς μικρότερης αξιοπιστίας. Για τα περιστατικά ρύπανσης η ποσότητα και η διάρκεια της εισαγωγής των ρύπων στον υδροφορέα είναι άγνωστα, ενώ συνήθως η ρυπασμένη περιοχή εκτείνεται σε μεγάλες αποστάσεις από την πηγή.

**Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς**

Οι Gelhar et al. (1992) συγκέντρωσαν τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς από 59 υδροφορείς, που προέκυψαν είτε από πειράματα μεταφοράς στο πεδίο είτε από προσομοίωση περιστατικών ρύπανσης, για τη μελέτη του μηχανισμού της μακροδιασποράς. Από τους 59 υδροφορείς προέκυψαν 106 τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από τις οποίες οι 83 αφορούσαν πειράματα μεταφοράς και οι 15 περιστατικά ρύπανσης. Οι τιμές αυτές κυμαίνονται από 0,01m έως 5500m και αφορούν μελέτες που έγιναν σε κλίμακα από 0,75m έως 100km. Παρατηρήθηκε μια τάση αύξησης των τιμών του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την κλίμακα (scale effect), ενώ στην ίδια κλίμακα οι τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς διαφέρουν κατά 2 με 3 τάξεις μεγέθους. Τέλος, σημειώνεται ότι η εξάρτηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από την κλίμακα δεν είναι αρκετά ξεκάθαρη, εφόσον σε κλίμακα πάνω από 300m δεν υπάρχουν στοιχεία υψηλής αξιοπιστίας από πειράματα μεταφοράς.

Σύμφωνα με τον Fetter (1999), η αύξηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την κλίμακα (scale effect) αναφέρθηκε αρχικά από τους Lallemant-Barres και Peaudecerf (1978), οι οποίοι πρότειναν ότι ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς μπορεί να υπολογιστεί από την εξίσωση:

$$\alpha_L = 0,1L \quad (2.14)$$

Στην εξίσωση (2.14), το L είναι η κλίμακα κατά μήκος της κατεύθυνσης της υπόγειας ροής. Ως κλίμακα ορίζεται η απόσταση της πηγής από το κέντρο βάρους της ρυπασμένης περιοχής ή το σημείο ελάχιστης μετρημένης συγκέντρωσης του ρύπου.

Η εξάρτηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από την κλίμακα παρουσιάστηκε και σε άλλες μελέτες (Pickens και Grisak 1981, Gelhar et al. 1985, Arya et al. 1988, Neuman 1990), στις οποίες συμπεριελήφθησαν τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς τόσο από εργαστηριακές δοκιμές όσο και από επί τόπου δοκιμές στο πεδίο. Οι Xu και Eckstein (1995) εφάρμοσαν την μέθοδο συσχέτισης σταθμισμένων ελαχίστων τετραγώνων στις τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που παρουσιάστηκαν από τους Gelhar et al. (1992), για την εύρεση εξισώσεων υπολογισμού του. Η επιλογή των συντελεστών βαρύτητας για κάθε τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς έγινε με βάση το επίπεδο αξιοπιστίας των τιμών. Στον Πίνακα 2.1 παρουσιάζονται μερικές εμπειρικές σχέσεις υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από την βιβλιογραφία. Από τις τρεις σχέσεις των Xu και Eckstein (1995), που παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.1, γίνεται έλεγχος στα επόμενα κεφάλαια της τρίτης σχέσης, καθώς προέκυψε από την θεώρηση του μεγαλύτερου συντελεστή βαρύτητας για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς υψηλής αξιοπιστίας, που προέκυψαν από τα πειράματα μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς.

**Πίνακας 2.1 Εμπειρικές σχέσεις υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_L$  από τη βιβλιογραφία**

Εμπειρική σχέση	Πηγή
$\alpha_L=0,0175L^{1,46}$	Neuman (1990)
$\alpha_L=0,0169L^{1,53}$ , $L<100m$	Neuman (1990)
$\alpha_L=0,32L^{0,83}$ , $L\geq 100m$	Neuman (1990)
$\alpha_L=0,229L^{0,755}$ (1)	Arya et al. 1988
$\alpha_L=0,044L^{1,13}$ (2)	Arya et al. 1988
$\alpha_L=1,2(\log L)^{2,958}$	Xu και Eckstein (1995)
$\alpha_L=0,94(\log L)^{2,693}$	Xu και Eckstein (1995)
$\alpha_L=0,83(\log L)^{2,414}$	Xu και Eckstein (1995)

\*Η εμπειρική σχέση (1) εξήχθη από συσχέτιση ελαχίστων τετραγώνων σε τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από δοκιμές στο πεδίο, ενώ η εμπειρική σχέση (2) εξήχθη από τιμές τόσο από δοκιμές στο πεδίο όσο και από εργαστηριακές δοκιμές

Μια εξήγηση της αύξησης του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την κλίμακα είναι ότι καθώς οι δίοδοι ροής (flow paths) γίνονται μακρύτεροι, το υπόγειο νερό έχει τη δυνατότητα να συναντήσει μεγαλύτερες διακυμάνσεις της υδραυλικής αγωγιμότητας και του πορώδους. Ακόμα και αν η μέση γραμμική ταχύτητα του υπόγειου νερού παραμένει σταθερή, οι αποκλίσεις από αυτήν θα αυξάνονται και έτσι θα αυξάνεται και η μηχανική διασπορά. Είναι λογικό ότι όταν οι δίοδοι ροής γίνουν αρκετά μεγάλοι, τότε το υπόγειο νερό θα έχει συναντήσει όλες τις δυνατές διακυμάνσεις της υδραυλικής αγωγιμότητας και ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς θα έχει φτάσει σε μια μέγιστη τιμή. Η τιμή αυτή ονομάστηκε από τους Gelhar et al. (1979) ως ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς στη μακροκλίμακα (asymptotic longitudinal

macrodispersivity). Όταν επιτευχθεί το ασυμπτωτικό όριο, η διαμήκης εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής οφείλεται μόνο σε διακυμάνσεις της ταχύτητας κίνησης του υπόγειου νερού στη μικροκλίμακα των πόρων, λόγω του ακανόνιστου σχήματός τους. Όμως, το ασυμπτωτικό όριο του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς στη μακροκλίμακα επιτυγχάνεται για κλίμακες δεκάδων ή εκατοντάδων μέτρων, για τις οποίες δεν υπάρχουν αξιόπιστα δεδομένα από πειράματα μεταφοράς (Gelhar et al. 1992).

Οι εμπειρικές σχέσεις που προτάθηκαν από τους Xu και Eckstein (1995), που παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.1, λαμβάνουν υπόψη τους τη μείωση του ρυθμού αύξησης του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την αύξηση της κλίμακας. Σε θεωρητικό επίπεδο αυτός ο ρυθμός αύξησης πρέπει να φτάνει στο 0 καθώς η κλίμακα προσεγγίζει το άπειρο (ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς). Από τη μελέτη των εμπειρικών σχέσεων που προτάθηκαν έγινε φανερό ότι όταν η κλίμακα ξεπεράσει την τιμή του 1km, ο ρυθμός αύξησης παίρνει πολύ μικρές τιμές προσεγγίζοντας το 0.

### ***Συντελεστές εγκάρσιας μηχανικής διασποράς***

Για τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, οι Gelhar et al. (1992) διαπιστώνουν μία τάση αύξησης της τιμής του με την κλίμακα, αλλά αυτό προκύπτει από δεδομένα χαμηλής αξιοπιστίας. Για τον λόγο του συντελεστή εγκάρσιας μηχανικής διασποράς προς τον συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς φαίνεται ότι η τιμή του 1/3 που χρησιμοποιείται συχνά δεν προκύπτει από τη συγκεκριμένη μελέτη. Αντίθετα τα δεδομένα μεγάλης αξιοπιστίας καταδεικνύουν ότι ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς είναι μίας τάξης μεγέθους μεγαλύτερος από τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς.

Για τον συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, οι Gelhar et al. (1992) παρατήρησαν ότι είναι πολύ μικρότερος από τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς. Όλες οι τιμές του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς βρέθηκαν μικρότερες του 1m ενώ για τα δεδομένα υψηλής αξιοπιστίας (πειράματα μεταφοράς) βρέθηκαν μόλις λίγα χιλιοστά. Σε όλες τις περιπτώσεις ο συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς βρέθηκε μία με δύο τάξεις μεγέθους μικρότερος από τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς.

### ***Το μοντέλο της διασποράς κατά τον Νόμο του Fick***

Στη μαθηματική ανάλυση της μεταφοράς των ρύπων η μοριακή διάχυση και η μηχανική διασπορά αντιμετωπίζονται από κοινού ως υδροδυναμική διασπορά. Η υδροδυναμική διασπορά εκφράζεται μέσω του συντελεστή υδροδυναμικής διασποράς  $D$  που λαμβάνεται ίσος με:

$$D = D_e + D' \quad (2.15)$$

όπου  $D_e$  είναι ο συντελεστής διάχυσης και  $D'$  είναι ο συντελεστής μηχανικής διασποράς.

Η χρήση του συντελεστή υδροδυναμικής διασποράς στα μοντέλα μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό υποδηλώνει ότι η μεταφορά γίνεται σύμφωνα με το Νόμο του Fick. Αυτό σημαίνει ότι η μεταφορά της διαλυμένης μάζας γίνεται λόγω της διαφοράς συγκέντρωσης, με ρυθμό που είναι ανάλογος της διαφοράς αυτής. Αυτή η περιγραφή δεν αντιπροσωπεύει τον μηχανισμό της διασποράς αλλά της μοριακής διάχυσης. Παρόλα αυτά η κοινή θεώρηση των δύο φαινομένων οφείλεται στο ότι το μακροσκοπικό αποτέλεσμα των δύο μηχανισμών είναι ίδιο, δηλαδή να γίνει η κατανομή των συγκεντρώσεων κανονική.

Με τη θεώρηση κανονικής κατανομής συγκεντρώσεων, οι συντελεστές υδροδυναμικής διασποράς κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$D_L = \frac{\sigma_L^2}{2t} \quad (2.16)$$

$$D_T = \frac{\sigma_T^2}{2t} \quad (2.17)$$

Στις εξισώσεις (2.16) και (2.17),  $\sigma_L^2$  και  $\sigma_T^2$  είναι η διασπορά κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση και  $t$  είναι ο χρόνος. Η διασπορά είναι μέτρο μεταβλητότητας που εκφράζει την εξάπλωση των τιμών των συγκεντρώσεων από τη μέση τιμή.

Η αύξηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την αύξηση της κλίμακας δεν είναι φαινόμενο που συμφωνεί με τον Νόμο του Fick. Πολλοί ερευνητές (π.χ Gelhar 1986, Dagan 1988) καταλήγουν ότι η μηχανική διασπορά ακολουθεί τον Νόμο του Fick σε εργαστηριακές κλίμακες, όπου η μηχανική διασπορά οφείλεται σε διαφοροποιήσεις της ταχύτητας ροής διαμέσου των πόρων του εδαφικού υλικού και σε πολύ μεγάλες κλίμακες όπου επιτεύχθηκε η ασυμπτωτική τιμή της μακροδιασποράς.

#### Γεωστατιστικά μοντέλα της διασποράς

Σημαντική συμβολή στη μελέτη της διασποράς έχουν τα στοχαστικά μοντέλα που συνδέουν την μακροδιασπορά με γεωστατιστικά μοντέλα της υδραυλικής αγωγιμότητας. Ο στόχος των γεωστατιστικών μοντέλων είναι η περιγραφή της ανομοιογένειας του υδροφορέα από ένα μικρό αριθμό στατιστικών παραμέτρων. Τέτοιες στατιστικές παράμετροι είναι τα μέτρα θέσης, μεταβλητότητας και συσχέτισης μετρημένων τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας σε διαφορετικά σημεία του υδροφορέα.

Καθώς η διακύμανση της υδραυλικής αγωγιμότητας  $K_i$ , καλύπτει πολλές τάξεις μεγέθους, συχνά σε στατιστικές σχέσεις λαμβάνεται υπόψη ο φυσικός λογάριθμος των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας:

$$Y_i = \ln K_i \quad (2.18)$$

Για τις τιμές  $Y_i$ , βρίσκεται η μέση τιμή τους  $\mu_Y$  και η διασπορά τους  $\sigma_Y^2$  γύρω από τη μέση τιμή. Οι μετρημένες τιμές της υδραυλικής αγωγιμότητας σε θέσεις που βρίσκονται κοντά η μια στην άλλη είναι πιθανόν να είναι περίπου ίδιες. Όσο απομακρυσμένες είναι οι μετρήσεις, τόσο λιγότερο πιθανό είναι οι τιμές να είναι ίδιες. Αυτό συμβαίνει επειδή όσο αυξάνεται η απόσταση, η πιθανότητα να υπάρξει αλλαγή στο γεωλογικό σχηματισμό αυξάνεται. Η συνάρτηση που περιγράφει αυτό είναι η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης  $\rho_Y$ , που εκφράζει πόσο καλά συσχετίζονται οι μετρήσεις  $Y_i$  που βρίσκονται σε απόσταση  $\lambda_k$ . Το χαρακτηριστικό μήκος συσχέτισης (correlation length)  $\lambda$  (ή για το τριδιάστατο επίπεδο  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ ) εκφράζει το μήκος που απαιτείται ώστε η εκθετική μορφή της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης  $\rho_Y$  να πάρει τιμή μικρότερη από  $1/e$ .

Πολλά στοχαστικά μοντέλα (Dagan 1982, 1984, Gelhar και Axness 1983) βασίζονται στην ικανότητα περιγραφής του πεδίου υδραυλικής αγωγιμότητας του υδροφορέα με τις στατιστικές παραμέτρους  $\mu_Y, \sigma_Y^2, \lambda_x, \lambda_y$  και  $\lambda_z$  που αναφέρθηκαν παραπάνω. Οι Gelhar και Axness (1983) πρότειναν την παρακάτω θεωρητική εξίσωση για τον υπολογισμό της ασυμπτωτικής τιμής του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς:

$$A_L = \frac{\sigma_Y^2 \lambda}{\gamma^2} \quad (2.19)$$

όπου  $\sigma_Y^2$  είναι η διασπορά του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας,  $\lambda$  είναι το χαρακτηριστικό μήκος συσχέτισης κατά τη διαμήκη διεύθυνση και  $\gamma$  είναι ένας παράγοντας ροής (flow factor) που ο Dagan (1982) θεωρεί ίσο με το 1.

Επομένως η ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής μακροδιασποράς (longitudinal asymptotic macrodispersivity)  $A_L^*$  περιλαμβάνει τη συμβολή της ανομοιογένειας του μέσου στη μακροκλίμακα ( $A_L$ ) και την συμβολή των ανομοιογενειών σε επίπεδο πόρων ( $\alpha_L'$ ), που μπορεί να αγνοηθούν λόγω της μικρής συνεισφοράς τους, σύμφωνα με την εξίσωση:

$$A_L^* = A_L + \alpha_L' \quad (2.20)$$

Η ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή εγκάρσιας μηχανικής διασποράς  $A_T$  είναι μηδενική, υπονοώντας έτσι ότι η ανομοιογένεια του υδροφορέα δεν επηρεάζει την εγκάρσια διασπορά των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Επομένως η ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή εγκάρσιας μηχανικής μακροδιασποράς (transverse asymptotic macrodispersivity)  $A_T^*$  περιλαμβάνει μόνο την συμβολή των ανομοιογενειών σε επίπεδο πόρων ( $\alpha_T'$ ) και δίνεται από την εξίσωση:

$$A_T^* = \alpha_T' \quad (2.21)$$

Σημειώνεται ότι στα επόμενα κεφάλαια δεν θα επιχειρηθεί διαχωρισμός του είδους των ανομοιογενειών στην μικροκλίμακα και μακροκλίμακα, που προκαλούν τη μηχανική διασπορά.

#### 2.2.4 Ρόφηση-συντελεστής υστέρησης

Όταν νερό που περιέχει έναν διαλυμένο ρύπο με συγκέντρωση  $C_i$  αναμειγνύεται με εδαφικό υλικό και επέλθει ισορροπία, τότε η μάζα του διαλυμένου ρύπου συχνά κατανέμεται μεταξύ της στερεάς και της υδατικής φάσης. Η ακόλουθη εξίσωση περιγράφει αυτόν τον μηχανισμό:

$$S = \frac{(C_i - C)V}{sm} \quad (2.22)$$

όπου  $C(M/L^3)$  είναι η συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου μετά την ισορροπία και  $C_i(M/L^3)$  είναι η αρχική συγκέντρωση του,  $V(L^3)$  είναι ο όγκος του διαλύματος και  $sm(M)$  είναι η μάζα του εδαφικού υλικού. Η εξίσωση (2.22) δίνει τη μάζα του ροφημένου ρύπου στη στερεά φάση μάζας  $sm$  και η ποσότητα  $S(M/M)$  έχει μονάδες όπως  $mg/g$  ή  $\mu g/g$ . Ένα τέτοιο πείραμα παρέχει ένα σημείο στο διάγραμμα της ποσότητας  $S$  ως προς τη συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου μετά την ισορροπία  $C$ . Από την επανάληψη της ίδιας διαδικασίας στην ίδια θερμοκρασία για διαφορετική αρχική συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου  $C_i$ , προκύπτει ένα σύνολο σημείων που δημιουργούν την ισόθερμη καμπύλη της ρόφησης. Αυτό το πείραμα είναι γνωστό ως πείραμα διακοπτόμενου έργου (batch test).

Η ρόφηση περιγράφεται από την προσομοίωση των ισόθερμων καμπυλών που προκύπτουν από τα πειράματα διακοπτόμενου έργου με κάποια θεωρητική εξίσωση. Μία τέτοια εξίσωση είναι η ισόθερμη του Freundlich:

$$S = K_p C^n \quad (2.23)$$

όπου  $K_p(L^3/M)$  είναι ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης και  $n$  είναι μία σταθερά που κυμαίνεται μεταξύ 0,7 και 1,2. Για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς (2.1), όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1, θεωρήθηκε γραμμική ισόθερμη, που προκύπτει από την εξίσωση (2.23) με τη θεώρηση  $n=1$ .

Ο μηχανισμός της ρόφησης έχει ως συνέπεια την καθυστέρηση της προώθησης του μετώπου της ρύπανσης, καθώς μέρος του διαλυμένου ρύπου μεταφέρεται στη στερεά φάση του εδάφους και δεν παρακολουθεί την κίνηση του υπόγειου νερού. Αυτό εκφράστηκε στη διαφορική εξίσωση μεταφοράς (2.2) με τον συντελεστή υστέρησης  $R$ , όπου θεωρήθηκε ότι η ισορροπία μεταξύ στερεά και υδατικής φάσης επέρχεται στιγμιαία. Επομένως ο συντελεστής υστέρησης  $R$  εκφράζει την μείωση των παραμέτρων μεταφοράς  $D$  και  $v_x$  και ισούται με:

$$R = 1 + \frac{K_p \rho_d}{n} \quad (2.24)$$

όπου  $\rho_d(\text{M}/\text{L}^3)$  είναι η ξηρή πυκνότητα του εδάφους και  $n$  είναι το πορώδες.

Το φαινόμενο της ρόφησης περιλαμβάνει τους μηχανισμούς της προσρόφησης (adsorption), όπου η ροφημένη μάζα συγκεντρώνεται στην επιφάνεια της στερεάς φάσης, και της απορρόφησης (absorption), όπου η ροφημένη μάζα διαχέεται στο εσωτερικό της στερεάς φάσης. Όσον αφορά την απορρόφηση, διακρίνεται μεταξύ της διάχυσης σε πορώδεις εδαφικούς κόκκους και της διάχυσης στο οργανικό κλάσμα του εδάφους. Ένα σημαντικό είδος προσρόφησης είναι η ανταλλαγή ιόντων όπου τα ιόντα της εν διαλύσει ουσίας συγκεντρώνονται στη στερεά επιφάνεια σαν αποτέλεσμα ηλεκτροστατικής έλξης μεταξύ αυτών και σημείων της επιφάνειας που έχουν αντίθετο ηλεκτρικό φορτίο.

Το μοντέλο της γραμμικής ρόφησης περιγράφει επαρκώς την ρόφηση υδρόφοβων ρύπων όπου ο κύριος μηχανισμός της εισρόφησης είναι η απορρόφηση από το οργανικό κλάσμα του εδάφους. Σε αυτή την περίπτωση ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p$  προκύπτει από την εξίσωση:

$$K_p = K_{OC} f_{OC} \quad (2.25)$$

όπου  $K_{OC}(\text{L}^3/\text{M})$  είναι ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ της υδατικής φάσης και του οργανικού κλάσματος της στερεάς φάσης και  $f_{OC}(\text{M}/\text{M})$  είναι το κλάσμα του οργανικού άνθρακα στο έδαφος. Η εξίσωση (2.25) ισχύει ικανοποιητικά όταν το οργανικό κλάσμα του εδάφους είναι μεγαλύτερο από 0,1%. Για μικρά ποσοστά οργανικού άνθρακα, η ανταλλαγή ιόντων στις αργιλικές επιφάνειες είναι σημαντική και δεν μπορεί να θεωρηθεί ότι ο κύριος μηχανισμός της ρόφησης είναι η απορρόφηση από το οργανικό κλάσμα του εδάφους.

Η ανταλλαγή ιόντων ισχύει για τα μέταλλα τα οποία συναντούνται στα υδάτινα διαλύματα ως ιόντα. Παράλληλα το φαινόμενο της ανταλλαγής κατιόντων είναι πολύ σημαντικό για τις αργίλους, αλλά τόσο οργανικές όσο και ανόργανες στερεές επιφάνειες παίζουν σημαντικό ρόλο στην ανταλλαγή ιόντων. Ο μηχανισμός της ανταλλαγής ιόντων δεν περιγράφεται επαρκώς από τη γραμμική ισόθερμη λόγω της περιπλοκότητας των αντιδράσεων που περιλαμβάνει. Τέλος, η ικανότητα ανταλλαγής ιόντων εξαρτάται από το pH και από τη συγκέντρωση άλλων ρύπων που δρουν ανταγωνιστικά, όπως θα αναφερθεί στην Ενότητα 3.2.2.2.6 για το διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιο ( $\text{MoO}_4^{2-}$ ).

### 2.2.5 Υποβάθμιση-χρόνος ημιζωής και ρυθμός μετασχηματισμού

Σε όλα σχεδόν τα πειράματα μεταφοράς που θα παρουσιαστούν στις επόμενες ενότητες σημειώθηκε ότι η μείωση της συγκέντρωσης των οργανικών ρύπων (χλωριωμένοι οργανικοί ρύποι CHC, αρωματικές ενώσεις πετρελαίου BTEX)

οφείλεται στην βιοαποδόμησή τους. Μια οργανική ένωση μπορεί να βιοαποδομηθεί δρώντας είτε ως δέκτης ηλεκτρονίων (electron acceptor) είτε ως δότης ηλεκτρονίων (electron donor), είτε μέσω συµµεταβολισµού (cometabolism). Στις δύο πρώτες περιπτώσεις, η οργανική ένωση λειτουργεί ως πηγή άνθρακα ή/και ενέργειας για τους μικροοργανισµούς. Αντιθέτως, κατά τον συµµεταβολισµό η οργανική ένωση βιοαποδοµείται από ένα ένζυµο, που παράγεται κατά τη χρήση µιας δευτέρης ένωσης ως πηγής ενέργειας ή άνθρακα. Η βιοαποδόµηση µιας οργανικής ένωσης µπορεί να συµβεί µε ή χωρίς την παρουσία διαλυµένου οξυγόνου, δηλαδή κάτω από αερόβιες ή αναερόβιες συνθήκες αντίστοιχα.

Ο πιο σηµαντικός µηχανισµός βιοαποδόµησης των χλωριωµένων οργανικών ρύπων είναι η αναγωγική αποχλωρίωση (reductive dechlorination), κατά την οποία ένας χλωριωµένος διαλύτης λειτουργεί ως τελικός δέκτης ηλεκτρονίων και ένα άτοµο χλωρίου στο μόριό του αντικαθίσταται από ένα άτοµο υδρογόνου. Αυτή η αντίδραση έχει σαν αποτέλεσµα την αναγωγή του χλωριωµένου οργανικού ρύπου και γίνεται υπό αναερόβιες συνθήκες.

Ο κύριος µηχανισµός βιοαποδόµησης των αρωµατικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX) είναι η οξειδωση, κατά την οποία οι υδρογονάνθρακες δρουν ως δότες ηλεκτρονίων και οι δέκτες ηλεκτρονίων ανάγονται. Οι κύριοι δέκτες ηλεκτρονίων που στηρίζουν την βιοαποδόµηση των υδρογονανθράκων είναι το οξυγόνο, τα νιτρικά, το μαγγάνιο, ο σίδηρος, τα θειικά και το διοξείδιο του άνθρακα. Όταν ο τελικός δέκτης ηλεκτρονίων είναι το οξυγόνο τότε έχουµε αερόβια βιοαποδόµηση, αλλά οι αρωµατικές ενώσεις του πετρελαίου βιοαποδοµούνται και υπό αναερόβιες συνθήκες, µε χαµηλότερο ρυθµό.

Μία άλλη αντίδραση µετασχηµατισµού των οργανικών ρύπων είναι η υδρόλυση, η οποία σε αντίθεση µε την βιοαποδόµηση, δεν εξαρτάται από τους μικροοργανισµούς. Η υδρόλυση περιλαµβάνει την αντίδραση ενός οργανικού µορίου µε το νερό. Βέβαια, δεν υπόκεινται όλοι οι οργανικοί ρύποι σε υδρόλυση, για παράδειγµα το βενζόλιο παρουσιάζει αντίσταση στην υδρόλυση (Domenico και Schwartz 1998). Τέλος, όταν βρεθούν ραδιονουκλεοτίδια στο υπόγειο νερό, υπόκεινται σε ραδιενεργή υποβάθµιση, κατά την οποία µειώνεται ο αριθµός των ατόµων του ραδιενεργού υλικού.

Ο ρυθµός µετασχηµατισµού πρώτης τάξης  $\lambda$ , που παρουσιάζεται στη διαφορική εξίσωση µεταφοράς (2), προκύπτει από την εξίσωση:

$$\lambda = \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{C_i}{C_f} \quad (2.26)$$

όπου  $C_i$  είναι η αρχική συγκέντρωση του ρύπου,  $C_f$  η τελική συγκέντρωση του ρύπου (διορθωµένη ώστε να µην περιλαµβάνει µείωση µάζας λόγω διαδικασιών µεταφοράς) και  $\Delta t$  το χρονικό διάστηµα. Από την εξίσωση (2.26) προκύπτει ο χρόνος



ημιζωής  $t_{1/2}$ , δηλαδή το χρονικό διάστημα που απαιτείται για τη μείωση της συγκέντρωσης του ρύπου από  $C_i$  σε  $C_i/2$ , που προκύπτει από την εξίσωση:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (2.27)$$

### 2.3 Πειράματα μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς

Τα πειράματα μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς συνέβαλαν σημαντικά στην κατανόηση των φυσικών και χημικών μηχανισμών της μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό, που παρουσιάστηκαν στην Ενότητα 2.2. Όπως σημειώθηκε στην Ενότητα 2.2.3, η συνεισφορά των πειραμάτων μεταφοράς ήταν σημαντική για την κατανόηση της επιρροής των ανομοιογενειών του υδροφορέα στο μηχανισμό της μακροδιασποράς και για τον έλεγχο των γεωστατιστικών μοντέλων της διασποράς. Πριν τη διεξαγωγή ελεγχόμενων επί τόπου δοκιμών, η κατανόηση της συμπεριφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό προέρχονταν από περιστατικά ρύπανσης, στα οποία η ποσότητα και η διάρκεια της εισαγωγής των ρύπων στον υδροφορέα δεν ήταν επαρκώς ορισμένα. Σκοπός των ελεγχόμενων δοκιμών πεδίου ήταν η μελέτη της μεταφοράς διαλυμένων ρύπων, των οποίων οι ποσότητες και οι συνθήκες εισαγωγής τους στο υπόγειο νερό είναι επαρκώς προσδιορισμένες, όταν τα υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα είναι γνωστά. Η επιτυχία των πειραμάτων μεταφοράς σε φυσικούς υδροφορείς έγκειται στον επαρκή χαρακτηρισμό των κατανομών των συγκεντρώσεων των διαλυμένων ρύπων στο χώρο και το χρόνο. Αυτό επιτεύχθηκε με τη δημιουργία πυκνών τριδιάστατων συστημάτων παρακολούθησης της εξέλιξης της ρύπανσης.

Τα πειράματα στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986), στο Κέιπ Κοντ (LeBlanc et al. 1991) και στο Κολόμπους (Boggs et al. 1993) είναι μοναδικά γιατί πέντε με δέκα χιλιάδες σημεία παρακολούθησης παρείχαν ακριβείς απεικονίσεις των ρυπασμένων περιοχών, για χρονικά διαστήματα 2 με 3 χρόνων. Παράλληλα, με την εισαγωγή ιχνηθετών γνωστής μάζας υπολογίστηκαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς από την ανάλυση των κατανομών των συγκεντρώσεων με τη μέθοδο των ροπών (Freyberg 1986, Garabedian et al. 1991, Boggs et al. 1993, Adams και Gelhar 1992). Οι τιμές αυτές συγκρίθηκαν με τις αντίστοιχες τιμές που προέκυψαν από την εφαρμογή γεωστατιστικών μοντέλων σε τιμές της υδραυλικής αγωγιμότητας που προσδιορίστηκαν από ανεξάρτητες μετρήσεις στους υδροφορείς (Sudicky 1986, Hess et al. 1992, Rehfeldt et al. 1992). Επομένως η σημασία τους ήταν καταλυτική στην αξιολόγηση των στοχαστικών μοντέλων και στην κατανόηση της έννοιας της ασυμπτωτικής τιμής των συντελεστών μηχανικής μακροδιασποράς. Αναλυτικά οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από τα πειράματα μεταφοράς θα παρουσιαστούν στο Κεφάλαιο 6, όπου θα συγκριθούν και με τις αντίστοιχες τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση των πειραμάτων με τις αναλυτικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς.

Οι επί τόπου δοκιμές στο Μπόρντεν, στο Κέιπ Κοντ και στο Κολόμπους συνέβαλαν σημαντικά και στην κατανόηση των χημικών μηχανισμών της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Αυτό επιτεύχθηκε με την εισαγωγή γνωστών μαζών οργανικών ρύπων (χλωριωμένοι οργανικοί ρύποι, υδρογονάνθρακες) που αναμένονταν να παρουσιάσουν ρόφηση και υποβάθμιση. Τα αποτελέσματα των πειραμάτων μεταφοράς, σε συνδυασμό με εργαστηριακές δοκιμές σε εδαφικά δείγματα των υδροφορέων, συνέβαλαν στην κατανόηση των μηχανισμών της ρόφησης και υποβάθμισης των οργανικών ρύπων (Curtis et al. 1986, Roberts et al. 1986, Barker, Patrick και Major 1987, Stollenwerk 1995, 1998, Boggs et al. 1993).

Τα πειράματα μακροδιασποράς (macrodispersivity experiments-MADE) στο Κολόμπους παρουσιάζουν ιδιαιτερότητα, λόγω της μεγάλης ανομοιογένειας του υδροφορέα, σε σχέση με τα πειράματα στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ, όπου οι υδροφορείς ήταν σχετικά ομοιογενείς. Η ονομασία τους ως πειράματα μακροδιασποράς δηλώνει και τον σκοπό τους, που δεν ήταν άλλος από τη μελέτη του φαινομένου αυτού. Βέβαια εκ του αποτελέσματος το μοντέλο μεταγωγής-μακροδιασποράς απέτυχε στην περιγραφή της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό του υδροφορέα του Κολόμπους (Zheng et al. 2011). Όπως σημειώνουν οι Zheng et al. (2011), αν οι διακυμάνσεις της ταχύτητας μεταγωγής στη μικροκλίμακα των πόρων μπορούσαν να περιγραφούν επαρκώς, τότε το μοντέλο μεταφοράς θα βασίζονταν στη μεταγωγή διαμέσου των προτιμώμενων διόδων ροής υψηλής περατότητας και στη διάχυση στην εγκάρσια διεύθυνση της υπόγειας ροής.

Τέλος, τα πειράματα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Killey και Moltyaner 1988) έγιναν σε υδροφορέα που παρουσίαζε μεγάλη οριζόντια στρωμάτωση και στόχος τους ήταν ο προσδιορισμός των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας κάθε στρώματος, με βάση τα αποτελέσματα του πειράματος. Παράλληλα, μελετήθηκε η διασπορά με την αναλυτική εξίσωση (2.4) (Moltyaner και Killey 1988), που χρησιμοποιήθηκε και για την προσομοίωση του πειράματος στην παρούσα διπλωματική εργασία.

## Κεφάλαιο 3 Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

### 3.1 Πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν, Οντάριο, Καναδά

Τα πειράματα μεταφοράς διεξήχθησαν σε αμμώδη υδροφορέα που υπόκειται ανενεργού δανειοθαλάμου αμμοληψίας στην στρατιωτική βάση στο Μπόρντεν του Καναδά. Ο υδροφορέας είναι σχετικά ομοιογενής και η διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας ( $\sigma^2 \ln K$ ) είναι ίση με 0,29 (Sudicky 1986), όταν η υδραυλική αγωγιμότητα  $K$  έχει μονάδες cm/s. Ο δανειοθάλαμος βρίσκεται κατάντη χώρου ταφής απορριμμάτων που λειτούργησε από το 1940 έως το 1976 (MacFarlane 1983) και δημιούργησε στην περιοχή του δανειοθαλάμου ρυπασμένη περιοχή που περιορίζεται σε 2 με 3m στο κάτω τμήμα του υδροφορέα. Τα πειράματα μεταφοράς διεξήχθησαν στο ανώτερο μη ρυπασμένο τμήμα του υδροφορέα.

#### 3.1.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα

Ο υδροφορέας έχει πάχος 9m, υπέρκειται ιλυώδους αργιλικού στρώματος και αποτελείται από καθαρή, καλά διαβαθμισμένη άμμο με μικρό έως μεσαίο μέγεθος κόκκων και έχει μικρή οριζόντια στρωμάτωση. Το πορώδες και η ξηρή πυκνότητα του εδάφους υπολογίστηκαν με τη λήψη 4 πυρήνων από διαφορετικά σημεία του υδροφορέα και ο αριθμητικός μέσος των τιμών που προέκυψαν είναι ίσος με 0,33 και  $1,81\text{g/cm}^3$  αντίστοιχα (Mackay et al. 1986). Τέλος το ποσοστό οργανικού άνθρακα του υδροφορέα είναι μικρό της τάξεως του 0,02% ενώ κυμαίνεται σε διαφορετικά σημεία του μεταξύ 0,01 έως 0,09% (Mackay et al. 1986).

Στο χώρο διεξαγωγής των πειραμάτων ο υδροφόρος ορίζοντας βρίσκεται 1m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και παρουσιάζει διακυμάνσεις στη διάρκεια του έτους της τάξεως του 1m. Η υδραυλική κλίση παρατηρήθηκε ότι κυμαίνεται μεταξύ 0,0035 και 0,0054 στα 11 επεισόδια παρακολούθησης που πραγματοποιήθηκαν μέσω συστήματος πιεζομέτρων στο χώρο διεξαγωγής των πειραμάτων (MacFarlane 1983). Η μέση τιμή της υδραυλικής κλίσης στη διάρκεια του έτους βρέθηκε ίση με 0,0043 (Sudicky 1986). Ο προσδιορισμός της τιμής της υδραυλικής αγωγιμότητας έγινε με την λήψη 32 πυρήνων και το εύρος των τιμών που προέκυψαν είναι από  $4 \times 10^{-7}$  έως  $1,5 \times 10^{-4}$  m/s· ο γεωμετρικός μέσος είναι ίσος με  $7,2 \times 10^{-5}$  m/s (Sudicky 1986).

Τα παραπάνω γεωλογικά και υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα συνοψίζονται στον Πίνακα 3.1 που ακολουθεί.

**Πίνακας 3.1 Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Μπόρντεν**

<u>Παράμετρος:</u>	<u>Τιμή</u>
Ξηρή πυκνότητα του εδάφους $\rho_d$ (g/cm <sup>3</sup> )	1,81 (1)
Πορώδες n	0,33 (1)
Ποσοστό οργανικού άνθρακα $f_{oc}$	0,0002 (1)
Υδραυλική κλίση i	0,0043 (2)
Υδραυλική αγωγιμότητα K(m/s)	$7,2 \times 10^{-5}$ (2)
Ταχύτητα μεταγωγής (m/s) $v_x=Ki/n$	$9,38 \times 10^{-7}$
Ταχύτητα μεταγωγής (m/d) $v_x=Ki/n$	0,081

Πηγές: (1) Mackay et al. 1986

(2) Sudicky 1986

### 3.1.2 Πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων

Το πρώτο μεγάλης κλίμακας πείραμα μεταφοράς στο Μπόρντεν ξεκίνησε στις 23 Αυγούστου 1982. Επιτεύχθηκαν καλά ορισμένες αρχικές συνθήκες με την ελεγχόμενη εισπίεση στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα διαλύματος με γνωστές μάζες ανόργανων ιχνηθετών και χλωριωμένων ρύπων. Οι οργανικοί ρύποι που επιλέχθηκαν διέφεραν ως προς την κινητικότητα και τους αναμενόμενους χρόνους ημιζωής για την αξιολόγηση των θεωρητικών και εργαστηριακών προβλέψεων για την μεταφορά τους στο υπόγειο νερό. Τέλος σχεδιάστηκε ένα πυκνό τριδιάστατο σύστημα παρακολούθησης της εξέλιξης της ρύπανσης στο χώρο και στο χρόνο για τη μέτρηση των συγκεντρώσεων των ρύπων χωρίς μεταβολή της φυσικής ροής.

#### 3.1.2.1 Περιγραφή πειράματος

Το εισπιασθέν διάλυμα όγκου 12m<sup>3</sup> αποτελούνταν από 2 ανόργανους ιχνηθέτες (δεν ροφώνται ή διασπώνται) και 5 χλωριωμένους οργανικούς ρύπους με καθορισμένες αρχικές συγκεντρώσεις και μάζες (Πίνακας 3.2). Η εισπίεση έγινε εντός χρονικής περιόδου 14,75 ωρών από 9 πηγάδια σε κατακόρυφο διάστημα 1,6m (μεταξύ 2 και 3,6m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους).

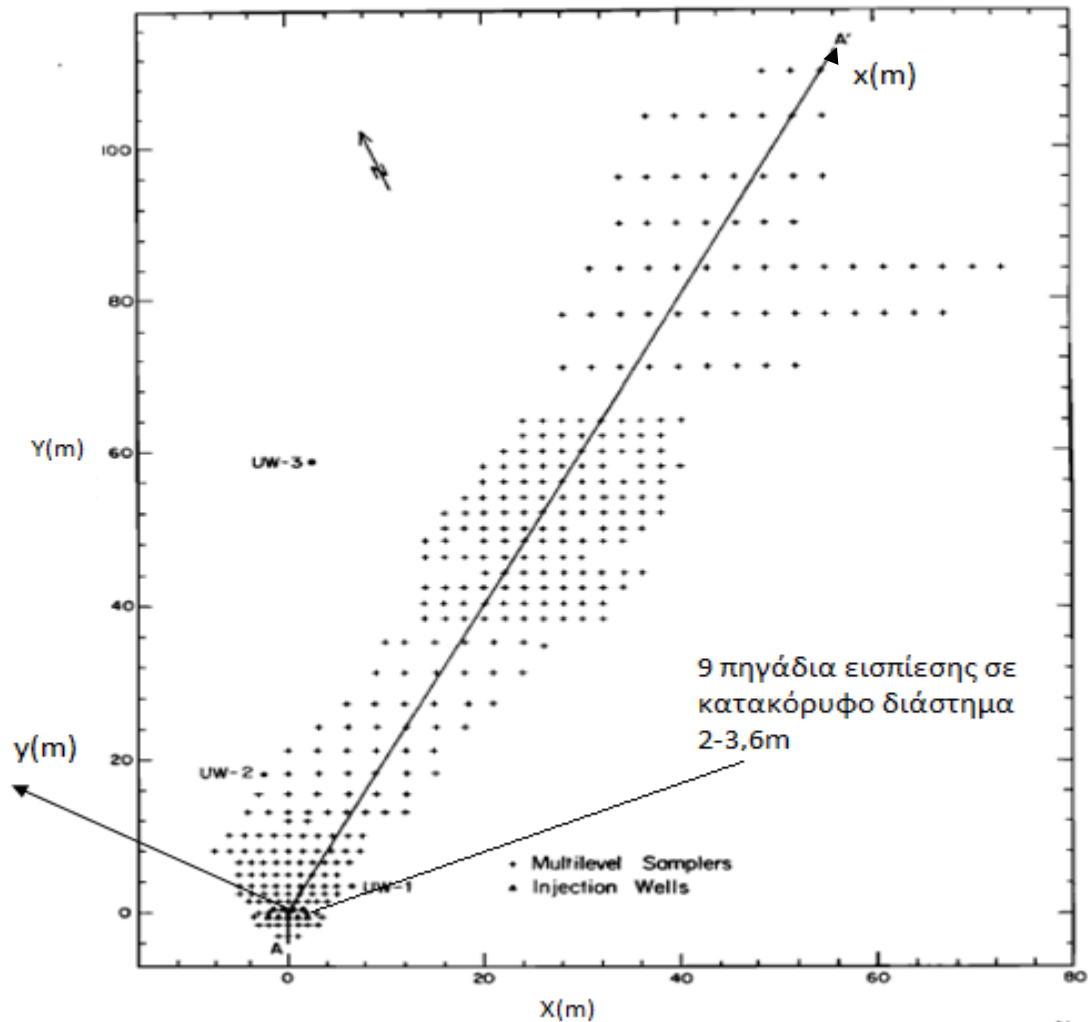
**Πίνακας 3.2 Οι εισπνεσθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986)**

<b>Διαλυμένες ουσίες</b>	<b>Εισπνεθείσα συγκέντρωση (mg/l)</b>	<b>Εισπνεθείσα μάζα (g)</b>
<b>Ιόν χλωρίου</b>	892	10700
<b>Ιόν βρωμίου</b>	324	3870
<b>Βρωμοφόρμιο</b>	0,032	0,38
<b>Τετραχλωρομεθάνιο</b>	0,031	0,37
<b>Τετραχλωροαιθυλένιο</b>	0,030	0,36
<b>1,2 διχλωροβενζόλιο</b>	0,332	4
<b>Εξαχλωροαιθάνιο</b>	0,020	0,23

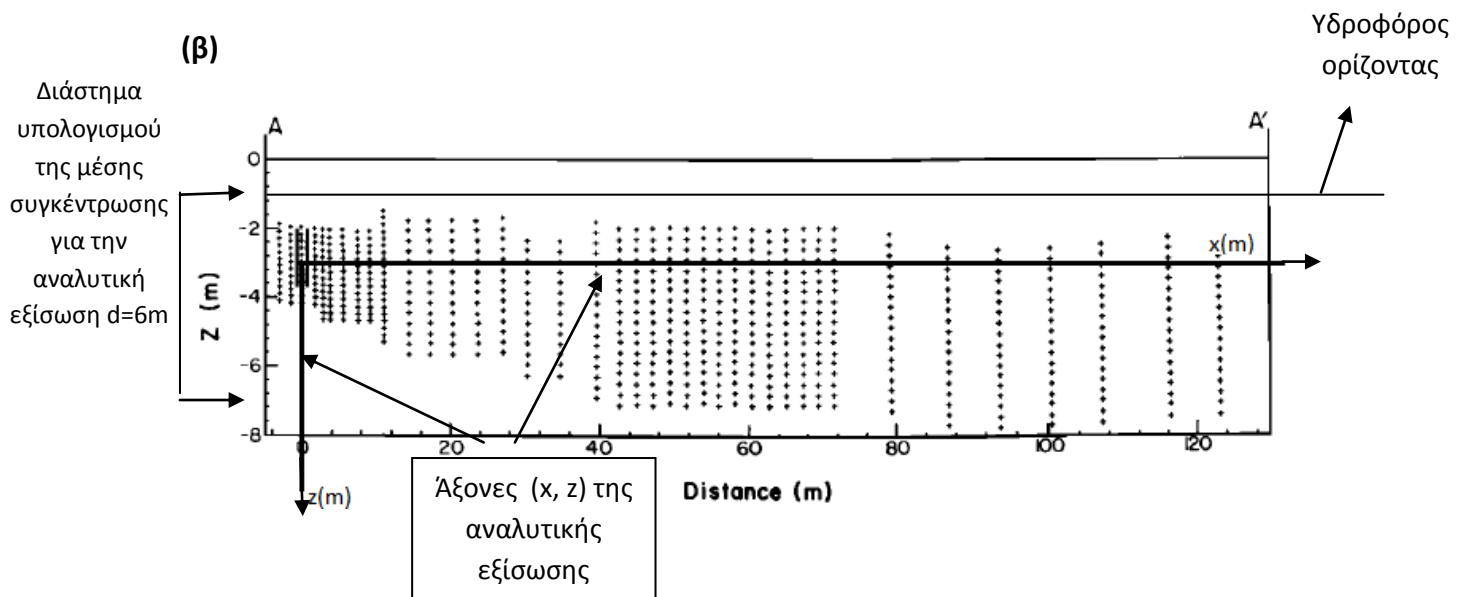
Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω του δικτύου πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling, MLS) που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.1. Η οριζόντια απόσταση μεταξύ των πηγαδιών δειγματοληψίας κυμαίνονταν μεταξύ 1 και 4m και η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των σημείων δειγματοληψίας κυμαίνονταν από 0,2 έως 0,3m.

Στη χρονική περίοδο των 3 χρόνων που διήρκησε το πείραμα, πραγματοποιήθηκαν 20 επεισόδια δειγματοληψίας από τα οποία προέκυψαν οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων ως προς την κατακόρυφη διεύθυνση για κάθε ρύπο. Οι Mackay et al. (1986) και Roberts et al. (1986) παρουσιάζουν τις κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου, τετραχλωρομεθανίου (CTET) και τετραχλωροαιθυλενίου (PCE) σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπίεση. Ως μέση συγκέντρωση, οι συγγραφείς ορίζουν τη μέση τιμή των συγκεντρώσεων στο ίδιο σημείο (σε κάτοψη) σε διαφορετικά βάθη (Βλέπε Σχήμα 3.1β).

(α)



(β)



Σχήμα 3.1 Κάτοψη (α) και τομή (β) κατά μήκος της ευθείας AA' του δικτύου δειγματοληψίας του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986)

### 3.1.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Στόχος της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος είναι η σύγκριση των μετρημένων συγκεντρώσεων από το πείραμα με τις υπολογισμένες συγκεντρώσεις από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)). Αρχικά γίνεται σύγκριση των συγκεντρώσεων με βάση τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις (την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και την σχέση των Xu και Eckstein 1995). Αναζητούνται οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες η οριζόντια και κατακόρυφη εξάπλωση του ιχνηθέτη (χλωρίον) από το πείραμα συμπίπτει κατά το δυνατόν με τα αποτελέσματα της αναλυτικής εξίσωσης. Γι' αυτές τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, συγκρίνονται οι κατανομές των συγκεντρώσεων ενός οργανικού ρύπου με τη θεώρηση γραμμικής ρόφησης και υποβάθμισης πρώτης τάξης. Τέλος, σημειώνεται ότι για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που θα προκύψουν από τη διαδικασία προσομοίωσης, δεν πραγματοποιείται απόπειρα διαχωρισμού του είδους των ανομοιογενειών (στη μικροκλίμακα και μακροκλίμακα) που προκαλούν τη διασπορά.

#### A) Ιχνηθέτης

##### 3.1.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης επιλέγεται σύστημα αξόνων (x,y,z) που προκύπτει με περιστροφή του συστήματος (X,Y,Z) αντιωρολογιακά κατά 75° (Σχήμα 3.1α). Η αρχή του συστήματος (x,y,z) βρίσκεται στις συντεταγμένες X=0, Y=0, Z=-3m (Σχήμα 3.1α), όπου ο άξονας x ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού και το σημείο εισπίεσης βρίσκεται σε βάθος 3m από την επιφάνεια του εδάφους (Σχήμα 3.1β).

Από το πείραμα προκύπτουν οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων (κατά την κατακόρυφη έννοια) του ιόντος χλωρίου, για κατακόρυφο διάστημα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης d από Z=-1,5 έως Z=-7,5m από την επιφάνεια του εδάφους (Σχήμα A.1, παράρτημα). Σημειώνεται ότι το διάστημα υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων παραμένει σταθερό, δηλαδή δεν αντιστοιχεί με την εκάστοτε κατακόρυφη εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής ή με το συνολικό διάστημα δειγματοληψίας των πηγαδιών. Οι μέσες συγκεντρώσεις (κατά την κατακόρυφη έννοια) προκύπτουν για κάθε πηγάδι (MLS) από την σχέση της τραπεζοειδούς ολοκλήρωσης διαιρεμένη με το συνολικό διάστημα υπολογισμού της μέσης τιμής d, δηλαδή:

$$C_{av} = \frac{\Delta_z \frac{(C_1 + C_n + 2\sum C_i)}{2}}{d} \quad (3.1)$$

Στην εξίσωση (3.1) το  $\Delta_z$  είναι η απόσταση μεταξύ των σημείων δειγματοληψίας σε ένα πηγάδι (MLS),  $C_1$  και  $C_n$  είναι οι συγκεντρώσεις στο ανώτερο και κατώτερο σημείο δειγματοληψίας αντίστοιχα και  $\Sigma C_i$  είναι το άθροισμα των συγκεντρώσεων στα ενδιάμεσα σημεία.

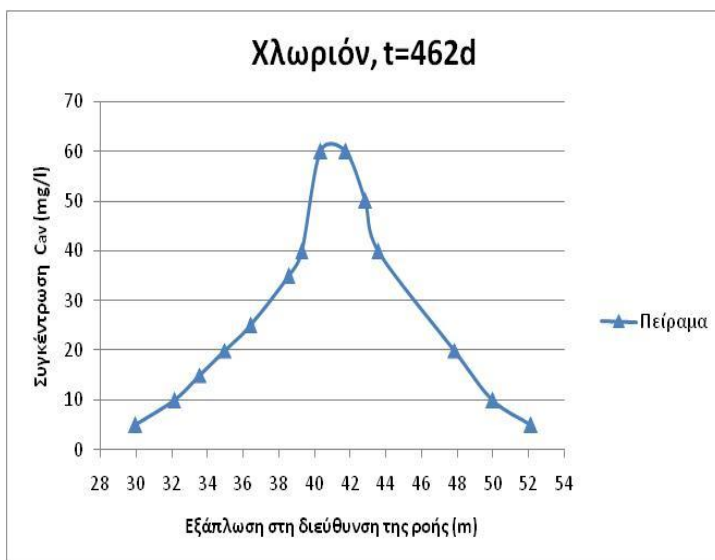
Οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων (κατά την κατακόρυφη έννοια) του χλωριόντος από την αναλυτική εξίσωση προκύπτουν, όπως προαναφέρθηκε, από την εξίσωση (3.1). Από το Σχήμα 3.1β, διαπιστώνεται ότι τα πηγάδια διαφέρουν ως προς το συνολικό διάστημα και τη θέση του ανώτερου σημείου δειγματοληψίας. Για την προσομοίωση των κατανομών του χλωριόντος, θεωρήθηκε μοναδικός τύπος πηγαδιού δειγματοληψίας, που παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.3. Το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού είναι ίσο με το συνολικό διάστημα υπολογισμού  $d$  των μέσων συγκεντρώσεων των κατανομών του χλωριόντος από το πείραμα, δηλαδή ίσο με 6m. Για την καλύτερη προσομοίωση της ρυπασμένης περιοχής, θεωρήθηκε ότι το ανώτερο σημείο δειγματοληψίας στο πηγάδι βρίσκεται στον υδροφόρο ορίζοντα ( $Z=-1m$ ) και το κατώτερο σημείο δειγματοληψίας βρίσκεται σε βάθος  $Z=-7m$  από την επιφάνεια του εδάφους (Σχήμα 1.3). Η απόσταση  $\Delta_z$  ελήφθη ίση με 0,2m, όσο είναι η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στα πηγάδια του πειράματος και το συνολικό διάστημα  $d$  υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων ελήφθη ίσο με 6m. Επομένως η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται για αποστάσεις από το σημείο εισπίεσης από  $z=-2m$  (ανώτερο σημείο) έως  $z=4m$  (κατώτερο σημείο), όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.3 με βάση τον άξονα  $z$  της αναλυτικής εξίσωσης. Τέλος, στο Παράρτημα 1.1 παρουσιάζονται αναλυτικά παραδείγματα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης του χλωριόντος.

Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση συγκρίνονται ως προς δύο κύρια χαρακτηριστικά: την μέγιστη συγκέντρωση και την έκταση της ρύπανσης, κατά τη διαμήκη και εγκάρσια κατεύθυνση. Η σύγκριση της έκτασης της ρύπανσης γίνεται για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης. Από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Α.1, κάνοντας τομή κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομή Ι-Ι) τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση, προκύπτει η κατανομή των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος του Σχήματος 3.2α. Παράλληλα στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων πραγματοποιείται τομή κάθετη στον άξονα  $x$  στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=40,7m$  (Τομή ΙΙ-ΙΙ, Σχήμα Α.1). Από την παραπάνω τομή προκύπτει το διάγραμμα μέσων συγκεντρώσεων ως προς την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του χλωριόντος, 462 ημέρες μετά την εισπίεση (Σχήμα 3.2β). Αντίστοιχα πραγματοποιείται τομή παράλληλη στον άξονα  $z$  στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Α.2, στο σημείο του άξονα  $x=45m$ , όπου παρατηρείται μέγιστη κατακόρυφη εξάπλωση (Τομή Ε-Ε). Από την παραπάνω τομή προκύπτει η κατανομή των συγκεντρώσεων ως προς την κατακόρυφη εξάπλωση του χλωριόντος, 462 ημέρες μετά την εισπίεση, που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.2γ.

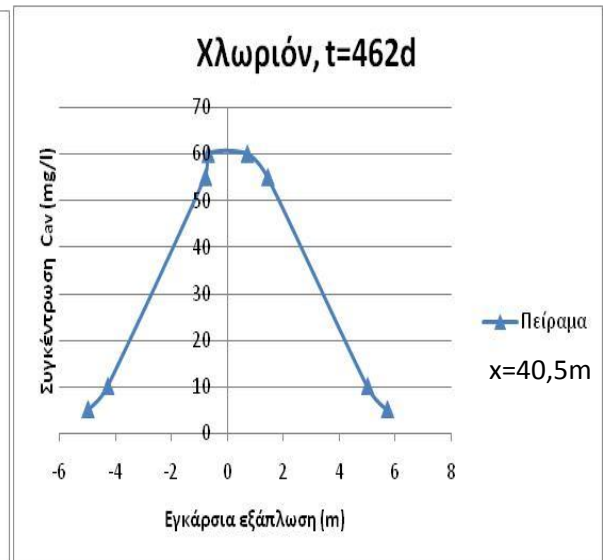


### Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

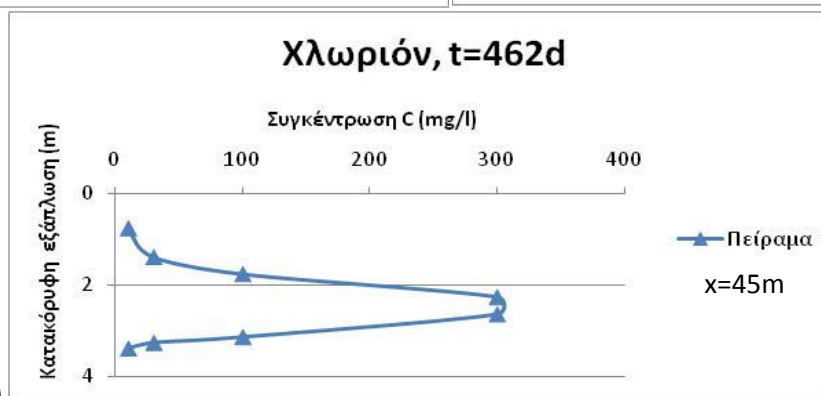
α)



β)



γ)



Σχήμα 3.2 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές μέσω των συγκεντρώσεων κατά την κατακόρυφη έννοια

#### 3.1.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης απαιτούνται οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα, οι συντελεστές μηχανικής διασποράς, ο συντελεστής διάχυσης καθώς και δεδομένη υστέρηση, υποβάθμιση και μάζα του ρύπου στο εισπιασθέν διάλυμα. Οι υδρογεωλογικές παράμετροι (ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$ ) παρουσιάζονται στο Πίνακα 3.1 και η μάζα του ιχνηθέτη (χλωριόν) στο εισπιασθέν διάλυμα παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.2. Παράλληλα επειδή το χλωριόν ως ιχνηθέτης δεν ροφάται ούτε διασπάται ο συντελεστής υστέρησης ισούται με  $R=1$  και ο ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης ισούται με  $\lambda=0 \text{ d}^{-1}$ . Τέλος για μια συνήθη εκτίμηση του συντελεστή διάχυσης σε υδατικό διάλυμα  $D_\delta=10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  προκύπτει ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e= D_\delta \omega$  ίσος με  $D_e=0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ . Ο συντελεστής  $\omega$  λαμβάνεται ίσος με 0,7 αφού ο υδροφορέας του χώρου διεξαγωγής του πειράματος είναι αμμώδης (Perkins και Johnson 1963).

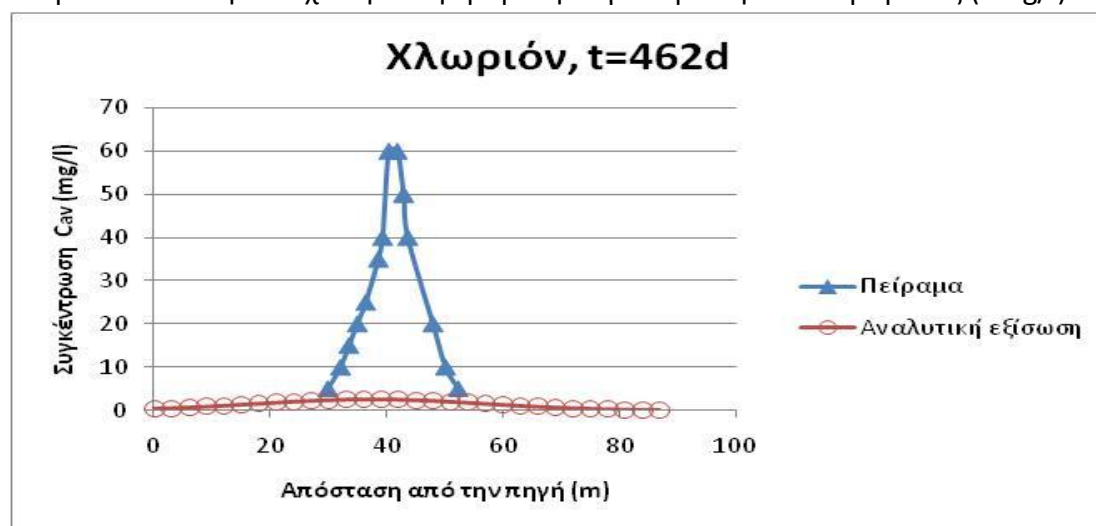
Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με εμπειρικές σχέσεις. Χρησιμοποιήθηκε η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  καθώς και η σχέση  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  των Xu και Eckstein (1995). Παράλληλα ο λόγος του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς προς τον συντελεστή οριζόντιας διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος με 0,1 (Gelhar et al. 1992). Τέλος, για τον λόγο του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς προς τον συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_z/\alpha_x$  ελέγχθηκαν δύο τιμές, 0,1 και 0,01 (Gelhar et al. 1992).

Οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς είναι αυτές για τις οποίες επιτυγχάνεται το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης. Εάν η σύγκλιση των κατανομών δεν επιτευχθεί με τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από τις εμπειρικές σχέσεις τότε πραγματοποιούνται δοκιμές μέχρι την σύγκλιση του εύρους των κατανομών.

### 3.1.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη

#### α) εμπειρικός κανόνας $\alpha_x=0,1x$

Από το Σχήμα Α.1, μετρώντας κατά μήκος του άξονα x παρατηρείται ότι μετά από 462 ημέρες από την έναρξη του πειράματος, η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση χλωριόντος έχει φτάσει σε απόσταση  $L=52m$ . Για λόγο  $\alpha_y/\alpha_x$  ίσο με 0,1 (Gelhar et al. 1992) και λόγο  $\alpha_z/\alpha_x$  επίσης ίσο με 0,1, προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=5,2m$ ,  $\alpha_y=0,52m$  και  $\alpha_z=0,52m$ . Για τις τιμές αυτές διαπιστώνεται ότι οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης διαφέρουν πολύ (Σχήμα 3.3). Παρατηρείται ότι η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 2,54mg/l και είναι μικρότερη ακόμα και από την ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση του πειράματος (5mg/l).



Σχήμα 3.3 Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=5,2m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,52m$

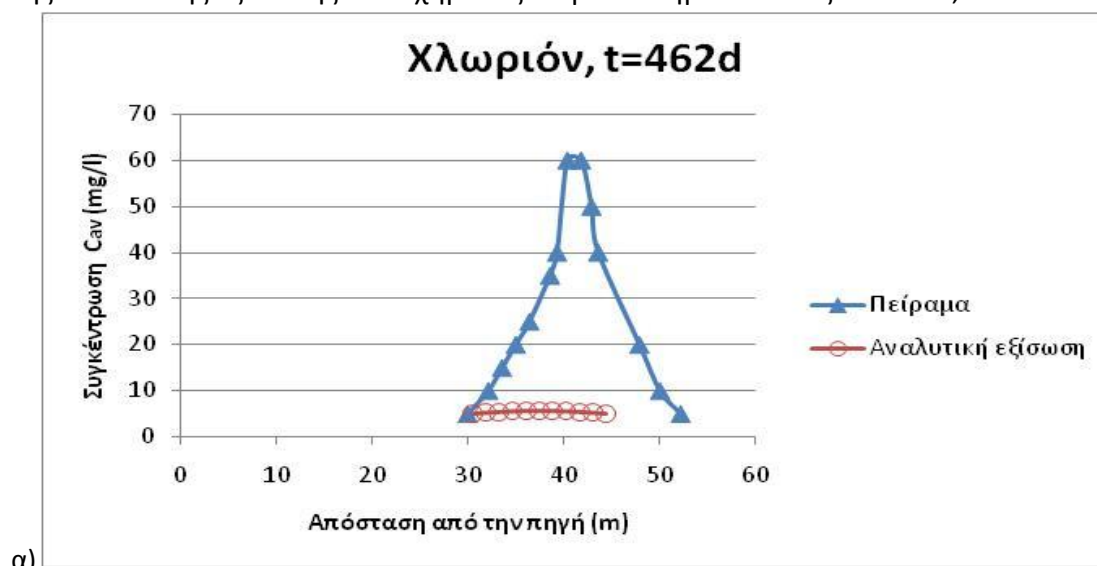
Με την μείωση του λόγου  $\alpha_z/\alpha_x$  σε 0,01, οι τιμές των υπολογισμένων συγκεντρώσεων αυξάνονται και φτάνουν την μέγιστη τιμή των 5,7mg/l, αλλά η απόκλιση του εύρους των δύο κατανομών παραμένει μεγάλη.

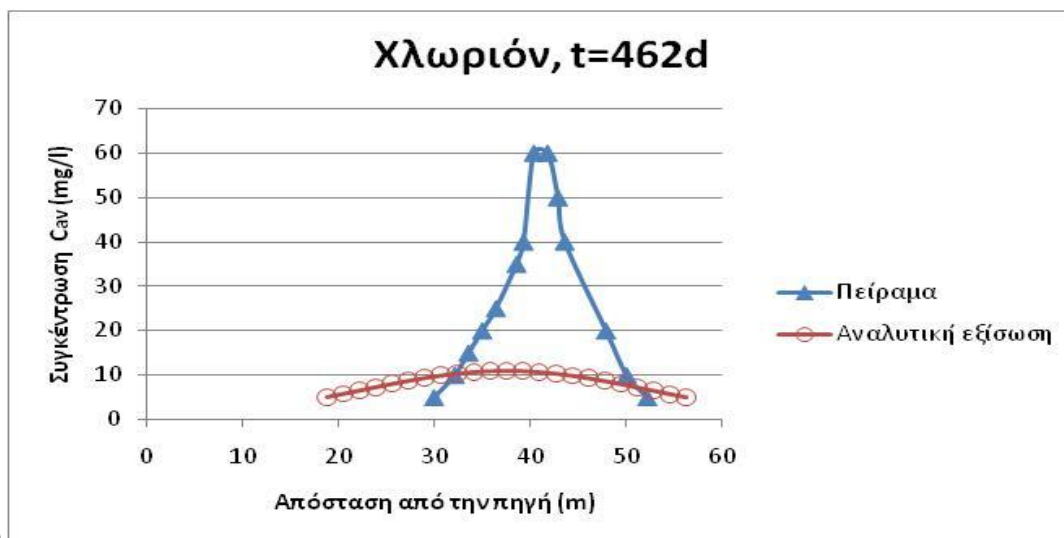
*β) εμπειρική σχέση  $X_u$  και Eckstein (1995)*

Στη συνέχεια ελέγχεται μία δεύτερη σχέση για την εκτίμηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  (Xu και Eckstein 1995). Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς ίσος με  $\alpha_x=3m$ . Παράλληλα ο συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς λαμβάνεται όπως πριν ίσος με το 1/10 του συντελεστή οριζόντιας διαμήκους μηχανικής διασποράς, δηλαδή ίσος με  $\alpha_y=0,3m$ . Τέλος θεωρούνται δύο τιμές του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με το 1/10 και το 1/100 του συντελεστή οριζόντιας διαμήκους μηχανικής διασποράς αντίστοιχα.

Στην κατανομή του Σχήματος 3.4α, που αντιστοιχεί σε τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=3m$ ,  $\alpha_y=0,3m$  και  $\alpha_z=0,3m$ , η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης φτάνει τα 5,6mg/l, δηλαδή εξακολουθεί να είναι πολύ μικρότερη από τη μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής του πειράματος που είναι 60mg/l. Στο ίδιο σχήμα η διαφορά του εύρους των δύο καμπυλών είναι ίση με 8,1m.

Αντίστοιχα στη κατανομή του Σχήματος 3.4β, που αντιστοιχεί σε τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=3m$ ,  $\alpha_y=0,3m$  και  $\alpha_z=0,03m$ , η μέγιστη συγκέντρωση αυξήθηκε σε 10,9mg/l αλλά επίσης αυξήθηκε και η διαφορά του εύρους των κατανομών σε 15,3m. Επομένως απαιτείται περαιτέρω μείωση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς για τη μείωση του εύρους της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης. Τέλος, σημειώνεται ότι στο Παράρτημα Ι.1 παρουσιάζεται αναλυτικά ο υπολογισμός της μέσης συγκέντρωσης της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.4β στο σημείο του άξονα  $x=30,7m$ .



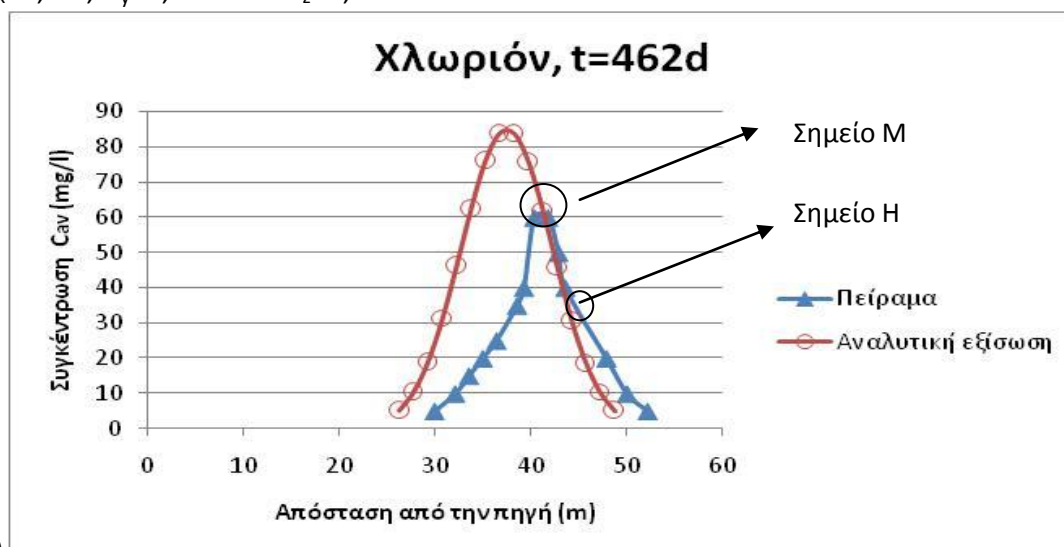


β)

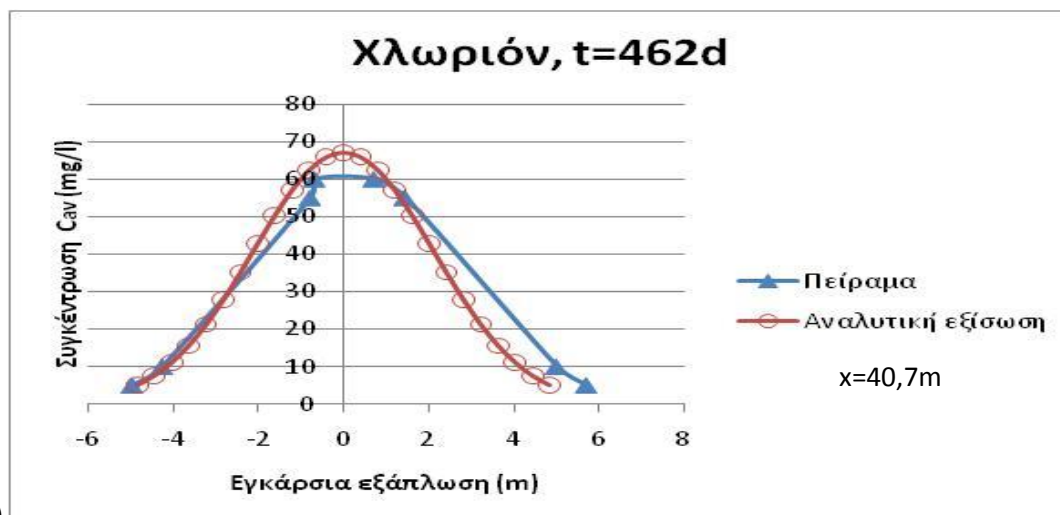
Σχήμα 3.4 Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς α)  $\alpha_x=3m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,3m$  και β)  $\alpha_x=3m$ ,  $\alpha_y=0,3m$  και  $\alpha_z=0,03m$

3.1.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Η σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται με την μείωση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς στο 1/10 της τιμής που προκύπτει από την εμπειρική σχέση των  $X_u$  και Eckstein (1995). Παράλληλα ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  για τον οποίο επιτυγχάνεται η καλύτερη σύγκλιση των κατανομών είναι ίσος με 1/5. Τέλος, ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  για τον οποίο επιτυγχάνεται η σύγκλιση των κατανομών είναι ίσος με το 1/100. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,06m$  και  $\alpha_z=0,003m$ .



α)



β)

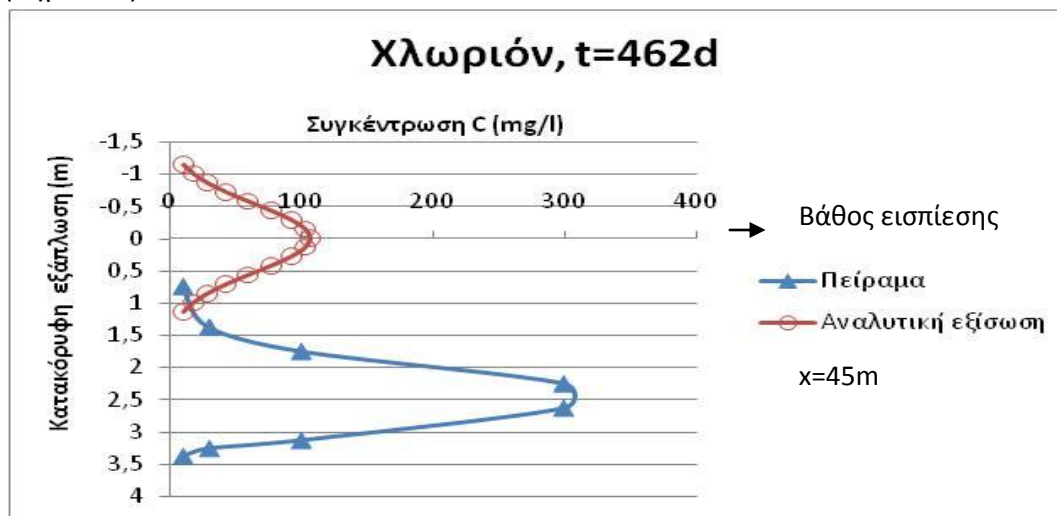
Σχήμα 3.5 Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,06m$  και  $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και y ( $\beta$ )

Οι κατανομές του Σχήματος 3.5 συγκρίνονται ικανοποιητικά μεταξύ τους καθώς η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι της τάξεως του 1m. Συγκεκριμένα, στο Σχήμα 3.5α το εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 22,1m ενώ το αντίστοιχο εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 22,5m. Στο ίδιο σχήμα, η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης της κατανομής του πειράματος είναι 60mg/l και της αναλυτικής εξίσωσης είναι 85mg/l. Αντίστοιχα στο Σχήμα 3.5β το εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 10,7m ενώ το αντίστοιχο εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 9,7m. Στο Σχήμα 3.5β, η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι 67mg/l. Τέλος, επισημαίνεται ότι παρατηρείται διαφορά των μέγιστων τιμών συγκέντρωσης των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης στα Σχήματα 3.5α και 3.5β. Η διαφορά αυτή οφείλεται στο ότι η αναλυτική εξίσωση, για την παραγωγή της κατανομής του Σχήματος 3.5β, εφαρμόζεται στο σημείο όπου έγινε η τομή II-II ( $x=40,7m$ , Σχήμα A.1) και όχι στο σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων που προκύπτει από την αναλυτική εξίσωση ( $x=v_x t=37,4m$ ). Στο Παράρτημα Ι.1, παρουσιάζεται αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.5α, στο σημείο του άξονα  $x=41,2m$  (Σημείο M).

Τέλος πολύ μικρή διαφορά έχει και το εύρος των κατανομών κατά τη διεύθυνση του άξονα z (Σχήμα 3.6) όπου η κατανομή του πειράματος έχει εύρος 2,6m και η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος 2,3m. Αν και η διαφορά στη μέγιστη τιμή είναι σημαντική, δόθηκε βάση στο ταίριασμα του εύρους των κατανομών. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.6, η ρυπασμένη περιοχή του πειράματος παρουσιάζει και κατακόρυφη κίνηση. Αντίθετα η αναλυτική εξίσωση θεωρεί μονοδιάστατη μεταγωγή κατά τη διεύθυνση του άξονα x και τριδιάστατη διασπορά επομένως το κέντρο μάζας της ρυπασμένης περιοχής παραμένει στον οριζόντιο άξονα που περνάει από το σημείο έκλυσης της μάζας (δηλαδή στον άξονα x). Εάν γίνει

### Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

υπολογισμός της μέσης συγκέντρωσης στο σημείο του άξονα  $x=45\text{m}$ , από το οποίο προέκυψε η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.6, με τον τρόπο που παρουσιάστηκε στο Παράρτημα Ι.1, η τιμή που θα προκύψει θα είναι ίση με  $C_{av}=23,7\text{mg/l}$ . Η μέση συγκέντρωση του πειράματος στο σημείο  $x=45\text{m}$ , προκύπτει από την καμπύλη του πειράματος του Σχήματος 3.5α και είναι ίση με  $C_{av}=35\text{mg/l}$  (Σημείο Η).



Σχήμα 3.6 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$

Με βάση τις παραπάνω προσπάθειες σύγκλισης με τη μέθοδο δοκιμής-λάθους, καταλήγουμε στις προτεινόμενες τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.3. Η σύγκριση των τιμών του Πίνακα 3.3 με τιμές που προέκυψαν από την εφαρμογή μεθόδου ροπών (spatial moments analysis) στα αποτελέσματα του πειράματος (Freyberg et al. 1986) και από στοχαστικά μοντέλα (Sudicky 1986) θα γίνει στο Κεφάλαιο 6.

Πίνακας 3.3 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν

Παράμετρος	Τιμή
Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(\text{m})$	0,3
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(\text{m})$	0,06
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(\text{m})$	0,003

## B) Οργανικός ρύπος

### 3.1.2.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο

Η σύγκριση των μετρημένων συγκεντρώσεων του πειράματος και των υπολογισμένων συγκεντρώσεων από την αναλυτική εξίσωση γίνεται και για έναν

από τους οργανικούς ρύπους του πειράματος. Οι οργανικοί ρύποι του πειράματος για τους οποίους παρουσιάζονται στην βιβλιογραφία (Maskay et al. 1986, Roberts et al. 1986) κατανομές μέσων συγκεντρώσεων (κατά τους άξονες  $x$  και  $y$ ) είναι το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) και το τετραχλωροαιθυλένιο (PCE). Από τους παραπάνω ρύπους επιλέχτηκε για την προσομοίωση το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) καθώς μόνο για αυτό είναι σαφώς δοσμένο το διάστημα υπολογισμού  $d$  στο οποίο βρέθηκαν οι μέσες συγκεντρώσεις κατά την κατακόρυφη έννοια.

Όπως για τον ιχνηθέτη έτσι και για τον οργανικό ρύπο ισχύει το ίδιο σύστημα αξόνων και εφαρμόστηκε η ίδια εξίσωση (3.1) για τον υπολογισμό των μέσων συγκεντρώσεων του πειράματος. Οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του πειράματος για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) προκύπτουν για διάστημα υπολογισμού της μέσης τιμής  $d$  από  $Z=-1,5$  έως  $Z=-6m$  από την επιφάνεια του εδάφους (με βάση την πειραματική κατανομή), δηλαδή για διάστημα ίσο με 4,5m.

Οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων (κατά την κατακόρυφη έννοια) της αναλυτικής εξίσωσης προκύπτουν όπως και για το πείραμα (δηλαδή από την εξίσωση (3.1)). Θεωρήθηκε μοναδικός τύπος πηγαδιού δειγματοληψίας, του οποίου το διάστημα δειγματοληψίας είναι ίσο με το διάστημα υπολογισμού  $d$  της μέσης συγκέντρωσης, δηλαδή ίσο με 4,5 (Σχήμα 1.6). Επομένως, ελήφθη απόσταση  $\Delta_z$  ίση με 0,25m και διάστημα υπολογισμού  $d$  της μέσης συγκέντρωσης ίσο με 4,5m. Υπενθυμίζεται ότι για τον υπολογισμό των μέσων συγκεντρώσεων του ιχνηθέτη από την αναλυτική εξίσωση, η απόσταση  $\Delta_z$  ελήφθη ίση με 0,2m. Αντίθετα για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET), για την επίτευξη διαστήματος δειγματοληψίας της τάξεως των 4,5m, θεωρήθηκε απαραίτητο η αύξηση της απόστασης  $\Delta_z$  σε 0,25m. Διευκρινίζεται ότι η απόσταση αυτή είναι εντός του εύρους της απόστασης των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι που κυμαίνεται μεταξύ 0,2 και 0,3m. Επομένως η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται για αποστάσεις από το σημείο εισπίεσης από  $z=-2m$  (ανώτερο σημείο) έως  $z=2,5m$  (κατώτερο σημείο), όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.6 με βάση τον άξονα  $z$  της αναλυτικής εξίσωσης. Τέλος, στο Παράρτημα 1.2, παρουσιάζεται αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης του τετραχλωρομεθανίου (CTET).

Συγκρίνονται οι κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET), από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, κατά την διαμήκη και εγκάρσια κατεύθυνση. Οι κατανομές του πειράματος προκύπτουν από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Α.1, με τομή κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομή Β-Β) και τομή παράλληλη στον άξονα  $y$  (Τομή Α-Α), όπως περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.2.2.1 για τον ιχνηθέτη.

#### *3.1.2.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο*

Για την προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) θα εφαρμοστεί η αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης

ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)), στην οποία η ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$  θα αντικατασταθεί από την ταχύτητα κίνησης του ρύπου  $v_c=v_x/R$ , όπου  $R$  είναι ο συντελεστής υστέρησης. Όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1.1, σε αυτή την περίπτωση οι συντελεστές υδροδυναμικής διασποράς διαιρούνται επίσης με τον συντελεστή υστέρησης  $R$  και έτσι ενσωματώνεται η υστέρηση λόγω γραμμικής ρόφησης.

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης απαιτούνται οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα (Πίνακας 3.1) και η μάζα του τετραχλωρομεθανίου (CTET) στο εισπνευσθέν διάλυμα (Πίνακας 3.2). Χρησιμοποιούνται οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που βρέθηκαν από τη σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης του ιχνηθέτη (Πίνακας 3.3) και η ίδια τιμή του συντελεστή διάχυσης στο έδαφος,  $D_e=0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

Παράλληλα με την διεξαγωγή της επί τόπου δοκιμής πραγματοποιήθηκαν εργαστηριακές δοκιμές σε δείγμα εδάφους που ελήφθη από το χώρο διεξαγωγής του πειράματος. Από την αλλαγή των συγκεντρώσεων των οργανικών διαλυμάτων του πειράματος σε πείραμα διακοπτόμενου έργου (batch test) προέκυψε ότι η ρόφηση μπορεί να περιγραφεί από τη γραμμική ισόθερμη και από μία τιμή του συντελεστή διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p$  για κάθε ρύπο (Curtis et al. 1986). Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) θα χρησιμοποιηθεί η τιμή του συντελεστή υστέρησης που προέκυψε από αυτές τις εργαστηριακές δοκιμές, που είναι ίση με  $R=1,9$ , δηλαδή για συντελεστή διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p=0,164 \text{ cm}^3/\text{g}$  (Curtis et al. 1986).

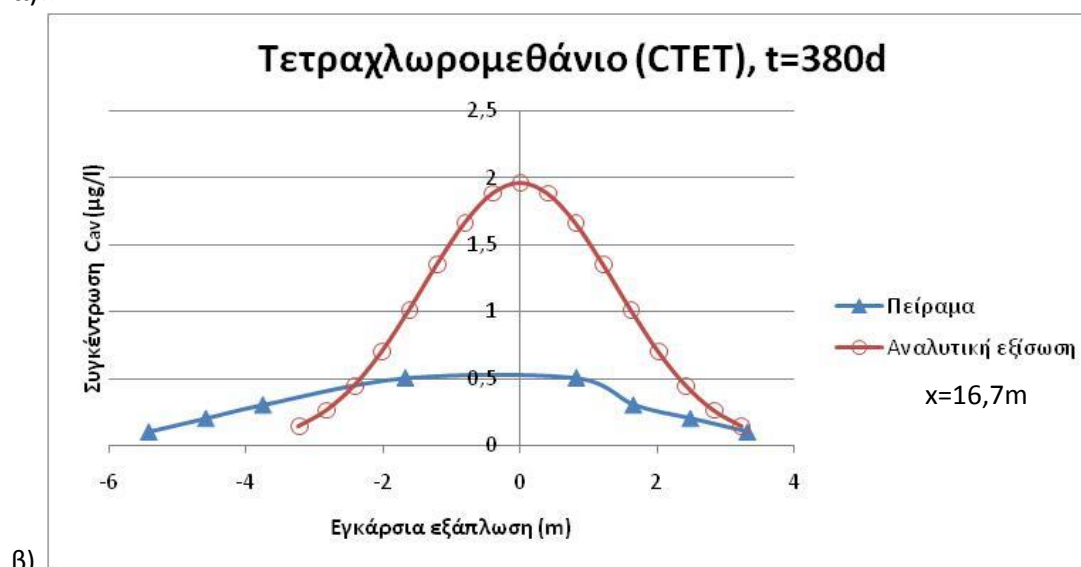
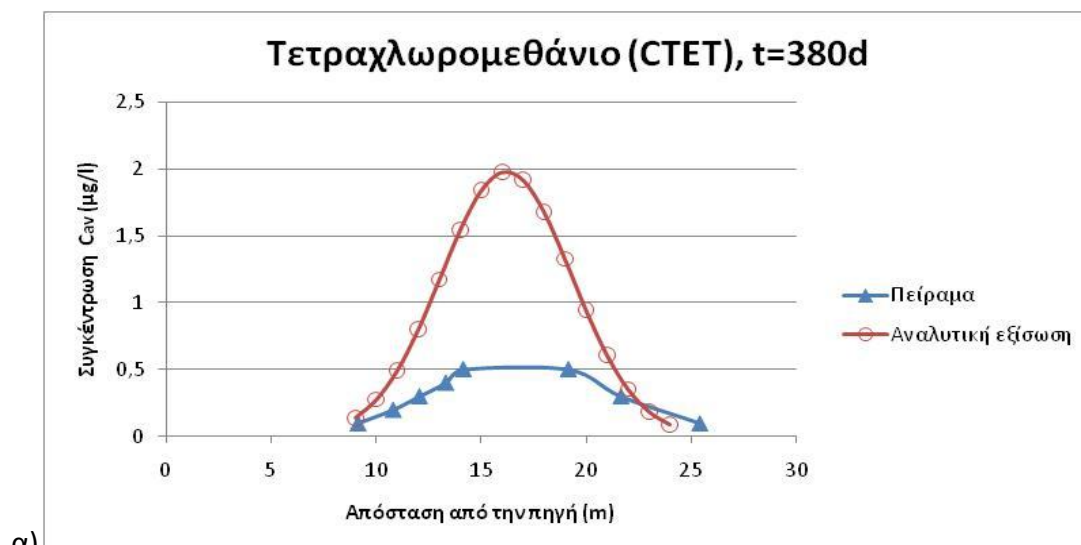
Από τον υπολογισμό της συνολικής μάζας (διαλυμένης και ροφημένης) του τετραχλωρομεθανίου (CTET) σε διαφορετικές χρονικές στιγμές κατά τη διάρκεια του πειράματος διαπιστώθηκε ότι η μάζα του παρέμενε σταθερή παρότι είχε επισημανθεί η πιθανότητα αποδόμησής του υπό αναερόβιες συνθήκες (Roberts et al. 1986). Από εργαστηριακές δοκιμές και πειράματα προέκυψε το εύρος των συντελεστών μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  του τετραχλωρομεθανίου (CTET) από  $0,004$  έως  $0,490 \text{ d}^{-1}$  για αναγωγική αποχλωρίωση (Suarez και Rifai 1999). Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET) θα χρησιμοποιηθεί η κατώτερη τιμή του εύρους του ρυθμού μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  που βρέθηκε στη βιβλιογραφία ( $0,004 \text{ d}^{-1}$ ).

#### *3.1.2.2.7 Σύγκριση των κατανομών του τετραχλωρομεθανίου (CTET) για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς*

Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.3), από το Σχήμα 3.7α φαίνεται ότι η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι της τάξεως των 2m. Συγκεκριμένα το εύρος της καμπύλης του πειράματος είναι 16,2m ενώ το αντίστοιχο εύρος της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης είναι 15m. Αντίστοιχα στο Σχήμα 3.7β το εύρος της κατανομής



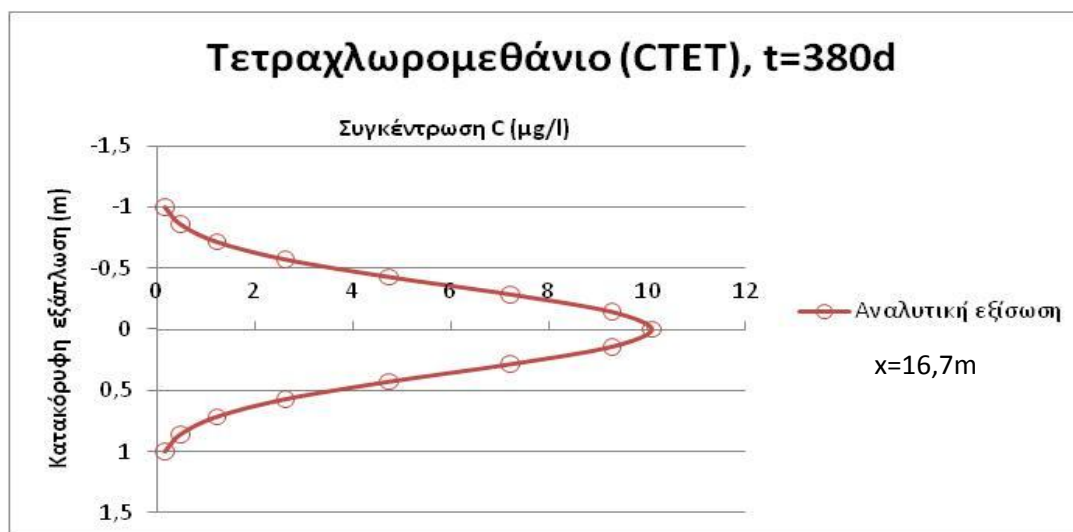
του πειράματος είναι 8,7m και το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 6,5m. Αντίθετα με την καλή προσαρμογή του εύρους των κατανομών, η μέγιστη συγκέντρωση της αναλυτικής εξίσωσης είναι σχεδόν τετραπλάσια από αυτή του πειράματος και στα δύο σχήματα (3.7α, 3.7β).



**Σχήμα 3.7** Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,006\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στους άξονες x (α) και y (β)

Εφόσον δεν υπάρχει κατανομή των συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) ως προς το βάθος από το πείραμα, δεν υπάρχει εικόνα για την κατακόρυφη εξάπλωσή του. Εφαρμόζεται η αναλυτική εξίσωση στην ίδια απόσταση από την πηγή,  $x=16,7\text{m}$ , από την οποία προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.7β. Η κατανομή των συγκεντρώσεων κατά την διεύθυνση του άξονα z από την αναλυτική εξίσωση παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.8. Το εύρος της καμπύλης του Σχήματος 3.8 είναι ίσο με 2m και η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης ισούται με  $10,1\mu\text{g/l}$ . Τονίζεται ότι η ελάχιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.8 είναι ίση με  $0,1\mu\text{g/l}$ , όπως και στις κατανομές του Σχήματος 3.7. Τέλος, στο

Παράρτημα 1.2 παρουσιάζεται το αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης στο σημείο του άξονα  $x=16,7\text{m}$ , από το οποίο προέκυψε η κατανομή του Σχήματος 3.8. Η μέση συγκέντρωση που προέκυψε είναι ίση με  $1,96\mu\text{g/l}$ . Η μέση συγκέντρωση του πειράματος στο ίδιο σημείο του άξονα  $x$  προκύπτει από την καμπύλη του Σχήματος 3.7α και είναι μεγαλύτερη από  $0,5\mu\text{g/l}$ .



Σχήμα 3.8 Κατανομή των συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) κατά τη διεύθυνση του άξονα  $z$ , από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$

### 3.1.3 Πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX)

Στο δεύτερο μεγάλης κλίμακας πείραμα μεταφοράς στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα στο Μπόρντεν, εισπίεστηκε διάλυμα με γνωστές μάζες αρωματικών υδρογονανθράκων (βενζόλιο, τολουόλιο, ξυλόλιο) και χλωριόντος (ιχνηθέτης). Το πείραμα μεταφοράς πραγματοποιήθηκε στον ίδιο δανειοθάλαμο αμμοληψίας που πραγματοποιήθηκε και το πρώτο πείραμα μεταφοράς στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986). Παρότι η διαφυγή προϊόντων πετρελαίου συμβαίνει συνήθως πάνω από τον υδροφόρο ορίζοντα, οι αρωματικές ενώσεις του πετρελαίου (BTEX) έχουν μεγάλη διαλυτότητα στο νερό και συνεχίζουν να ρυπαίνουν το υπόγειο νερό μετά την αφαίρεση της μη υδατικής φάσης. Σκοπός του πειράματος αυτού ήταν η μελέτη των διεργασιών που καθορίζουν την κινητικότητα και επιμονή των διαλυμένων αρωματικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX) στο υπόγειο νερό αμμόδους υδροφορέα.

#### 3.1.3.1 Περιγραφή πειράματος

Η εισπίεση του διαλύματος στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα έγινε από ένα πηγάδι εισπίεσης σε κατακόρυφο διάστημα από 2,2 έως 2,8m. Τα συστατικά του εισπιοθέντος διαλύματος παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.4 και είναι το χλωριόν, που αποτελεί τον ιχνηθέτη του πειράματος και πέντε αρωματικές ενώσεις του πετρελαίου (BTEX) με διαφορετική κινητικότητα και αναμενόμενη επιμονή. Στις 9

Αυγούστου 1984 ξεκίνησε η εισπίεση των 1800L διαλύματος στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα και συνεχίστηκε για 21 ώρες με σταθερό ρυθμό εισπίεσης ίσο με 1,4L / min.

**Πίνακας 3.4 Οι εισπιασθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν (Patrick και Barker 1985)**

<b>Διαλυμένες ουσίες</b>	<b>Εισπιασθείσα συγκέντρωση (mg/l)</b>	<b>Εισπιασθείσα μάζα (g)</b>
<b>Βενζόλιο</b>	2,360	4,248
<b>Τολουόλιο</b>	1,750	3,15
<b>Ο-ξυλόλιο</b>	1,080	1,944
<b>Ρ-ξυλόλιο</b>	1,090	1,962
<b>Μ-ξυλόλιο</b>	1,290	2,322
<b>Ιόν Χλωρίου</b>	1280	2304

Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω του δικτύου πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling- MLS) που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.2.1 όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.1. Η διάρκεια παρακολούθησης της εξέλιξης της ρύπανσης ήταν μικρότερη από αυτή του πειράματος με τους χλωριωμένους οργανικούς ρύπους (Ενότητα 3.1.2.1) οπότε η περιοχή εξάπλωσης της ρύπανσης ήταν μικρότερη. Από τα προϋπάρχοντα πηγάδια στην περιοχή αυτή λαμβάνονταν δείγματα ανά 0,2m, από το βάθος των 1,8m από την επιφάνεια του εδάφους έως τα 4,4m η απόσταση μεταξύ τους κυμαίνονταν μεταξύ 1 και 3m. Για την καλύτερη παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης προστέθηκαν επιπλέον πηγάδια δειγματοληψίας (MLS) κοντά στο σημείο εισπίεσης. Τα πηγάδια που προστέθηκαν αποτελούνταν από 7 ή 23 θέσεις δειγματοληψίας σε απόσταση 0,2m μεταξύ τους που ξεκινούσαν από τα 0,6m από την επιφάνεια του εδάφους και έφταναν τα 1,8 ή 5m βάθος αντίστοιχα. Όλοι οι τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας στο χώρο διεξαγωγής του πειράματος παρουσιάζονται στο Σχήμα Β.1 του παραρτήματος.

Εντός της χρονικής διάρκειας του πειράματος, που ήταν 3 μήνες, πραγματοποιήθηκαν 3 επεισόδια δειγματοληψίας. Οι Patrick και Barker (1985) παρουσιάζουν σε κάτοψη τις κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος, βενζολίου και τολουολίου που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων που παρουσιάζονται στο Σχήμα Γ.1 του παραρτήματος προέκυψαν από την τραπεζοειδή ολοκλήρωση ως προς το βάθος των συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Επίσης, οι Patrick και Barker (1985) παρουσιάζουν τις κατανομές

των συγκεντρώσεων του χλωριόντος και του ρ-ξυλολίου ως προς το βάθος, 32 και 53 ημέρες μετά την εισπίεση, σε πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται σε απόσταση 3m από το σημείο εισπίεσης. Στο Σχήμα Γ.2 παρουσιάζεται η κατανομή συγκεντρώσεων τη χρονική στιγμή 53 ημέρες μετά την εισπίεση.

### 3.1.3.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Η διαδικασία προσομοίωσης είναι όμοια με αυτή που ακολουθήθηκε στο πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1.2.2). Υπολογίζονται οι συγκεντρώσεις με την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)), με θεώρηση γραμμικής ρόφησης και υποβάθμισης πρώτης τάξης και συγκρίνονται με τις αντίστοιχες μετρημένες συγκεντρώσεις του πειράματος. Αναζητούνται οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες το εύρος των κατανομών των συγκεντρώσεων κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση του ιχνηθέτη (χλωριόν) από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση κατά το δυνατόν συμπίπτει. Τέλος, όπως και στην Ενότητα 3.1.2.2.7, για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που επιτεύχθηκε το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών του ιχνηθέτη, συγκρίνονται οι κατανομές συγκεντρώσεων ενός οργανικού ρύπου.

## A) Ιχνηθέτης

### 3.1.3.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη

Επιλέγεται σύστημα αξόνων (x,y,z) που προκύπτει όπως και στο πείραμα εισπίεσης των χλωριωμένων οργανικών ρύπων (Ενότητα 3.1.2.2) με περιστροφή του συστήματος (X,Y,Z) αντιωρολογιακά κατά 75° (Σχήμα Γ.1). Η αρχή του συστήματος (x,y,z) βρίσκεται στις συντεταγμένες X=-3, Y=3,9, Z=-2,4m (Σχήμα Γ.1) και ο άξονας x ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού.

Στο Σχήμα Γ.1 παρουσιάζονται οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου, βενζολίου και τολουολίου, σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπίεση, όπως προέκυψαν από το πείραμα. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων προκύπτουν από την ολοκλήρωση στην κατακόρυφη διεύθυνση των συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι συγκεντρώσεις σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας ολοκληρώνονται κατά την κατακόρυφη διεύθυνση από την εξίσωση της τραπεζοειδούς ολοκλήρωσης:

$$C_{int} = \Delta_z \frac{(C_1 + C_n + 2\sum C_i)}{2} \quad (3.2)$$

Στην εξίσωση (3.2), το  $\Delta_z$  είναι η απόσταση μεταξύ των σημείων δειγματοληψίας σε ένα πηγάδι (MLS),  $C_1$  και  $C_n$  είναι οι συγκεντρώσεις στο ανώτερο και κατώτερο σημείο δειγματοληψίας αντίστοιχα και  $\sum C_i$  είναι το άθροισμα των συγκεντρώσεων στα ενδιάμεσα σημεία. Σημειώνεται ότι αν οι συγκεντρώσεις στα σημεία

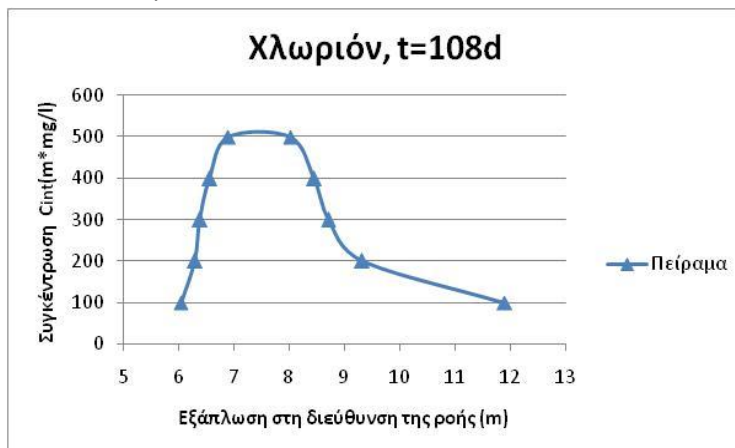
δειγματοληψίας ενός πηγαδιού είναι σε mg/l, τότε η συγκέντρωση στο πηγάδι μετά την κατακόρυφη ολοκλήρωση έχει μονάδες (mg/l)m.

Όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 3.1.3.1 και παρουσιάζεται στο Σχήμα Β.1, στο χώρο διεξαγωγής του πειράματος υπήρχαν 3 διαφορετικοί τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS). Για την κατακόρυφη ολοκλήρωση των αποτελεσμάτων της αναλυτικής εξίσωσης θεωρήθηκε μοναδικός τύπος πηγαδιού δειγματοληψίας (MLS) και εφαρμόστηκε η εξίσωση (3.2). Ο τύπος που επιλέχτηκε ήταν αυτός που λάμβανε δείγματα από τον υδροφόρο ορίζοντα ( $Z=0,8m$ ) έως βάθος  $Z=-5m$  από την επιφάνεια του εδάφους (Σχήμα Κ.1). Η απόσταση  $\Delta z$  λαμβάνεται ίση με  $0,2m$  όσο και η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι. Επομένως η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται για αποστάσεις από το σημείο εισπίεσης (βρίσκεται  $2,4m$  από την επιφάνεια του εδάφους) από  $z=-1,6m$  (άνωτερο σημείο) έως  $z=2,6m$  (κατώτερο σημείο), όπως φαίνεται στο Σχήμα Κ.1 με βάση τον άξονα  $z$  της αναλυτικής εξίσωσης.

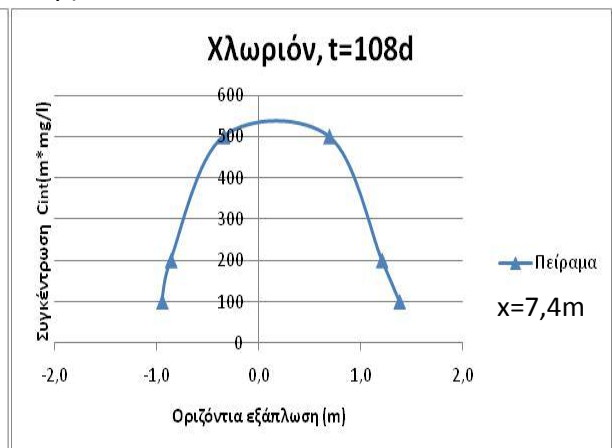
Σε σχέση με την προηγούμενη ενότητα, η διαφορά στις συγκρινόμενες ποσότητες είναι ότι εδώ συγκρίνονται τα ολοκληρώματα της κατανομής συγκεντρώσεων, με μονάδες (μήκος) $\times$ (συγκέντρωση), ενώ στην Ενότητα 3.1.2.2 συγκρίνονται μέσες συγκεντρώσεις. Σημειώνεται ότι εδώ μηδενικές τιμές συγκέντρωσης δεν μειώνουν την  $C_{int}$  σε αντίθεση με την Ενότητα 3.1.2.2, όπου το διάστημα στο οποίο λαμβάνεται η μέση τιμή παραμένει σταθερό. Περαιτέρω λεπτομέρειες δίνονται στα αναλυτικά παράδειγμα υπολογισμού στο Παράρτημα Κ.1

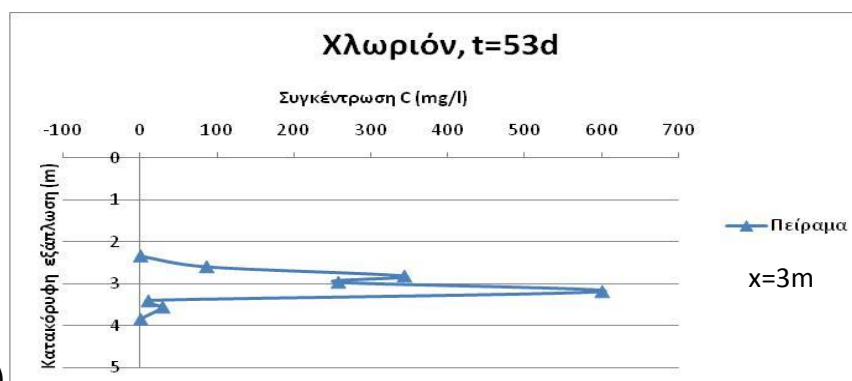
Από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Γ.1, με τομή κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομή Α-Α), προκύπτει η κατανομή συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου, 108 ημέρες μετά την εισπίεση, που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.9α. Στο ίδιο σχήμα, με τομή κάθετη στον άξονα  $x$  (Τομή Β-Β, Σχήμα Γ.1) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, την ίδια χρονική στιγμή, προκύπτει η κατανομή συγκεντρώσεων του Σχήματος 3.9β. Τέλος, στο Σχήμα 3.9γ παρουσιάζεται η κατανομή συγκεντρώσεων ως προς την κατακόρυφη εξάπλωση του χλωριόντος, 53 ημέρες μετά την εισπίεση, στο σημείο του άξονα  $x=3m$ , που προκύπτει από το Σχήμα Γ.2.

α)



β)





γ)

Σχήμα 3.9 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων, τη χρονική στιγμή 108 ημέρες μετά την εισπίεση, ενώ το διάγραμμα (γ) αντιστοιχεί σε κατανομή συγκεντρώσεων σε πηγάδι δειγματοληψίας, 53 ημέρες μετά την εισπίεση

Οι κατανομές συγκέντρωσης του ιόντος χλωρίου από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση συγκρίνονται ως προς, (1) την μέγιστη συγκέντρωση και (2) το εύρος τους, για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης. Σημειώνεται ότι στη σύγκριση δόθηκε μεγαλύτερο βάρος στη σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης σε σχέση με την σύγκλιση των μέγιστων συγκεντρώσεων των κατανομών.

### 3.1.3.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης, χρησιμοποιούνται οι υδρογεωλογικές παράμετροι του Πίνακα 3.1 και η μάζα του ιχνηθέτη (χλωριόν) στο εισπιεσθέν διάλυμα που παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.4. Παράλληλα ο συντελεστής υστέρησης R λαμβάνεται ίσος με 1 και ο ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης λ λαμβάνεται ίσος με  $0 \text{ d}^{-1}$ , καθώς το χλωριόν ως ιχνηθέτης δεν ροφάται ούτε διασπάται. Τέλος ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται ίσος με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$  όπως και για το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1.2.2.2).

Όπως και στην Ενότητα 3.1.2.2.3, αρχικά γίνεται σύγκριση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης με βάση τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις. Εξετάζεται για τον συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και η σχέση των Xu και Eckstein (1995)  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$ . Παράλληλα ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος με 0,1 (Gelhar et al. 1992) και ελέγχονται δύο τιμές του λόγου  $\alpha_z/\alpha_x$ , που είναι ίσες με 0,1 και 0,01 (Gelhar et al. 1992).

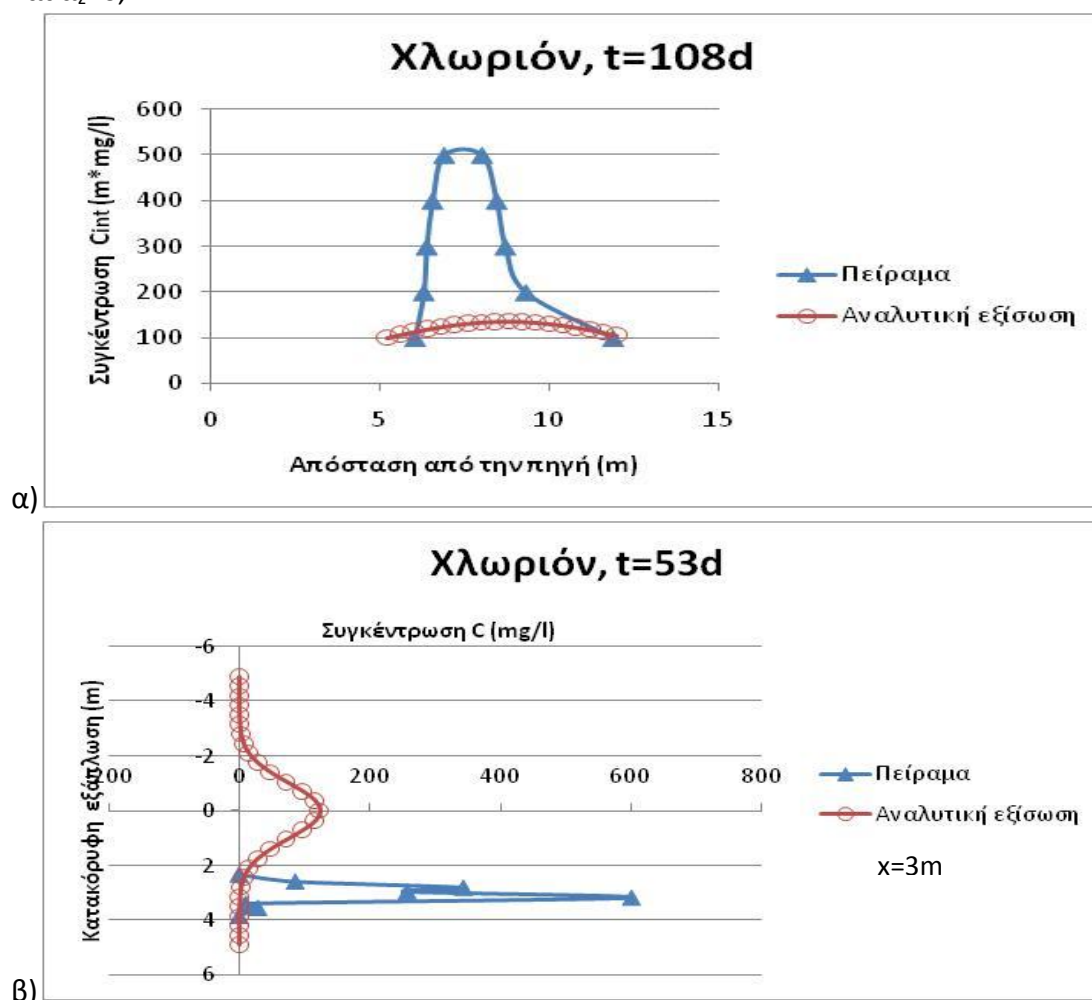
Οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς είναι αυτές για τις οποίες προκύπτει το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και

της αναλυτικής εξίσωσης. Οι τιμές αυτές μπορεί να προκύψουν από τις εμπειρικές σχέσεις είτε από δοκιμές μέχρι την καλύτερη σύγκλιση των κατανομών.

### 3.1.3.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη

α) εμπειρικός κανόνας  $\alpha_x=0,1x$

Στο Σχήμα Γ.1, μετρώντας κατά μήκος του άξονα x παρατηρείται ότι μετά από 108 ημέρες από την εισπίεση, η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση χλωριόντος έχει φτάσει σε απόσταση  $L=12m$ . Ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος με 0,1 (Gelhar et al. 1992) και ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  λαμβάνεται επίσης ίσος με 0,1. Οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από τα παραπάνω είναι:  $\alpha_x=1,2m$ ,  $\alpha_y=0,12m$  και  $\alpha_z=0,12m$ .

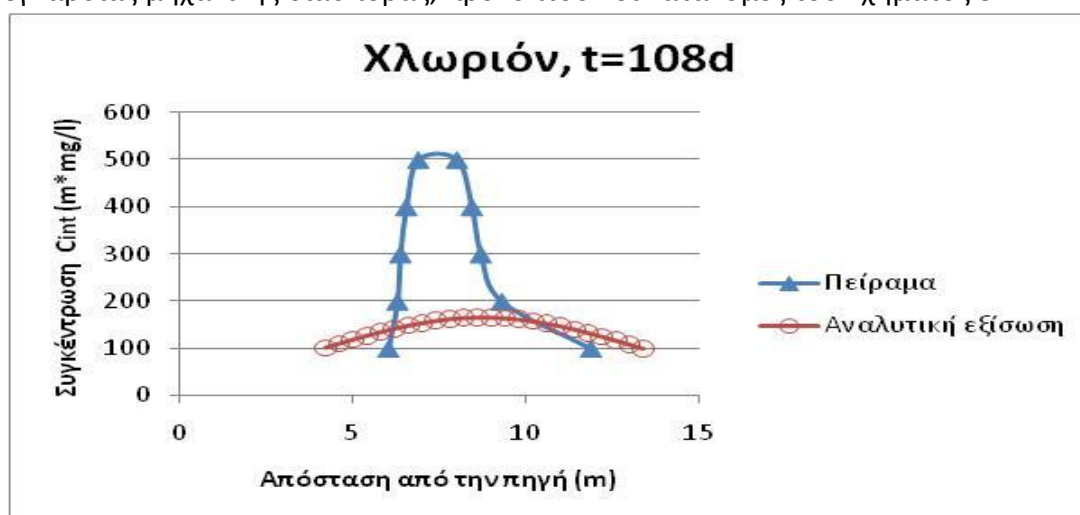


Σχήμα 3.10 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$ , στους άξονες x (α) και z (β). Η κατανομές του διαγράμματος (α) προκύπτουν από ολοκλήρωση ως προς το βάθος

Για τις παραπάνω τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς διαπιστώνεται ότι το εύρος των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης στο Σχήμα 3.10α διαφέρει λιγότερο από 1m. Συγκεκριμένα, το εύρος της κατανομής του

πειράματος είναι ίσο με 5,9m και αντίστοιχα της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 6,8m. Αντίθετα η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής του πειράματος είναι ίση με 500 (mg/l)m και είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή της αναλυτικής εξίσωσης που είναι ίση με 136 (mg/l)m.

Σε αντίθεση με το καλό ταίριασμα των κατανομών του Σχήματος 3.10α, οι κατανομές του Σχήματος 3.10β παρουσιάζουν μεγάλη διαφορά στο εύρος τους. Συγκεκριμένα, το εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 1,52m και της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 9,8m. Σημειώνεται ότι η ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης 0,001mg/l των κατανομών του Σχήματος 3.10β είναι ίση με το όριο ανίχνευσης του χλωριόντος στο υπόγειο νερό, που αναφέρεται από τους Patrick και Barker (1985). Επομένως, για την επίτευξη ίσων τιμών ελάχιστης συγκέντρωσης των κατανομών του Σχήματος 3.10β, το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι μεγαλύτερο από το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού, που είναι ίσο με 4,2m, όπως φαίνεται και από το αναλυτικό παράδειγμα του Παραρτήματος Κ.1. Παράλληλα η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών είναι ίση με 477 (mg/l)m. Επομένως απαιτείται να μειωθεί ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  σε 0,01 και διατηρώντας σταθερές τις τιμές των συντελεστών διαμήκους και οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, προκύπτουν οι κατανομές του Σχήματος 3.11.



Σχήμα 3.11 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2m$ ,  $\alpha_y=0,12m$  και  $\alpha_z=0,012m$

Με τη μείωση του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς διαπιστώνεται ότι το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης αυξήθηκε σε 9,2m (Σχήμα 3.11), αυξάνοντας έτσι τη διαφορά με το εύρος της κατανομής του πειράματος στα 3,3m. Επίσης μικρή αύξηση παρατηρήθηκε στη μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης, η οποία είναι ίση με 167 (mg/l)m. Επομένως, συμπεραίνεται ότι απαιτείται μείωση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς για τη μείωση του εύρους της κατανομής.

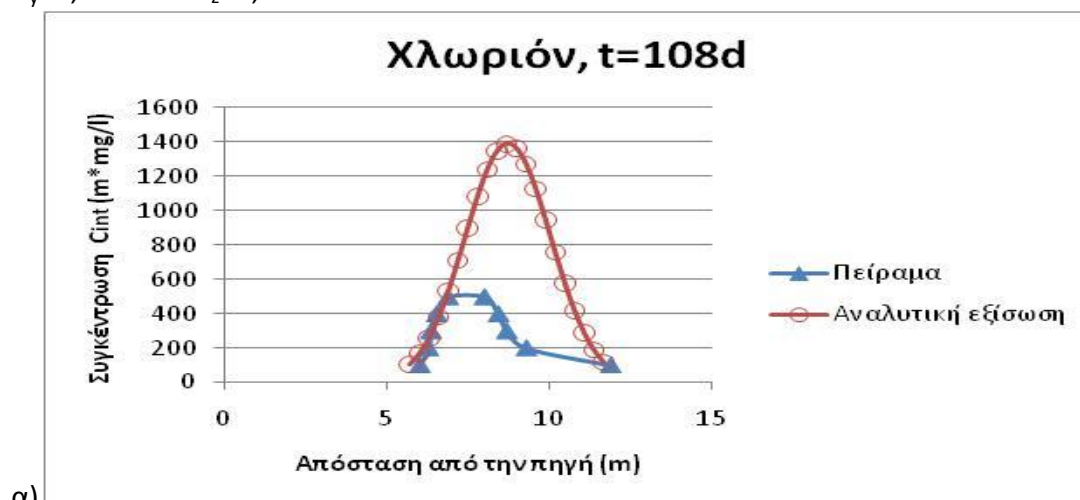


β) εμπειρική σχέση  $X_u$  και Eckstein (1995)

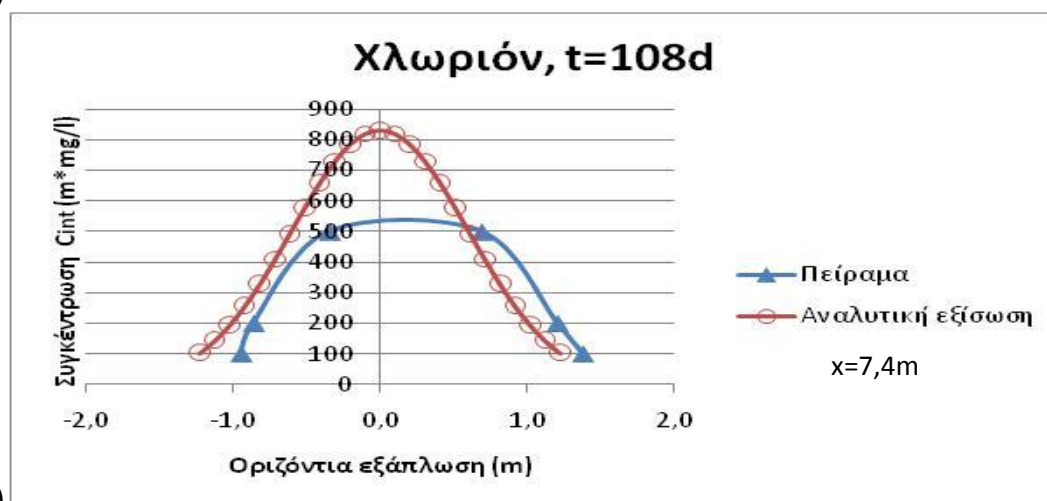
Από την εφαρμογή της εμπειρικής σχέσης υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  (Xu και Eckstein 1995), προκύπτει τιμή ίση με  $\alpha_x=1m$  που έχει μικρή διαφορά από την τιμή που προκύπτει από την εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ .

3.1.3.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Η σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται με την μείωση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς σε  $\alpha_x=0,1$ . Παράλληλα η τιμή του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών είναι ίση με το 1/5 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς. Τέλος διατηρείται σταθερός ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  στο 0,01. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$ .



α)

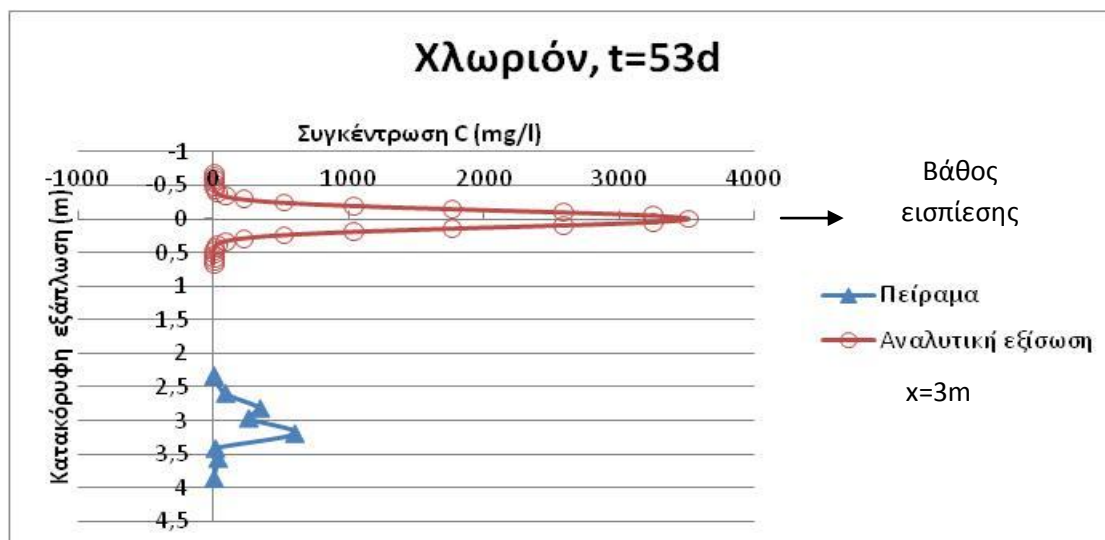


β)

Σχήμα 3.12 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$ , στους άξονες x (α) και y (β)

Για τις παραπάνω τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, οι κατανομές του Σχήματος 3.12α έχουν το καλύτερο ταίριασμα καθώς η διαφορά του εύρους των καμπυλών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 0,1m. Παράλληλα η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης στο ίδιο σχήμα είναι ίση με 1389 (mg/l)m ενώ της κατανομής του πειράματος είναι ίση με 500(mg/l)m. Τέλος στο διάγραμμα της συγκέντρωσης ως προς την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του χλωριόντος (Σχήμα 3.12β) το εύρος της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 2,46m και το αντίστοιχο εύρος της καμπύλης του πειράματος είναι ίσο με 2,5m. Επιτεύχθηκε επομένως και στα δύο σχήματα η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης να είναι μικρότερη από 0,1m. Τέλος, επισημαίνεται ότι υπάρχει μεγάλη διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων στις κατανομές από την αναλυτική εξίσωση στα Σχήματα 3.12α και 3.12β. Η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης, από την οποία προέκυψε η κατανομή του Σχήματος 3.12β, έγινε στο σημείο του άξονα x στο οποίο πραγματοποιήθηκε η Τομή Β-Β (Σχήμα Γ.1, παράρτημα). Αυτή η απόσταση από το σημείο εισπίεσης ( $x=7,4m$ ) δεν αντιστοιχεί στο κέντρο βάρους (σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων) που προκύπτει από την αναλυτική εξίσωση ( $x=v_x t=8,7m$ ).

Στο Σχήμα 3.13 παρατηρείται μικρή διαφορά στο εύρος των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, της τάξεως των 0,18 m. Συγκεκριμένα η κατανομή του πειράματος έχει εύρος 1,52m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος 1,34m. Σε αντίθεση με το καλό ταίριασμα του εύρους των κατανομών του Σχήματος 3.13, η διαφορά της μέγιστης συγκέντρωσης των κατανομών αυτών είναι 2915mg/l. Συγκεκριμένα η κατανομή του πειράματος έχει μέγιστη τιμή συγκέντρωσης ίση με 600mg/l ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει μέγιστη τιμή ίση με 3515mg/l. Επίσης, στο Σχήμα 3.13 είναι φανερό ότι η ρυπασμένη περιοχή του πειράματος παρουσιάζει και κατακόρυφη κίνηση. Αυτή την κατακόρυφη κίνηση δεν μπορεί να προσομοιώσει η αναλυτική εξίσωση αφού θεωρεί μονοδιάστατη μεταγωγή του χλωριόντος κατά μήκος του άξονα x. Τέλος, στο Παράρτημα Κ.1 παρουσιάζεται αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού της συγκέντρωσης που προκύπτει από κατακόρυφη ολοκλήρωση στο σημείο του άξονα x από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.13.



Σχήμα 3.13 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 53 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$

Με τη μέθοδο δοκιμής- λάθους που ακολουθήθηκε παραπάνω προέκυψαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.5. Παρατηρείται ότι οι τιμές του Πίνακα 3.5 είναι μικρότερες από τις τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Πίνακας 3.3). Επομένως, διαπιστώνεται επίδραση της κλίμακας (scale effect) στις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς. Συγκεκριμένα η προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων έγινε όταν η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση χλωριόντος είχε φτάσει σε απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με 52m, ενώ για το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX), η απόσταση από την πηγή της ελάχιστης μετρούμενης συγκέντρωσης χλωριόντος ήταν  $L=12m$ . Αναλυτική συγκριτική συζήτηση για τους συντελεστές μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση θα γίνει στο Κεφάλαιο 6.

Πίνακας 3.5 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν

<u>Παράμετρος</u>	<u>Τιμή</u>
Συντελεστής διαμήκου μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$	0,1
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(m)$	0,02
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(m)$	0,001

## B) Οργανικός ρύπος

### 3.1.3.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο

Η σύγκριση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης θα γίνει και για έναν από τους οργανικούς ρύπους του πειράματος. Από τους οργανικούς ρύπους παρουσιάζονται κατανομές συγκεντρώσεων που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας, για το βενζόλιο και το τολουόλιο (Patrick και Barker 1985, Barker, Patrick και Major 1987) σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπίεση (Σχήμα Γ.1). Από τους παραπάνω οργανικούς ρύπους επιλέχτηκε για την προσομοίωση το βενζόλιο καθώς σύμφωνα με την Αμερικάνικη υπηρεσία περιβάλλοντος (US.EPA) είναι γνωστό καρκινογόνο και η μέγιστη επιτρεπόμενη συγκέντρωσή του στο πόσιμο νερό είναι 0,005mg/l.

Για την προσομοίωση του οργανικού ρύπου ισχύει το ίδιο σύστημα αξόνων που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.3.2.1 για τον ιχνηθέτη. Παράλληλα, οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Γ.1 προκύπτουν από την ολοκλήρωση στην κατακόρυφη διεύθυνση των συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας με την εξίσωση (3.2). Επίσης, για την ολοκλήρωση ως προς το βάθος των συγκεντρώσεων του οργανικού ρύπου που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση, ακολουθήθηκε η ίδια διαδικασία που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.3.2.1. Τέλος, από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Γ.1, με τομή κατά μήκος του άξονα x (Τομή C-C) και τομή κάθετη στον άξονα x (Τομή D-D), προκύπτουν οι κατανομές του πειράματος που θα συγκριθούν με τις αντίστοιχες κατανομές της αναλυτικής εξίσωσης.

### 3.1.3.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)) απαιτείται η μάζα του βενζολίου στο εισπιασθέν διάλυμα (Πίνακας 3.4), οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα (Πίνακας 3.1) και οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.5). Παράλληλα η τιμή του συντελεστή διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται ίση με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

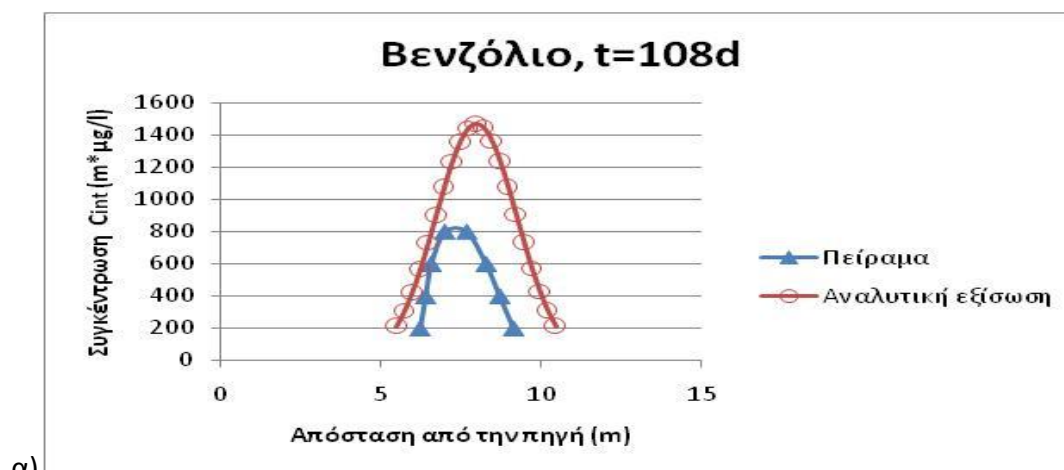
Από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης στο πεδίο προέκυψε ο συντελεστής υστέρησης του βενζολίου ως το πηλίκο της ταχύτητας του κέντρου μάζας της ρυπασμένης περιοχής από χλωριόν (ιχνηθέτης) προς την ταχύτητα του κέντρου μάζας της ρυπασμένης περιοχής από βενζόλιο,  $R = v(\text{χλωρίου})/v(\text{βενζολίου})$ . Ο συντελεστής υστέρησης του βενζολίου που προέκυψε από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης είναι ίσος με 1,1 (Patrick και Barker 1985). Παράλληλα, υπολογίστηκε ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης από τη σχέση  $\log K_p = 0,72 \log K_{ow} + \log f_{oc} + 0,49$  (Schwarzenbach και Westall 1981), όπου  $K_{ow}$  είναι ο συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ νερού και οκτανόλης και  $f_{oc}$  είναι το ποσοστό

οργανικού άνθρακα του εδάφους που είναι ίσο με 0,02%. Η παραπάνω σχέση ισχύει για υδρόφοβους ρύπους με τη θεώρηση γραμμικής ρόφησης και κύριο μηχανισμό της ρόφησης την απορρόφηση από το οργανικό κλάσμα του εδάφους. Έτσι προέκυψε ο συντελεστής υστέρησης  $R=1+\rho_d K_p/n$  του βενζολίου, για ξηρή πυκνότητα  $\rho_d=1,81 \text{ g/cm}^3$  και πορώδες  $n=0,33$ , που είναι ίσος πάλι με 1,1 (Patrick και Barker 1985). Επειδή οι τιμές των συντελεστών υστέρησης που προκύπτουν από την εμπειρική σχέση και το πείραμα είναι ίδιοι, θεωρείται ότι η εμπειρική σχέση Schwarzenbach και Westall (1981) μπορεί να περιγράψει τη ρόφηση του βενζολίου, παρότι το οργανικό κλάσμα του εδάφους είναι μικρότερο από 0,1% (Patrick και Barker 1985). Για την εφαρμογή λοιπόν της αναλυτικής εξίσωσης για το βενζόλιο χρησιμοποιείται συντελεστής υστέρησης  $R=1,1$ .

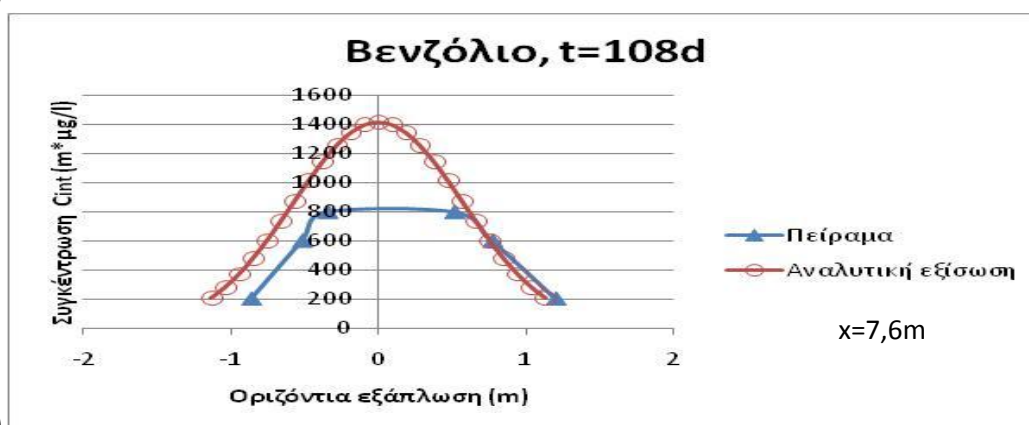
Τόσο τα αποτελέσματα του πειράματος όσο και εργαστηριακές δοκιμές (Barker, Patrick και Major 1987) καταδεικνύουν μείωση της μάζας του βενζολίου που μπορεί να αποδοθεί σε βιομετασχηματισμό υπό αερόβιες συνθήκες. Το βενζόλιο αποδείχτηκε ο πιο επίμονος ρύπος ενώ ο αναερόβιος μετασχηματισμός του είναι αμελητέος στον υδροφορέα του Μπόρντεν (Barker et al. 1987). Το εύρος των ρυθμών μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  του βενζολίου που προκύπτουν από εργαστηριακές δοκιμές και ρυπασμένους χώρους είναι από 0,00 έως  $2,5 \text{ d}^{-1}$  (Suarez και Rifai 1999) για αερόβια αποδόμησή του. Παράλληλα η Αμερικάνικη υπηρεσία περιβάλλοντος εξέδωσε λίστα με τιμές του ρυθμού μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  του βενζολίου υπό αερόβιες συνθήκες, που προέκυψαν από εργαστηριακές δοκιμές σε πυρήνες του υδροφορέα του Μπόρντεν (Aronson et al. 1999). Οι τιμές αυτές κυμαίνονταν μεταξύ 0,006 έως  $0,122 \text{ d}^{-1}$ . Η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης θα γίνει για ρυθμό μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  ίσο με  $0,006 \text{ d}^{-1}$ .

#### *3.1.3.2.7 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς*

Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.5) παρατηρείται ότι το εύρος της κατανομής του πειράματος στο Σχήμα 3.14α είναι ίσο με 2,9m ενώ το αντίστοιχο εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 5m. Παράλληλα στο ίδιο σχήμα διαπιστώνεται ότι η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 1474 ( $\mu\text{g/l}$ )m ενώ του πειράματος είναι ίση με 800 ( $\mu\text{g/l}$ )m. Τέλος στο Σχήμα 3.14β παρατηρείται πολύ μικρή διαφορά στο εύρος των καμπυλών. Συγκεκριμένα το εύρος της καμπύλης του πειράματος είναι 2,1m ενώ το εύρος της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 2,26m.



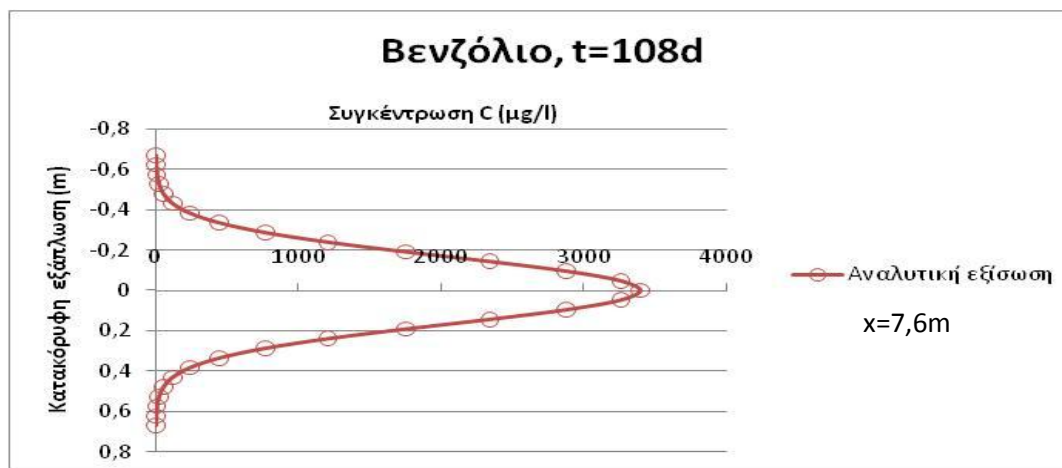
α)



β)

Σχήμα 3.14 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$ , στους άξονες x (α) και y (β)

Στο πείραμα, οι Patrick και Barker (1985) δεν παρουσιάζουν την κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου και έτσι δεν μπορεί να συγκριθεί με τα αποτελέσματα της αναλυτικής εξίσωσης που παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.15. Η αναλυτική εξίσωση εφαρμόστηκε στο ίδιο σημείο του άξονα x από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.14β, τη χρονική στιγμή  $t=108d$ . Το εύρος της κατακόρυφης εξάπλωσης του βενζολίου στο Σχήμα 3.15 είναι 1,34m και η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής είναι ίση με 3400 $\mu g/l$ . Τονίζεται ότι η ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης στην κατανομή είναι ίση με το όριο ανίχνευσης του βενζολίου στο υπόγειο νερό που είναι ίσο με 1 $\mu g/l$  (Patrick και Barker 1985). Στο παράρτημα Κ.2 παρουσιάζεται το παράδειγμα υπολογισμού της συγκέντρωσης  $C_{int}$ , που προκύπτει από ολοκλήρωση των συγκεντρώσεων στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα x, από το οποίο προέκυψε η κατανομή του Σχήματος 3.15.



Σχήμα 3.15 Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα z από την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 108 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$

### 3.1.4 Πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX) και πρόσθετων βενζίνης

Σκοπός του πειράματος αυτού ήταν η μελέτη της μεταφοράς δύο πρόσθετων της βενζίνης στο υπόγειο νερό καθώς και η επιρροή αυτών στην μεταφορά των αρωματικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX). Ο μεθυλο-τριτοταγής-βουτυλαιθέρας (MTBE) και η μεθανόλη προστίθενται στη βενζίνη για την αύξηση του αριθμού οκτανίων και τη μείωση της ατμοσφαιρικής ρύπανσης (αντικατέστησαν το μόλυβδο ως βελτιωτικό βενζίνης). Το πείραμα σχεδιάστηκε για τη σύγκριση της επίδρασης τριών μειγμάτων καυσίμων στην ρύπανση του υπόγειου νερού. Το πρώτο μείγμα αποτελούνταν από 100% βενζίνη, το δεύτερο από 90% βενζίνη και 10% μεθυλο-τριτοταγή-βουτυλαιθέρα (MTBE) και το τρίτο από 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη. Ο κύριος στόχος του πειράματος ήταν η δημιουργία τριών ρυπασμένων περιοχών, ίδιων περίπου διαστάσεων, που θα ταξιδεύουν κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού, χωρίς να καλύπτουν η μία την άλλη. Το πείραμα πραγματοποιήθηκε στον ίδιο δανειοθάλαμο αμμοληψίας με τα προηγούμενα δύο πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν.

#### 3.1.4.1 Περιγραφή πειράματος

Η προετοιμασία των εισπιασθέντων διαλυμάτων έγινε με τη διάλυση αμόλυβδης βενζίνης PS-6 και των προσθέτων σε νερό που αντλήθηκε από τον υδροφορέα. Τα τρία εισπιασθέντα διαλύματα περιείχαν και χλωριόν ως ιχνηθέτη. Οι συγκεντρώσεις και οι μάζες των ουσιών στα εισπιασθέντα διαλύματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.6. Στις 13 Ιουλίου 1988 ξεκίνησε η εισπίεση συνολικά  $8,5m^3$  διαλύματος, περίπου 2835L για κάθε μείγμα βενζίνης, στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα και συνεχίστηκε για 12 ώρες. Η εισπίεση κάθε διαλύματος έγινε από 3 πηγάδια με απόσταση 1m μεταξύ τους και σε κατακόρυφο διάστημα 0,61m (από 2,29 έως 2,90m). Τέλος, οι τριάδες πηγαδιών απείχαν μεταξύ τους 4m.

### Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

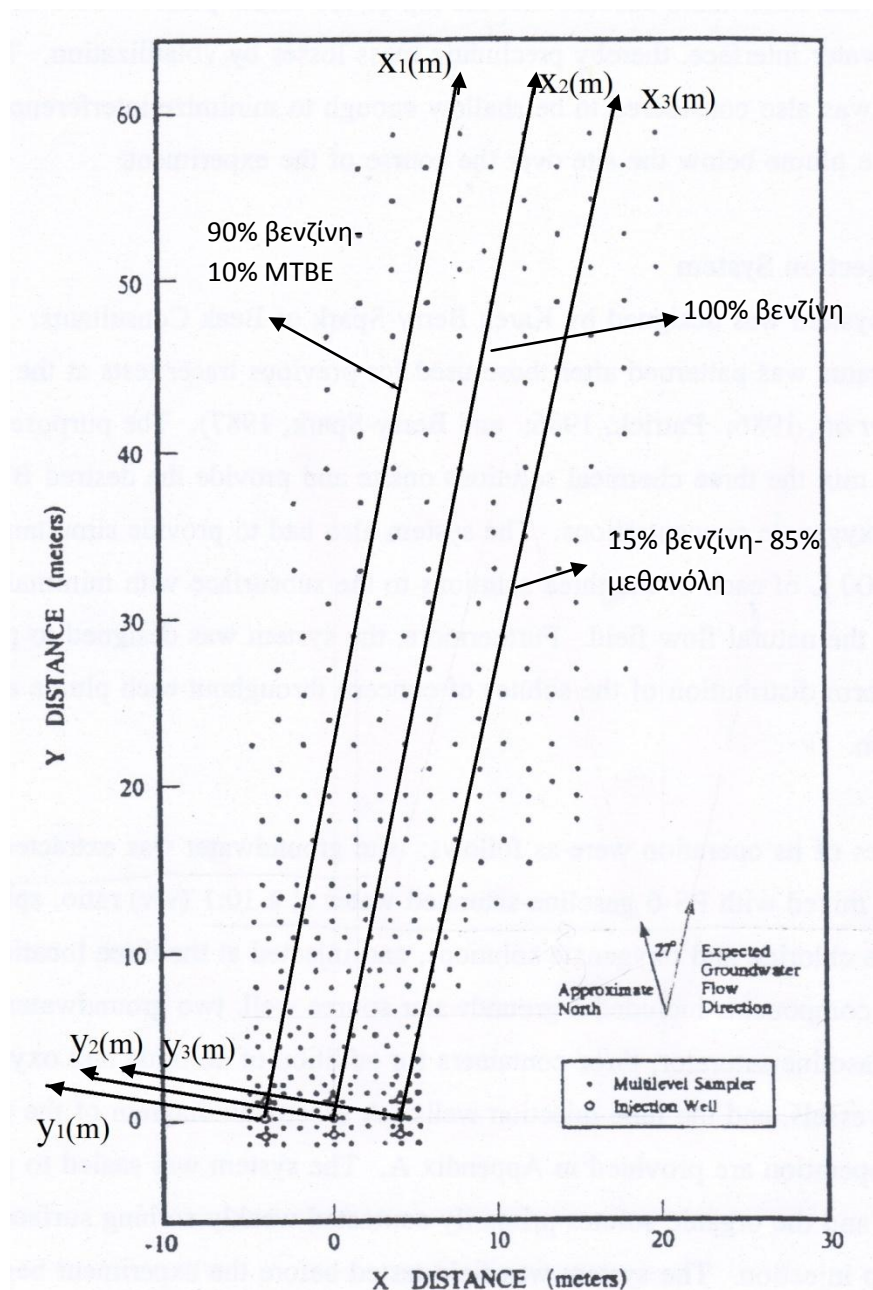
Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω του δικτύου πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) που περιγράφηκε στην ενότητα 3.1.2.1 (Σχήμα 3.1), στο οποίο προστέθηκαν επιπλέον πηγάδια δειγματοληψίας για την καλύτερη παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης. Η κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας και των πηγαδιών εισπίεσης του πειράματος παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.16. Η οριζόντια απόσταση μεταξύ των πηγαδιών δειγματοληψίας κυμαίνονταν μεταξύ 0,25 και 4m και η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των σημείων δειγματοληψίας κυμαίνονταν από 0,2 έως 0,3m. Το συνολικό κατακόρυφο διάστημα στο οποίο πραγματοποιούνταν έλεγχοι δειγματοληψίας κυμαίνονταν μεταξύ 2,8 και 4,2m.

Το πείραμα διήρκεσε 476 ημέρες και ο αριθμός των επεισοδίων δειγματοληψίας που πραγματοποιήθηκαν σε αυτή την περίοδο ήταν 6. Οι συγγραφείς της μελέτης για λογαριασμό του Αμερικάνικου Ινστιτούτου Πετρελαίου (American Petroleum Institute 1994) παρουσιάζουν τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση των συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας (depth integrated concentrations). Παρουσιάζονται οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων και για τα 3 διαλύματα εισπίεσης, του χλωριόντος, του μεθυλο-τριτοταγή-βουτυλαιθέρα (MTBE), της μεθανόλης, του βενζολίου, του τολουολίου και του p- και m-ξυλολίου, σε 4 χρονικές στιγμές, 6, 106, 317 και 476 ημέρες μετά την εισπίεση. Τέλος παρουσιάζονται κατανομές συγκεντρώσεων ως προς το βάθος, για το διάλυμα εισπίεσης που προέκυψε από το μείγμα 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, για τις εξής ουσίες: χλωριόν, μεθανόλη, βενζόλιο, τολουόλιο και p-ξυλόλιο.

**Πίνακας 3.6 Οι εισπιοσθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στα διαλύματα του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν (American Petroleum Institute 1994)**

Διαλυμένες ουσίες	90% βενζίνη PS-6 10% MTBE		100% βενζίνη PS-6		15% βενζίνη PS-6 85% μεθανόλη	
	Εισπιοσθείσα συγκέντρωση (mg/l)	Εισπιοσθείσα μάζα (g)	Εισπιοσθείσα συγκέντρωση (mg/l)	Εισπιοσθείσα μάζα (g)	Εισπιοσθείσα συγκέντρωση (mg/l)	Εισπιοσθείσα μάζα (g)
Ιόν Χλωρίου	515	1200	479	980	577	1500
MTBE	289	670	-	-	-	-
Μεθανόλη	-	-	-	-	7034	18300
Βενζόλιο	7,67	21,8	7,2	20,4	7,73	21,9
Τολουόλιο	5,35	15,2	4,95	14,0	5,16	14,6
Εθυλοβενζόλιο	0,96	2,7	0,8	2,3	0,82	2,3
P-ξυλόλιο	0,96	2,7	0,81	2,3	0,8	2,3
M-ξυλόλιο	2,46	7,0	2,03	5,8	2,08	5,9
O- ξυλόλιο	1,38	3,9	1,18	3,4	1,17	3,3
<b>Σύνολο BTEX</b>	<b>18,43</b>	<b>53,3</b>	<b>16,98</b>	<b>48,2</b>	<b>17,76</b>	<b>50,3</b>





Σχήμα 3.16 Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν (American Petroleum Institute 1994)

### 3.1.4.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Ο στόχος της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος είναι ίδιος με αυτόν των προηγούμενων πειραμάτων που παρουσιάστηκαν στις Ενότητες 3.1.2.2 και 3.1.3.2. Συγκρίνονται οι συγκεντρώσεις του πειράματος με αυτές που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή. Βρίσκονται οι συντελεστές μηχανικής διασποράς για τους οποίους η εξάπλωση του ιχνηθέτη από το πείραμα συμπίπτει με αυτή της αναλυτικής

εξίσωσης και για αυτές τις τιμές συγκρίνονται οι κατανομές των συγκεντρώσεων από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση για δύο οργανικούς ρύπους.

## A) Ιχνηθέτης

### 3.1.4.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.16, επιλέγονται 3 συστήματα αξόνων ( $x, y, z$ ) για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για κάθε ένα από τα εισπιασθέντα διαλύματα. Η αρχή του συστήματος αξόνων ( $x_1, y_1, z_1$ ) για το εισπιασθέν διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=-4, Y=0, Z=-2,6m$ . Αντίστοιχα, η αρχή του συστήματος αξόνων ( $x_2, y_2, z_2$ ) για το εισπιασθέν διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 100% βενζίνη βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=0, Y=0, Z=-2,6m$ . Τέλος, για το εισπιασθέν διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη, η αρχή του συστήματος αξόνων ( $x_3, y_3, z_3$ ) βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=4, Y=0, Z=-2,6m$ . Τονίζεται ότι ο άξονας  $x_i$  συμπίπτει σε κάθε σύστημα αξόνων με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού. Η προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος θα γίνει για το τρίτο εισπιασθέν διάλυμα (85% μεθανόλη και 15% βενζίνη) με τη χρήση του συστήματος αξόνων ( $x_3, y_3, z_3$ ), καθώς για αυτό δίνονται στη μελέτη κατανομές συγκεντρώσεων και ως προς το βάθος.

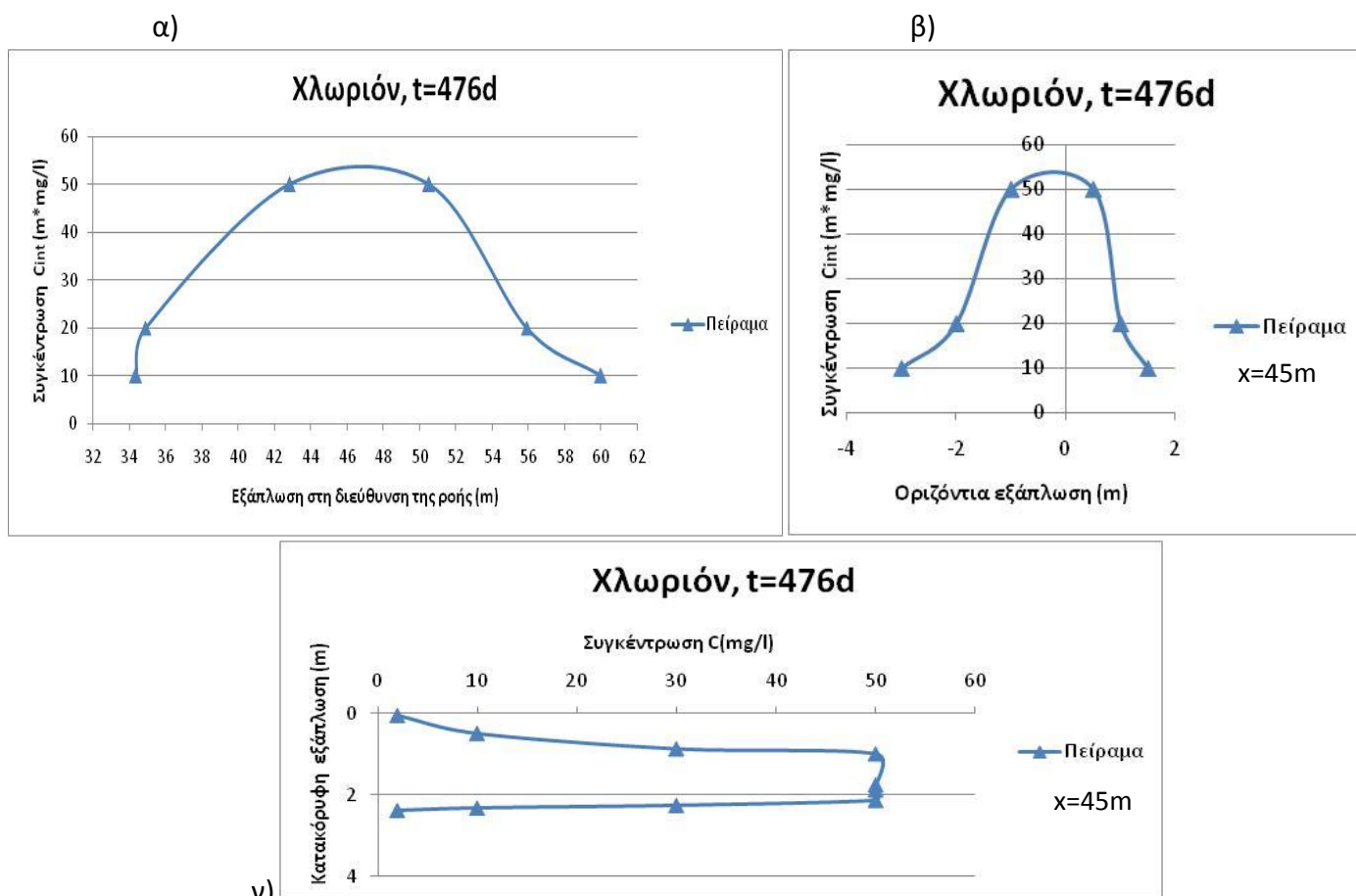
Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων αυτού του πειράματος έχει το εξής πρόβλημα: στη μελέτη (API 1994) παρουσιάζονται σε μονάδες συγκέντρωσης (μάζα/όγκο διαλύματος), ενώ οι συγγραφείς λένε ότι ολοκληρώνουν κατά βάθος (depth integrated concentrations) χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.2). Άρα τα αποτελέσματα θα έπρεπε να δίνονται ως  $C_{int}$ , με μονάδες (μάζα/όγκο)×(μήκος). Ανάλυση του Σχήματος Δ.2 έδειξε ότι τα νούμερα πράγματι αντιστοιχούν στο μέγεθος  $C_{int}$  (λεπτομέρειες δίνονται στο Παράρτημα Δ) και έτσι με αυτήν την υπόθεση έγινε σύγκριση, χρησιμοποιώντας για την ολοκλήρωση της αναλυτικής λύσης την εξίσωση (3.2) όπως εξηγείται λεπτομερώς με παράδειγμα στο Παράρτημα Λ.

Για την ολοκλήρωση των συγκεντρώσεων της αναλυτικής εξίσωσης ως προς το βάθος με την εξίσωση (3.2), η απόσταση  $\Delta_z$  λαμβάνεται ίση με 0,2m όσο και η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι. Παράλληλα το συνολικό κατακόρυφο διάστημα στο οποίο γίνονται δειγματοληψίες λαμβάνεται ίσο με 2,8m όσο και το αντίστοιχο διάστημα στα πηγάδια που παρουσιάζονται στο Σχήμα Δ.2. Επομένως η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται για αποστάσεις από το σημείο εισπίεσης (βρίσκεται 2,6m από την επιφάνεια του εδάφους) από  $z=-1,4m$  (ανώτερο σημείο) έως  $z=1,4m$  (κατώτερο σημείο), με βάση τον άξονα  $z$  της αναλυτικής εξίσωσης (Σχήμα Λ.1).

Στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου του Σχήματος Δ.1, πραγματοποιείται τομή κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομή D-D), τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, από την οποία προκύπτει η κατανομή του Σχήματος

### Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

3.17α. Στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων, πραγματοποιείται τομή κάθετη στον άξονα x (Τομή C-C, Σχήμα Δ.1), στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=45\text{m}$ , από την οποία προκύπτει η κατανομή του Σχήματος 3.17β. Τέλος, από την παράλληλη τομή στον άξονα z του Σχήματος Δ.2 (Τομή A-A), στο σημείο του άξονα  $x=45\text{m}$ , 476 ημέρες μετά την εισπίεση, προκύπτει η κατανομή του Σχήματος 3.17γ.



Σχήμα 3.17 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες y (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις). Τα διαγράμματα (α) και (β) αντιστοιχούν σε κατανομές ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων

Οι κατανομές συγκέντρωσης του πειράματος που προκύπτουν από τις παραπάνω τομές συγκρίνονται με τις αντίστοιχες της αναλυτικής εξίσωσης ως προς την μέγιστη συγκέντρωση και το εύρος τους, όπως έγινε και για τα προηγούμενα πειράματα στο Μπόρντεν (Ενότητες 3.1.2.2 και 3.1.3.2). Η σύγκριση της έκτασης της ρύπανσης γίνεται για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης.

#### 3.1.4.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)) θα χρησιμοποιηθεί η ταχύτητα μεταγωγής του Πίνακα 3.1 και η μάζα του ιόντος χλωρίου στο εισπιασθέν διάλυμα που προκύπτει

από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη του Πίνακα 3.6. Επίσης, επειδή το χλώριο δεν ροφάται ούτε διασπάται (ιχνηθέτης), ο συντελεστής υστέρησης R λαμβάνεται ίσος με το 1 και ο ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης λ λαμβάνεται ίσος με το 0 d<sup>-1</sup>. Τέλος όπως και για τα προηγούμενα πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν (Ενότητες 3.1.2.2.2 και 3.1.3.2.2), ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος D<sub>e</sub> λαμβάνεται ίσος με 0,6×10<sup>-4</sup> m<sup>2</sup>/d.

Σημειώνεται ότι για αυτό το πείραμα μεταφοράς στο Μπόρντεν δεν θα γίνει υπολογισμός της τιμής του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς από την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και την σχέση  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  των Xu και Eckstein (1995). Από το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1.2.2.3), οι τιμές των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_x$  που προέκυψαν από κλίμακα L=52m, 462 ημέρες από την εισπίεση, δεν κατάφεραν να προσομοιώσουν επαρκώς την διαμήκη εξάπλωση (της τάξεως των 22m) του ιόντος χλωρίου από το πείραμα. Αντίστοιχα στο πείραμα που προσομοιώνεται στην ενότητα αυτή, μετά από 476 ημέρες από την εισπίεση, η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση χλωριόντος έχει φτάσει σε απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με 60m και η διαμήκης εξάπλωση του είναι ίση με 26m, επομένως θα αναζητηθούν κατ'ευθείαν τιμές του  $\alpha_x$  μικρότερες του 1m, για τη σύγκλιση της διαμήκους εξάπλωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης.

Επομένως, οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς θα αναζητηθούν με δοκιμές για το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης.

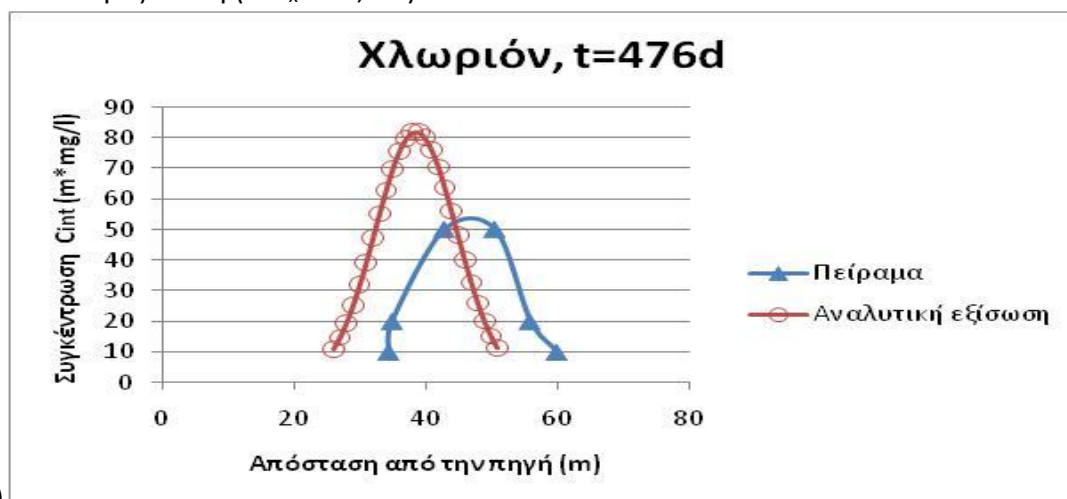
#### *3.1.4.2.3 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη*

Το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται για τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς ίση με  $\alpha_x=0,5m$ . Παράλληλα η τιμή του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών είναι ίση με το 1/20 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, δηλαδή για τιμή ίση με  $\alpha_y=0,025m$ . Τέλος η τιμή του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται η σύγκλιση των κατανομών είναι ίση με το 1/100 του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, δηλαδή για τιμή ίση με  $\alpha_z=0,0025m$ .

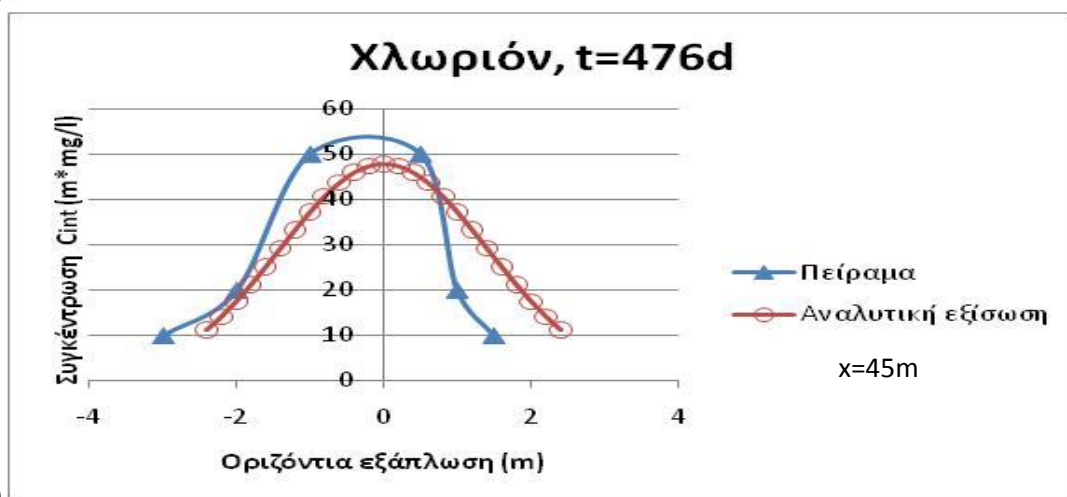
Για τις παραπάνω τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, οι κατανομές του Σχήματος 3.18 έχουν το καλύτερο ταίριασμα, καθώς η διαφορά του εύρους των καμπυλών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι και στα δύο σχήματα μικρότερη από 1m. Συγκεκριμένα, στο Σχήμα 3.16α το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 25m και το αντίστοιχο εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 26m. Παράλληλα η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης στο ίδιο σχήμα είναι ίση με 81,9 (mg/l)m και του

### Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

πειράματος είναι ίση με 50 (mg/l)m. Στο διάγραμμα της συγκέντρωσης ως προς την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του χλωριόντος (Σχήμα 3.18β), το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 4,8m και το αντίστοιχο εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 4,5m . Επίσης στο Σχήμα 3.18β, η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 48 (mg/l)m. Επομένως, διαπιστώνεται ότι υπάρχει διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων στις κατανομές από την αναλυτική εξίσωση στα Σχήματα 3.18α και 3.18β. Η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης, από την οποία προέκυψε η κατανομή του Σχήματος 3.18β, έγινε στο σημείο του άξονα x στο οποίο πραγματοποιήθηκε η Τομή C-C (Σχήμα Δ.1). Αυτό το σημείο του άξονα x ( $x=45m$ ) δεν αντιστοιχεί στο κέντρο βάρους (σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων) που προκύπτει από την αναλυτική εξίσωση ( $x=v_x t=38,5m$ ).



α)

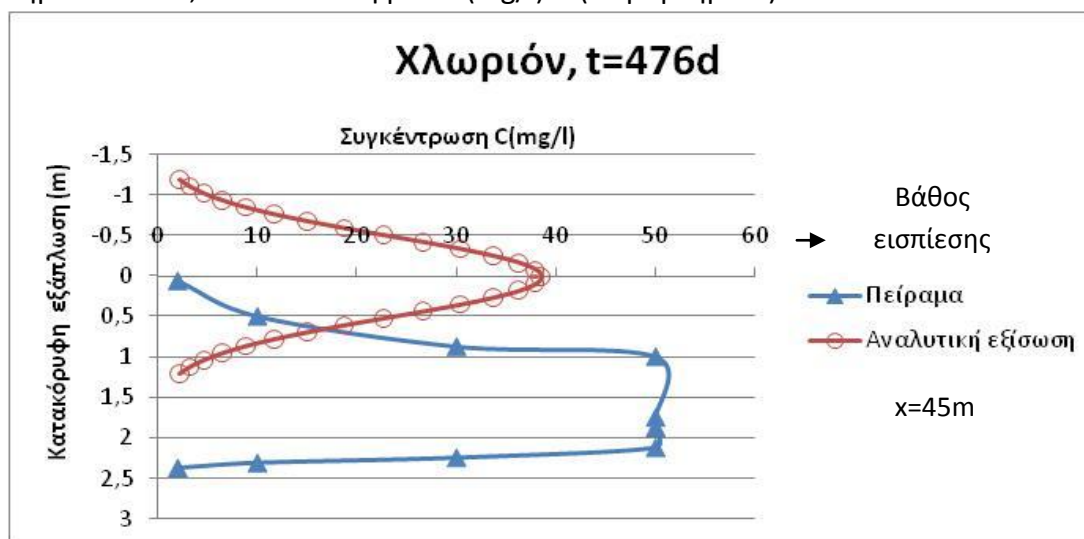


β)

Σχήμα 3.18 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$ , στους άξονες x (α) και y (β)

Τέλος πολύ μικρή διαφορά παρατηρείται στο εύρος των κατανομών κατά τη διεύθυνση του άξονα z (Σχήμα 3.19). Η κατανομή του πειράματος έχει εύρος 2,3m και η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος 2,4m. Στο Σχήμα 3.19 φαίνεται

ότι η ρυπασμένη περιοχή του πειράματος παρουσιάζει και κατακόρυφη κίνηση. Αντίθετα η αναλυτική εξίσωση θεωρεί μονοδιάστατη μεταγωγή κατά τη διεύθυνση του άξονα x και τριδιάστατη διασπορά επομένως το κέντρο μάζας της ρυπασμένης περιοχής παραμένει πάνω στον άξονα x. Η συγκέντρωση  $C_{int}$ , που προκύπτει από ολοκλήρωση ως προς το βάθος, στο σημείο του άξονα  $x=45m$  από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.19 είναι  $C_{int}=48 (mg/l)m$  (Παράρτημα Λ). Η τιμή αυτή συγκρίνεται με την αντίστοιχη τιμή της καμπύλης του πειράματος, στο σημείο  $x=45m$ , που είναι ίση με  $78 (mg/l)m$  (Παράρτημα Δ).



Σχήμα 3.19 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$

Το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, στη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση, επιτυγχάνεται για τους συντελεστές μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.7. Από τη σύγκριση των τιμών του Πίνακα 3.7 με τις αντίστοιχες τιμές του Πίνακα 3.3, που προέκυψαν από προσομοίωση στην ίδια περίπου κλίμακα, συμπεραίνεται ότι ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  στο πείραμα εισπίεσης CHC ήταν 0,2 και μειώθηκε σε 0,05 στο πείραμα εισπίεσης BTEX/Μεθανόλη. Τέλος, διαπιστώνεται ότι η κατακόρυφη εγκάρσια εξάπλωση είναι περίπου ίση στα δύο πειράματα.

Πίνακας 3.7 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν

Παράμετρος	Τιμή
Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$	0,5
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(m)$	0,025
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(m)$	0,0025

## B) Οργανικοί ρύποι

### 3.1.4.2.4 Περιγραφή προσομοίωσης για τους οργανικούς ρύπους

Για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.7, γίνεται σύγκριση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για δύο από τους οργανικούς ρύπους του πειράματος. Οι συγγραφείς της μελέτης για λογαριασμό του Αμερικάνικου Ινστιτούτου Πετρελαίου (American Petroleum Institute 1994) παρουσιάζουν τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων που προκύπτουν από το πείραμα για τους ρύπους που αναφέρθηκαν στην Ενότητα 3.1.4.1. Από αυτούς τους οργανικούς ρύπους επιλέχτηκε για προσομοίωση το βενζόλιο από το ίδιο διάλυμα εισπίεσης με τον ιχνηθέτη (85% μεθανόλη και 15% βενζίνη), καθώς σύμφωνα με την Αμερικάνικη υπηρεσία περιβάλλοντος (US.EPA) είναι γνωστό καρκινογόνο, και ο μεθυλο-τριτοταγής-βουτυλαιθέρας (MTBE). Η επιλογή του MTBE έγινε ώστε να γίνει σύγκριση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης και για ένα δεύτερο διάλυμα (αυτό που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη) από αυτά που εισπιάστηκαν στο πλαίσιο του πειράματος.

Για την προσομοίωση του βενζολίου ισχύει το ίδιο σύστημα αξόνων που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.4.2.1 για τον ιχνηθέτη ( $x_3, y_3, z_3$ ). Παράλληλα για την προσομοίωση του MTBE θα χρησιμοποιηθεί το σύστημα αξόνων ( $x_1, y_1, z_1$ ) του Σχήματος 3.16.

Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων των Σχημάτων Δ.3 και Δ.5 προκύπτουν από την ολοκλήρωση στην κατακόρυφη διεύθυνση των συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας με την εξίσωση (3.2) που παρουσιάστηκε στην Ενότητα 3.1.3.2.1. Επίσης, για την ολοκλήρωση ως προς το βάθος των συγκεντρώσεων των οργανικών ρύπων που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση, ακολουθήθηκε η ίδια διαδικασία που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.1.4.2.1.

Τέλος, από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων των Σχημάτων Δ.3 και Δ.5, με τομές κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομές F-F και H-H) και τομές κάθετες στον άξονα  $x$  (Τομές G-G και I-I), προκύπτουν οι κατανομές του πειράματος του βενζολίου και MTBE αντίστοιχα. Παράλληλα, στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Δ.4, πραγματοποιείται τομή κατά τη διεύθυνση του άξονα  $z$  (Τομή E-E). Από τις παραπάνω τομές προκύπτουν οι κατανομές του πειράματος που συγκρίνονται ως προς το εύρος τους με τις αντίστοιχες κατανομές από την αναλυτική εξίσωση.

### 3.1.4.2.5 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τους οργανικούς ρύπους

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης απαιτείται η μάζα του βενζολίου και μεθυλο-τριτοταγής-βουτυλαιθέρα (MTBE) στο εισπιασθέν διάλυμα (Πίνακας 3.6), οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα (Πίνακας 3.1) και οι τελικές τιμές των

συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.7). Για το βενζόλιο, όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 3.1.4.2.4, λαμβάνεται η μάζα στο εισπνευσθέν διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη. Αντίστοιχα για το MTBE, λαμβάνεται η μάζα στο εισπνευσθέν διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη. Τέλος, η τιμή του συντελεστή διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται, όπως και για την προσομοίωση του ιχνηθέτη, ίση με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

Παράλληλα με την διεξαγωγή του πειράματος πραγματοποιήθηκαν εργαστηριακές δοκιμές για τον καθορισμό των συντελεστών διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p$  για κάθε οργανικό ρύπο. Με την υπόθεση ότι η ρόφηση είναι αντιστρέψιμη, στιγμιαία και μπορεί να περιγραφεί από την γραμμική ισόθερμη βρέθηκαν οι συντελεστές υστέρησης από τις εργαστηριακές δοκιμές ( $R=1+\rho_d K_p/n$ ), για ξηρή πυκνότητα  $\rho_d=1,88 \text{ g/cm}^3$  και πορώδες  $n=0,33$ . Διαπιστώθηκε ότι οι συντελεστές υστέρησης που προέκυψαν από τις εργαστηριακές δοκιμές βρίσκονται εντός των ορίων που προκύπτουν από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης (American Petroleum Institute 1994). Επίσης παρατηρήθηκε ότι τα πρόσθετα της βενζίνης (MTBE και μεθανόλη) κινούνται με την ταχύτητα του υπόγειου νερού (συντελεστής υστέρησης ίσος με  $R=1$ ) και δεν επηρεάζουν σημαντικά την κινητικότητα των αρωματικών ενώσεων του πετρελαίου (BTEX). Επομένως για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης θα χρησιμοποιηθούν οι τιμές των συντελεστών υστέρησης  $R$  που προέκυψαν από τις εργαστηριακές δοκιμές που για το βενζόλιο είναι ίση με 1,2 και για το MTBE είναι ίση με 1.

Τόσο οι εργαστηριακές μελέτες όσο και τα αποτελέσματα του πειράματος κατέδειξαν αναστολή της βιοαποδόμης του βενζολίου λόγω της παρουσίας μεθανόλης. Η αναστολή αυτή μπορεί να οφείλεται στην έλλειψη οξυγόνου λόγω του αερόβιου μετασχηματισμού της μεθανόλης, στην λειτουργία της ως προτιμώμενης πηγής ενέργειας για τους μικροοργανισμούς και στις βιοχημικές επιδράσεις της στους μικροοργανισμούς. Όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 3.1.3.2.6, οι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης για αερόβια αποδόμηση του βενζολίου που προέκυψαν από εργαστηριακές δοκιμές σε πυρήνες από τον υδροφορέα του Μπόρντεν, κυμαίνονταν μεταξύ  $0,006$  έως  $0,122 \text{ d}^{-1}$  (Aronson et al. 1999). Επομένως, η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το βενζόλιο θα γίνει για ρυθμό μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  ίσο με  $0,006 \text{ d}^{-1}$ .

Από τον υπολογισμό της συνολικής μάζας του μεθυλο-τριτοταγή-βουτυλαιθέρα (MTBE) σε διαφορετικές χρονικές στιγμές κατά τη διάρκεια του πειράματος, διαπιστώθηκε ότι δεν μειώθηκε η μάζα του κατά την διάρκεια των 16 μηνών που διήρκησε το πείραμα. Σημειώνεται βέβαια ότι από δειγματοληψίες που πραγματοποιήθηκαν την περίοδο 1995-1996 (8 χρόνια μετά την έναρξη του πειράματος), διαπιστώθηκε ότι μόνο το 3% της αρχικής μάζας του MTBE παρέμενε στο υπόγειο νερό του υδροφορέα (Schirmer et al. 1998). Αυτή η μείωση της μάζας του MTBE αποδόθηκε σε αποδόμηση, η οποία βέβαια συμβαίνει με πολύ μικρότερους ρυθμούς σε σχέση με τις αρωματικές ενώσεις του πετρελαίου (BTEX).

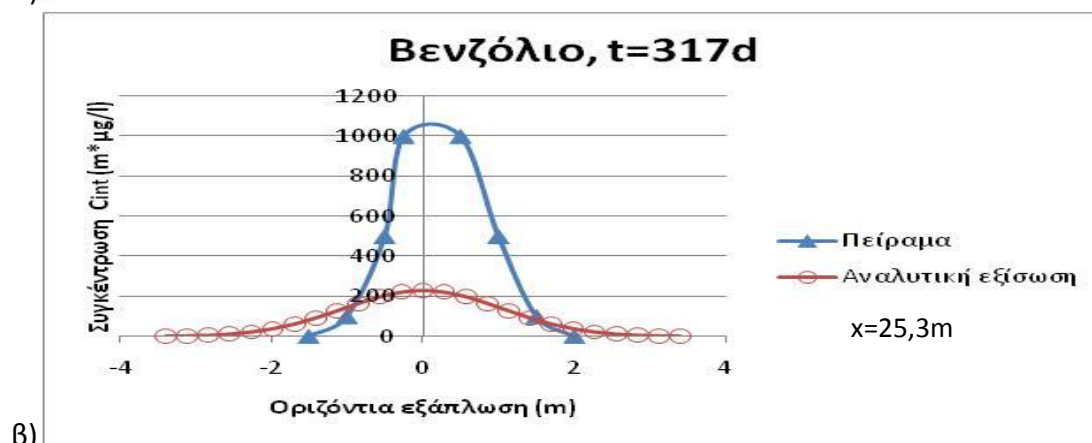
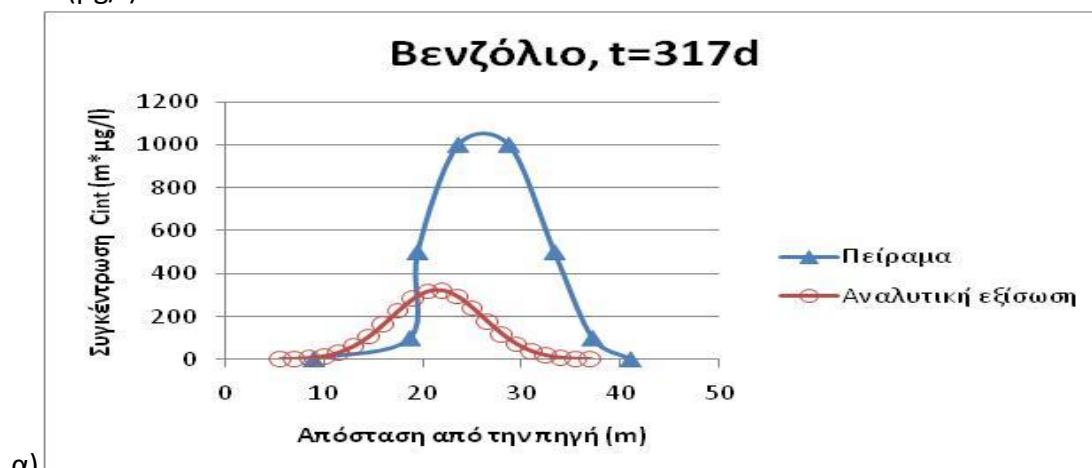


Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το MTBE, θα χρησιμοποιηθεί ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  ίσος με  $0 \text{ d}^{-1}$ .

### 3.1.4.2.6 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς

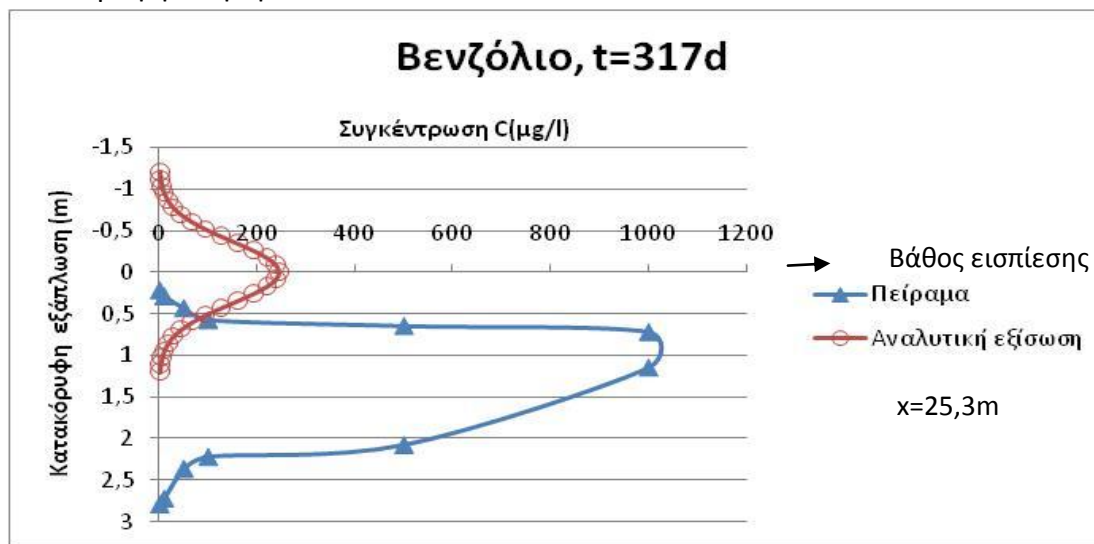
Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.7), παρατηρείται ότι η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης στο Σχήμα 3.20α είναι της τάξεως των 0,5m. Συγκεκριμένα στο Σχήμα 3.20α, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 32m και η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 31,5m. Παράλληλα η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών στο ίδιο σχήμα είναι της τάξεως των 700 ( $\mu\text{g/l}$ )m.

Στο Σχήμα 3.20β, παρατηρείται μεγάλη διαφορά του εύρους των κατανομών, σε αντίθεση με το καλό ταίριασμα του εύρους των κατανομών του Σχήματος 3.20α. Συγκεκριμένα το εύρος της κατανομής του πειράματος είναι 3,5m ενώ το αντίστοιχο εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 6,8m. Μεγάλη διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων παρατηρείται και στο Σχήμα 3.20β, της τάξεως των 800 ( $\mu\text{g/l}$ )m.



Σχήμα 3.20 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,025\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0025\text{m}$ , στους άξονες x (α) και y (β)

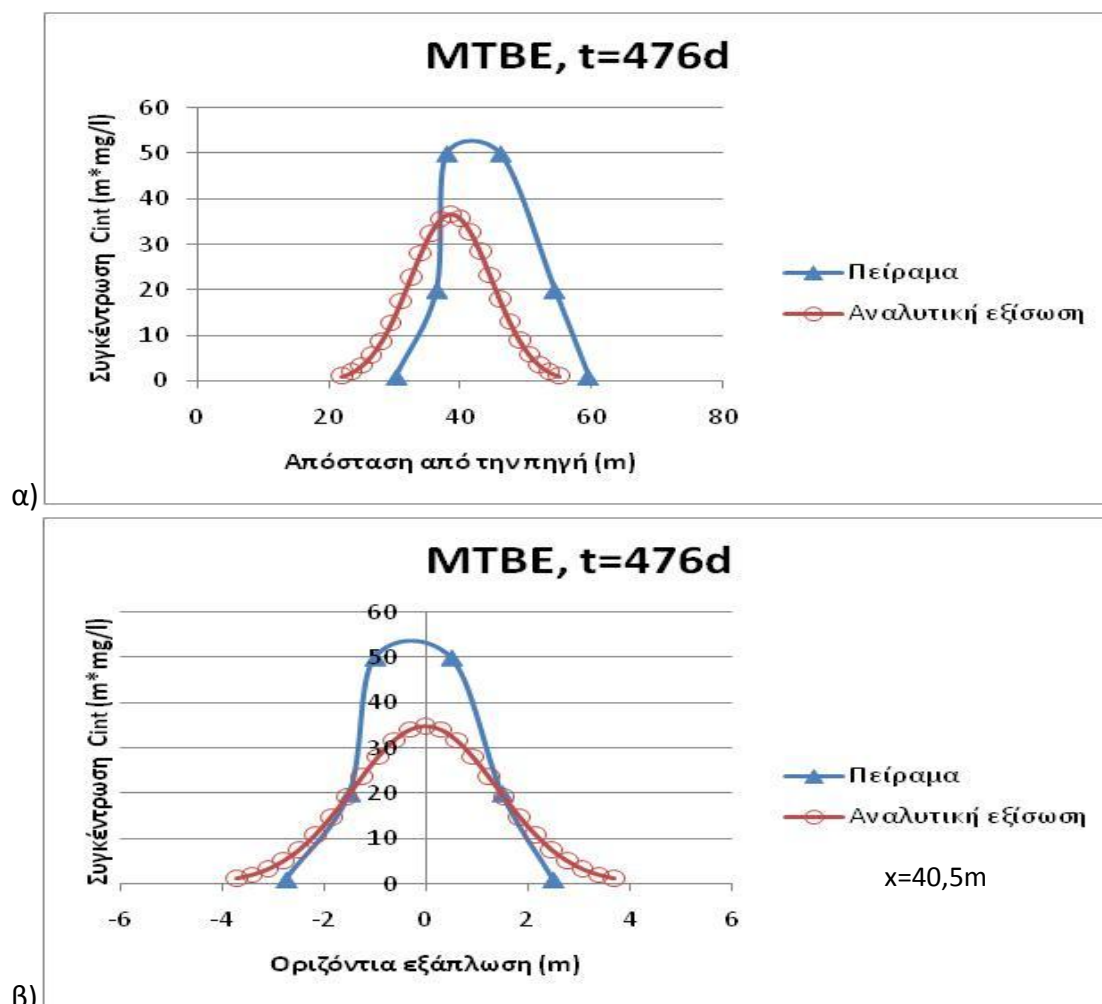
Στην κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου, του Σχήματος 3.21, παρατηρείται ότι οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης συγκρίνονται επαρκώς ως προς το εύρος τους. Συγκεκριμένα, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 2,6m, ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 2,4m. Παράλληλα, η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών είναι ίση με 750 (μg/l)m. Όπως στο Σχήμα 3.19 του ιχνηθέτη, έτσι και η ρυπασμένη περιοχή από βενζόλιο του πειράματος φαίνεται να παρουσιάζει και κατακόρυφη κίνηση.



Σχήμα 3.21 Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 85% μεθανόλη και 15% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$

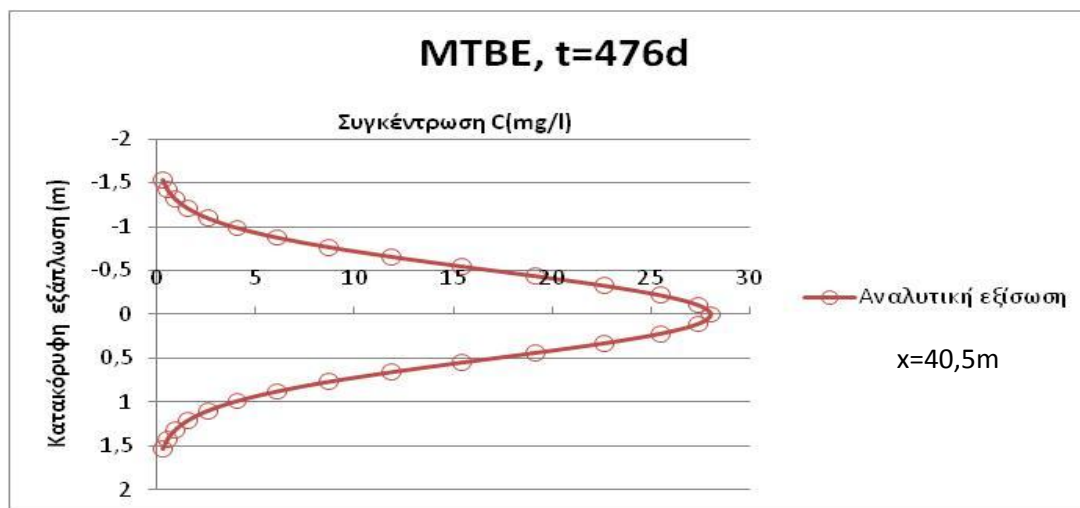
### 3.1.4.2.7 Σύγκριση των κατανομών του MTBE για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς

Εφαρμόστηκε και πάλι η αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή, για τον μεθυλο-τριτοταγή-βουτύλαιθέρα (MTBE) για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.7. Η κατανομή του Σχήματος 3.22α που προέκυψε από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 33m, ενώ η αντίστοιχη κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 30m. Αντίστοιχα η κατανομή του Σχήματος 3.22β που προέκυψε από την αναλυτική εξίσωση έχει εύρος ίσο με 7,4m, ενώ το αντίστοιχο εύρος της κατανομής του πειράματος είναι ίσο με 5,25m. Γενικά οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης (Σχήμα 3.22) ταιριάζουν επαρκώς ως προς το εύρος τους, καθώς η διαφορά τους είναι της τάξεως των 3m. Τέλος μικρή διαφορά, της τάξεως των 13 (mg/l)m παρατηρείται και στις μέγιστες συγκεντρώσεις των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.22.



Σχήμα 3.22 Κατανομές των συγκεντρώσεων (ολοκληρωμένες ως προς το βάθος) του MTBE, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$ , στους άξονες  $x$  ( $\alpha$ ) και  $y$  ( $\beta$ )

Στη μελέτη για λογαριασμό του Αμερικάνικου Ινστιτούτου Πετρελαίου (American Petroleum Institute 1994), οι συγγραφείς δεν παρουσιάζουν κατανομή συγκεντρώσεων του MTBE ως προς το βάθος. Εφαρμόστηκε η αναλυτική εξίσωση στο σημείο του άξονα  $x$  από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.22β. Από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τους συντελεστές μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.7, προέκυψε η κατανομή των συγκεντρώσεων του MTBE ως προς το βάθος (Σχήμα 3.23). Το εύρος της κατακόρυφης εξάπλωσης του MTBE είναι 3,06m και η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής του Σχήματος 3.23 είναι ίση με 28mg/l. Τέλος, τονίζεται ότι η ελάχιστη συγκέντρωση της κατανομής του Σχήματος 3.23 είναι ίση με το όριο ανίχνευσης του MTBE στο υπόγειο νερό, που είναι ίσο με 0,25mg/l (American Petroleum Institute 1994).



Σχήμα 3.23 Κατανομή των συγκεντρώσεων του MTBE κατά τη διεύθυνση του άξονα z από την αναλυτική εξίσωση, για το διάλυμα που προκύπτει από το μείγμα 10% MTBE και 90% βενζίνη και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$

### 3.2 Πείραμα μεταφοράς στο Κέιπ Κοντ, Μασαχουσέτη, ΗΠΑ

Το πείραμα μεταφοράς διεξήχθη σε υδροφορέα που υπόκειται ανενεργού δανειοθαλάμου χαλικιών και άμμου, κοντά στην αεροπορική βάση του Ότις, στο δυτικό Κέιπ Κοντ. Ο υδροφορέας είναι σχετικά ομοιογενής και η διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας ( $\sigma^2 \ln K$ ) είναι ίση με 0,24 (Hess et al. 1992), όταν η υδραυλική αγωγιμότητα  $K$  έχει μονάδες cm/s. Από τα επεξεργασμένα απόβλητα της αεροπορικής βάσης του Ότις, σχηματίστηκε ρυπασμένη περιοχή η οποία υπόκειται του χώρου διεξαγωγής του πειράματος. Η ρυπασμένη περιοχή έχει πάχος 23m, μήκος μεγαλύτερο από 3km και περιλαμβάνει αυξημένες συγκεντρώσεις οργανικών και ανόργανων ρύπων. Μερικοί από τους ανόργανους ρύπους της ρυπασμένης περιοχής είναι το βόριο, το χλωρίο, το νάτριο, ο φώσφορος, η αμμωνία και τα νιτρικά (LeBlanc 1984a). Το πείραμα μεταφοράς διεξήχθη τόσο στη μη ρυπασμένη ζώνη του υδροφορέα πάνω από τη ρυπασμένη περιοχή όσο και στη ρυπασμένη περιοχή.

#### 3.2.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα

Ο υδροφορέας έχει πάχος 100m και υπέρκειται αδιαπέρατου, κρυσταλλικού βραχώδους υποβάθρου. Τα ανώτερα 30m του υδροφορέα αποτελούνται από περατά στρώματα άμμου και χαλικιών και τα κατώτερα 70m αποτελούνται από λεπτόκοκκη άμμο και άργιλο. Το πείραμα μεταφοράς διεξήχθη στα ανώτερα 30m του υδροφορέα. Το πορώδες και η ξηρή πυκνότητα του εδάφους υπολογίστηκαν από μικρής κλίμακας πειράματα μεταφοράς στον υδροφορέα και ο αριθμητικός μέσος των τιμών που προέκυψαν είναι ίσος με 0,39 και 1,70 g/cm<sup>3</sup> αντίστοιχα (LeBlanc et al. 1991, Garabedian et al. 1988).

Στο χώρο διεξαγωγής του πειράματος, ο υδροφόρος ορίζοντας βρίσκεται 3 έως 7m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και παρουσιάζει διακυμάνσεις στη διάρκεια

του έτους της τάξεως του 1m. Κατά τους 17 μήνες διεξαγωγής του πειράματος (Ιούλιος 1985-Δεκέμβριος 1986), οι διακυμάνσεις του υδροφόρου ορίζοντα ήταν μόλις 0,3m και η υδραυλική κλίση κυμαίνονταν μεταξύ 0,0014 και 0,0018 (LeBlanc et al. 1991). Η μέση τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας στο τμήμα του υδροφορέα που αποτελείται από άμμο και χαλίκια είναι 110m/d (LeBlanc et al. 1991). Η τιμή αυτή προέκυψε από την άντληση υδροφορέων με σύστημα γεωτρήσεων, περίπου 2,2km νότια του χώρου διεξαγωγής του πειράματος (Garabedian et al.1988). Από την ίδια δοκιμή προέκυψε ότι ο λόγος της οριζόντιας προς την κατακόρυφη υδραυλική αγωγιμότητα κυμαίνεται μεταξύ 2 και 5.

Τα παραπάνω γεωλογικά και υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα συνοψίζονται στον Πίνακα 3.8, όπου παρουσιάζονται οι εδαφικές παράμετροι για την προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος με την εφαρμογή αναλυτικής εξίσωσης.

**Πίνακας 3.8 Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Κέιπ Κοντ**

<u>Παράμετρος:</u>	<u>Τιμή</u>
Ξηρή πυκνότητα του εδάφους $\rho_d$ (g/cm <sup>3</sup> )	1,70 (2)
Πορώδες n	0,39 (1)
Υδραυλική κλίση i	0,0016 (1)
Υδραυλική αγωγιμότητα K (m/d)	110 (1)
Ταχύτητα μεταγωγής (m/d) $v_x=Ki/n$	0,45

Πηγές: (1) LeBlanc et al. 1991

(2) Garabedian et al. 1988

### 3.2.2 Πείραμα εισπίεσης ανόργανων ρύπων

Το πείραμα μεταφοράς στο Κέιπ Κοντ ξεκίνησε στις 18 Ιουλίου 1985 με την εισπίεση 7,6m<sup>3</sup> διαλύματος στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα. Ο κύριος στόχος του πειράματος ήταν η συλλογή αποτελεσμάτων για τον έλεγχο της εφαρμογής σε φυσικούς υδροφορείς των στοχαστικών θεωριών μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Το εισπιασθέν διάλυμα αποτελούνταν από ιχνηθέτη που δεν ροφάται ούτε διασπάται και από ανόργανους ρύπους που αναμένονταν να ροφηθούν και να παρουσιάσουν υστέρηση σε σχέση με τον ιχνηθέτη. Ο δεύτερος στόχος του πειράματος ήταν η σύγκριση της κινητικότητας των ρύπων του εισπιασθέντος διαλύματος από το πείραμα με αυτήν που προκύπτει από θεωρητικά μοντέλα και εργαστηριακές δοκιμές. Όπως και στα πειράματα στο Μπόρντεν, η παρακολούθηση της μεταγωγής και διασποράς των ρύπων του εισπιασθέντος

διαλύματος στο υπόγειο νερό του υδροφορέα έγινε από πυκνό δίκτυο πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling- MLS).

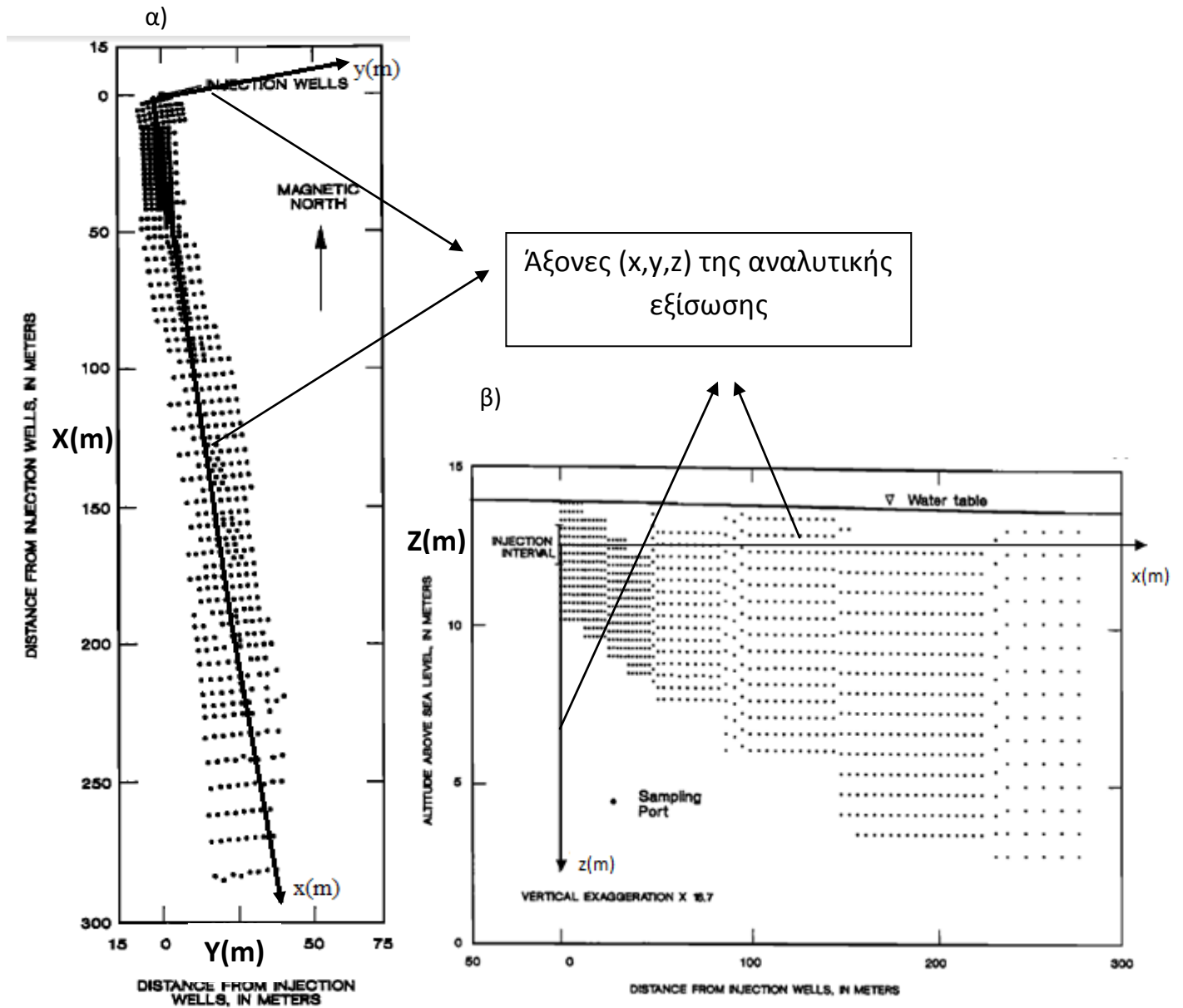
### 3.2.2.1 Περιγραφή πειράματος

Τα συστατικά του εισπνευσθέντος διαλύματος ήταν μη τοξικά σε μικρές συγκεντρώσεις και οι φυσικές συγκεντρώσεις τους στον υδροφορέα ήταν μικρές (Πίνακας 3.9). Ως ιχνηθέτης του πειράματος επιλέχτηκε το ιόν βρωμίου ( $\text{Br}^-$ ), καθώς το χλωριόν παρουσιάζονταν σε μεγάλες συγκεντρώσεις στον υδροφορέα. Επιπλέον επιλέχτηκαν το λίθιο ( $\text{Li}^+$ ), το διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιο ή μολυβδαινικό ιόν (molybdate-  $\text{MoO}_4^{2-}$ ) και το ιόν φθορίου ( $\text{F}^-$ ). Οι παραπάνω ουσίες προστέθηκαν ως άλατα λιθίου ( $\text{LiBr}$ ,  $\text{LiF}$  και  $\text{Li}_2\text{MoO}_4$ ) σε  $7,6\text{m}^3$  νερού που αντλήθηκε από τη μη ρυπασμένη περιοχή του υδροφορέα. Οι αρχικές συγκεντρώσεις και μάζες των παραπάνω ανόργανων ρύπων στο εισπνευσθέν διάλυμα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.9. Η εισπνοή έγινε από 3 πηγάδια σε κατακόρυφο διάστημα από 1,2 έως 2,4m κάτω από τον υδροφόρο ορίζοντα (υψόμετρο πάνω από την επιφάνεια της θάλασσας μεταξύ 11,9 και 13,1m, Σχήμα 3.24β) και διήρκεσε 17 ώρες. Τα πηγάδια βρίσκονταν πάνω σε γραμμή κάθετη στην κατεύθυνση της υπόγειας ροής και είχαν απόσταση μεταξύ τους ίση με 0,9m.

**Πίνακας 3.9 Οι εισπνευσθείσες ουσίες, οι συγκεντρώσεις υποβάθρου (πριν τη δοκιμή) και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του πειράματος στο Κέιπ Κοντ (LeBlanc et al. 1991)**

Διαλυμένες ουσίες	Εισπνεθείσα συγκέντρωση (mg/l)	Εισπνεθείσα μάζα g	Συγκέντρωση υποβάθρου (background concentration) (mg/l)
Ιόν Βρωμίου	640	4900	<0,1
Λίθιο	78	590	<0,01
Μολυβδαινικό ιόν	80	610	<0,02
Ιόν φθορίου	50	380	<0,2

Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε από δίκτυο 656 πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.24. Η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ κάθε σημείου δειγματοληψίας στο πηγάδι κυμαίνονταν από 0,254 έως 0,762m. Το δίκτυο δειγματοληψίας κάλυπτε μία περιοχή πλάτους από 12 έως 22m και μήκους ίσο με 282m. Το συνολικό κατακόρυφο διάστημα στο οποίο γίνονταν δειγματοληψίες κυμαίνονταν από 3,6m έως 10,7m (Σχήμα 3.24β).



Σχήμα 3.24 Κάτοψη (α) και τομή (β) κατά την κατεύθυνση της υπόγειας ροής του δικτύου δειγματοληψίας στο Κέιπ Κοντ (LeBlanc et al. 1991)

Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης διήρκησε 17 μήνες, στους οποίους πραγματοποιούνταν επεισόδια δειγματοληψίας σχεδόν κάθε μήνα, ξεκινώντας από τη χρονική στιγμή των 13 ημερών μετά την εισπίεση. Συνολικά διενεργήθηκαν 19 επεισόδια δειγματοληψίας από τα οποία προέκυψαν οι κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων για κάθε ρύπο. Οι LeBlanc et al. (1991) παρουσιάζουν τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων που προκύπτουν από τη μέγιστη συγκέντρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας για το βρωμίδιο, το λίθιο ( $\text{Li}^+$ ) και το διοξίδο(διοξο)-μολυβδαίνιο ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ). Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου που παρουσιάζονται αντιστοιχούν στις χρονικές στιγμές 33, 237 και 461 ημέρες μετά την εισπίεση. Αντίστοιχα για το λίθιο και διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιο, οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν στις χρονικές στιγμές 33 και 461 ημέρες μετά την

εισπίεση. Ως μέγιστη συγκέντρωση, οι LeBlanc et al. (1991) ορίζουν τη μέγιστη συγκέντρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας (MLS) ανεξάρτητα από το βάθος από το οποίο προέκυψε. Παράλληλα παρουσιάζονται οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος ως προς το βάθος, κατά μήκος του διαμήκη άξονα, σε 3 διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπίεση (33, 237 και 461 ημέρες).

### 3.2.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Η διαδικασία προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος είναι όμοια με αυτή που εφαρμόστηκε για τα πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1). Οι μέγιστες συγκεντρώσεις από το πείραμα συγκρίνονται με τις μέγιστες συγκεντρώσεις που υπολογίζονται από την αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)). Αρχικά η σύγκριση των συγκεντρώσεων γίνεται για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις (την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και την σχέση των Xu και Eckstein (1995)). Στόχος της προσομοίωσης είναι η εύρεση των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες η οριζόντια και κατακόρυφη εξάπλωση του ιχνηθέτη (βρωμιόν) από το πείραμα συμπίπτει κατά το δυνατόν με τα αποτελέσματα της αναλυτικής εξίσωσης. Τέλος, για έναν από τους ανόργανους ρύπους του πειράματος που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση, συγκρίνονται οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση του ιχνηθέτη.

#### A) Ιχνηθέτης

##### 3.2.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης επιλέγεται το σύστημα αξόνων ( $x, y, z$ ) που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.24. Ο άξονας  $x$  ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού που παρουσιάζεται στο Σχήμα E.1 του παραρτήματος. Η αρχή του συστήματος αξόνων που αντιστοιχεί στο σημείο εισπίεσης βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=0, Y=0, Z=12,5m$ , όπου η συντεταγμένη  $Z$  αντιστοιχεί στο μέσο όρο του διαστήματος εισπίεσης του Σχήματος 3.24β.

Από το πείραμα προκύπτουν οι κατανομές μεγίστων συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου που παρουσιάζονται στο Σχήμα E.1 του παραρτήματος. Όπως προαναφέρθηκε, οι LeBlanc et al. (1991) ορίζουν ότι οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων προέκυψαν από τη μέγιστη συγκέντρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας (MLS) ανεξάρτητα από το βάθος από το οποίο προήλθε.

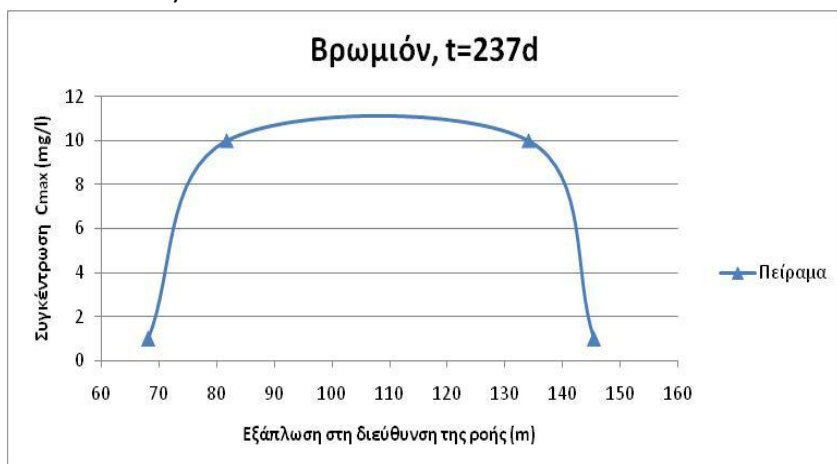
Η αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή, όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1, θεωρεί μονοδιάστατη μεταγωγή του διαλυμένου ρύπου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$  και τριδιάστατη διασπορά του. Επομένως οι μέγιστες συγκεντρώσεις  $C_{max}$  από την αναλυτική εξίσωση εμφανίζονται πάνω στον



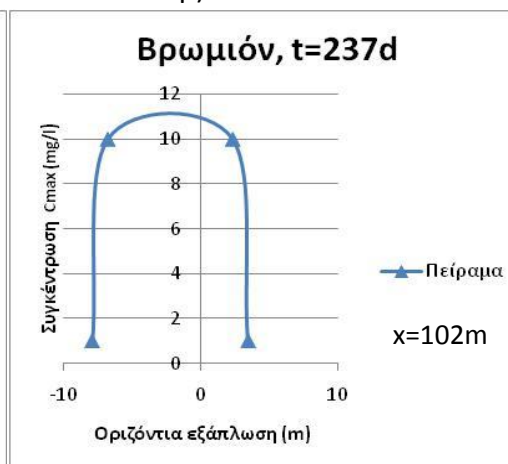
άξονα  $x$ , δηλαδή για μηδενική κατακόρυφη απόσταση από το σημείο εισπίεσης ( $z=0m$ ).

Οι κατανομές συγκεντρώσεων του βρωμιόντος κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, συγκρίνονται ως προς το εύρος και την μέγιστη τιμή συγκέντρωσής τους. Η σύγκριση του εύρους των κατανομών γίνεται για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης. Από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Ε.1, κάνοντας τομή κατά μήκος του άξονα  $x$  (Τομή Α-Α) τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση, προκύπτει η κατανομή των συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου του Σχήματος 3.25α. Αντίστοιχα από την Τομή Β-Β (Σχήμα Ε.1) στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων, στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=102m$ , προκύπτει η κατανομή συγκεντρώσεων του Σχήματος 3.25β. Τέλος, πραγματοποιήθηκε τομή στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Ε.2, παράλληλη στον άξονα  $z$  (Τομή Ε-Ε), στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας. Από την παραπάνω τομή προκύπτει η κατανομή των συγκεντρώσεων ως προς την κατακόρυφη εξάπλωση του βρωμιόντος τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση (Σχήμα 3.25γ).

α)



β)



γ)

Σχήμα 3.25 Κατανομές των συγκεντρώσεων του βρωμιόντος από το πείραμα τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα  $x$  (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες  $y$  (β) και  $z$  (γ). Τα διαγράμματα (α) και (β) προκύπτουν από τις μέγιστες συγκεντρώσεις από κάθε πηγάδι δειγματοληψίας

### 3.2.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται για τις υδρογεωλογικές παραμέτρους του Πίνακα 3.8. Παράλληλα χρησιμοποιείται η μάζα του ιόντος βρωμίου στο εισπιασθέν διάλυμα (Πίνακας 3.9), λαμβάνεται συντελεστής υστέρησης ίσος με  $R=1$  και ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης ίσος με  $\lambda=0 \text{ d}^{-1}$ . Τέλος, ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος λαμβάνεται ίσος με  $D_e=0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ , όπως και για τα πειράματα στο Μπόρντεν.

Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με εμπειρικές σχέσεις. Χρησιμοποιήθηκε η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  καθώς και η σχέση  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  των Xu και Eckstein (1995). Οι τιμές των λόγων  $\alpha_y/\alpha_x$  και  $\alpha_z/\alpha_x$  που ελέχθησαν ήταν ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στα πειράματα στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1). Τέλος, αναζητήθηκαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες το εύρος των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είχε το καλύτερο ταίριασμα. Οι τιμές αυτές μπορεί να προκύψουν είτε από τις εμπειρικές σχέσεις είτε με δοκιμές.

### 3.2.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για τον ιχνηθέτη

#### α) εμπειρικός κανόνας $\alpha_x=0,1x$

Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ . Από το σχήμα Ε.1, μετρώντας κατά μήκος του άξονα  $x$  παρατηρείται ότι μετά από 237 ημέρες από την εισπίεση, η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση βρωμιόντος φτάνει σε απόσταση  $L=145\text{m}$ . Ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος με 0,1 και ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  λαμβάνεται επίσης ίσος με 0,1. Από τα παραπάνω προκύπτουν τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=14,5\text{m}$ ,  $\alpha_y=1,45\text{m}$  και  $\alpha_z=1,45\text{m}$ . Για τις τιμές αυτές οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης διαφέρουν πολύ καθώς οι τιμές των συγκεντρώσεων που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση είναι πολύ μικρότερες από  $1\text{mg/l}$ , δηλαδή την ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση των κατανομών του πειράματος.

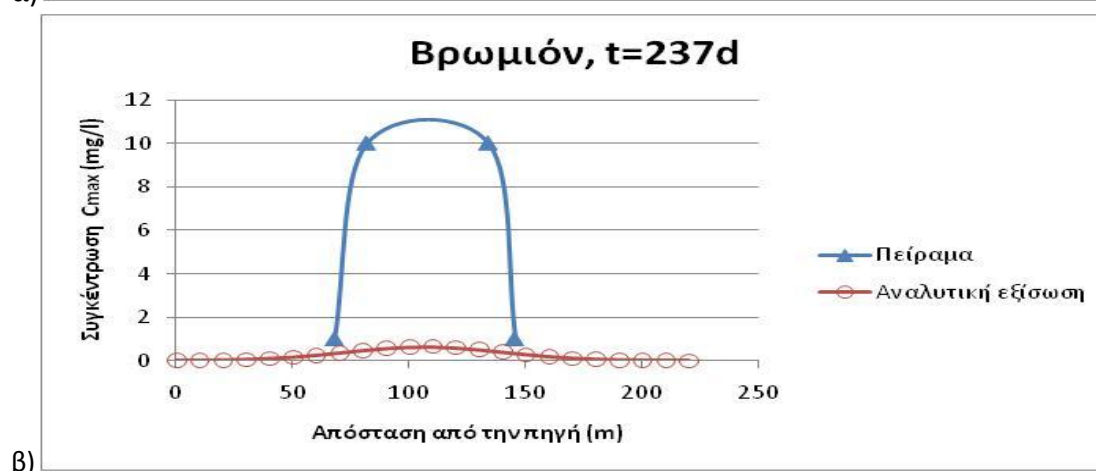
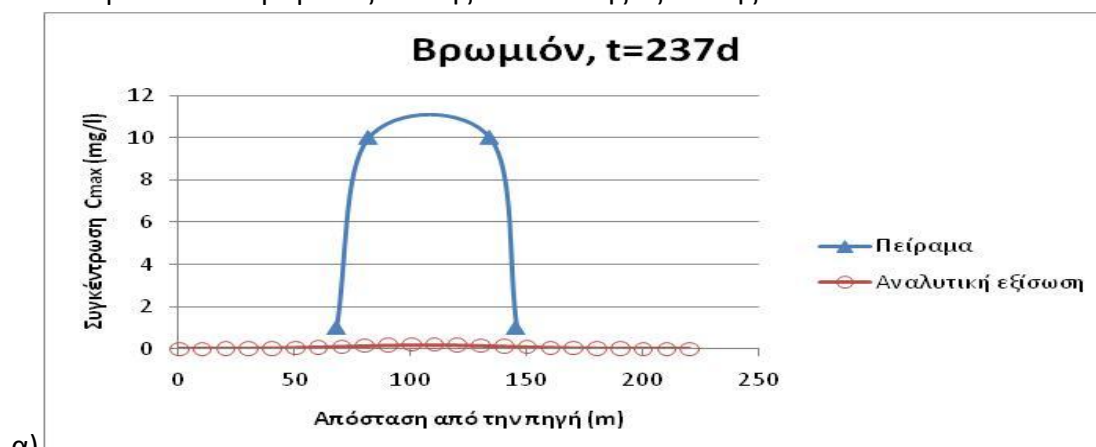
Με την μείωση του λόγου  $\alpha_z/\alpha_x$  σε 0,01, οι τιμές των υπολογισμένων συγκεντρώσεων αυξάνονται αλλά παραμένουν μικρότερες από την ελάχιστη αναφερόμενη τιμή των συγκεντρώσεων της κατανομής του πειράματος.

#### β) εμπειρική σχέση Xu και Eckstein (1995)

Στη συνέχεια εφαρμόζεται η σχέση υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς των Xu και Eckstein (1995), που είναι  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$ . Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς ίσος με  $\alpha_x=5,3\text{m}$ . Παράλληλα θεωρείται τιμή του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς ίση με το 1/10 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, δηλαδή ίση με  $\alpha_y=0,53\text{m}$ . Τέλος θεωρούνται δύο τιμές του συντελεστή

κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με το 1/10 και το 1/100 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς αντίστοιχα.

Από τις κατανομές του Σχήματος 3.26 γίνεται φανερό ότι οι συγκεντρώσεις που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση εξακολουθούν να είναι μικρότερες από 1mg/l (η ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση των κατανομών του πειράματος) και κατανέμονται σε μεγάλο εύρος. Η μείωση του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς σε  $\alpha_z=0,053m$  είχε πολύ μικρή επίδραση στην αύξηση των συγκεντρώσεων. Επομένως, απαιτείται περαιτέρω μείωση των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς για την κατά το δυνατόν σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης.

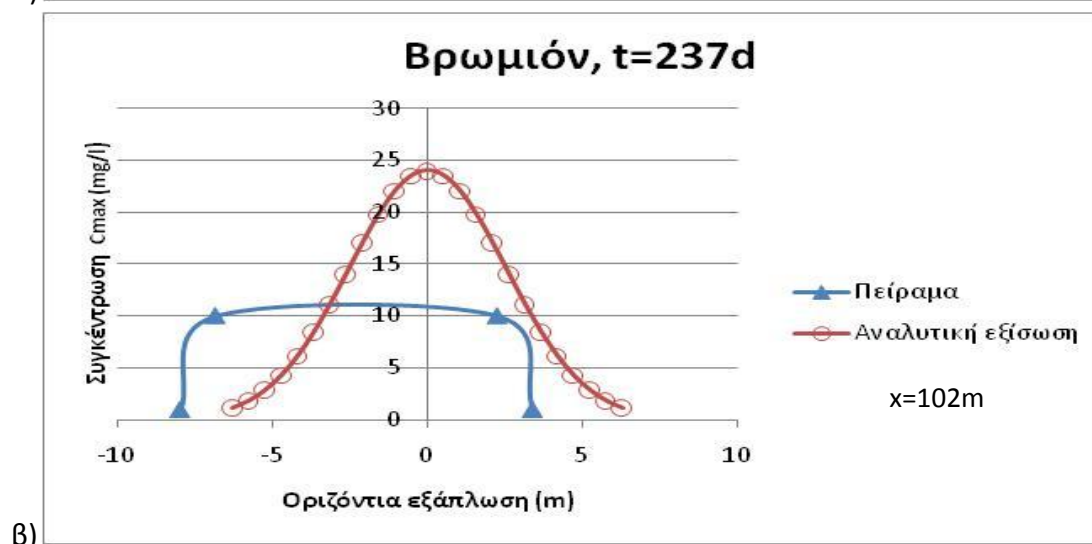
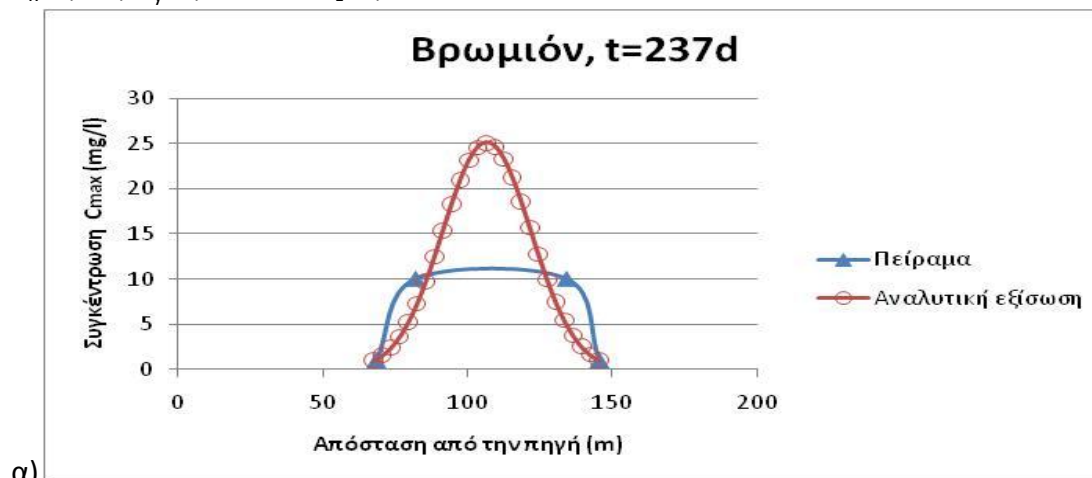


**Σχήμα 3.26** Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς α)  $\alpha_x=5,3m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,53m$  και β)  $\alpha_x=5,3m$ ,  $\alpha_y=0,53m$  και  $\alpha_z=0,053m$

#### 3.2.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται με την μείωση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς σε  $\alpha_x=1,1m$ . Παράλληλα η τιμή του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται η καλύτερη σύγκλιση του εύρους των κατανομών είναι μικρότερη από το εύρος των τιμών που

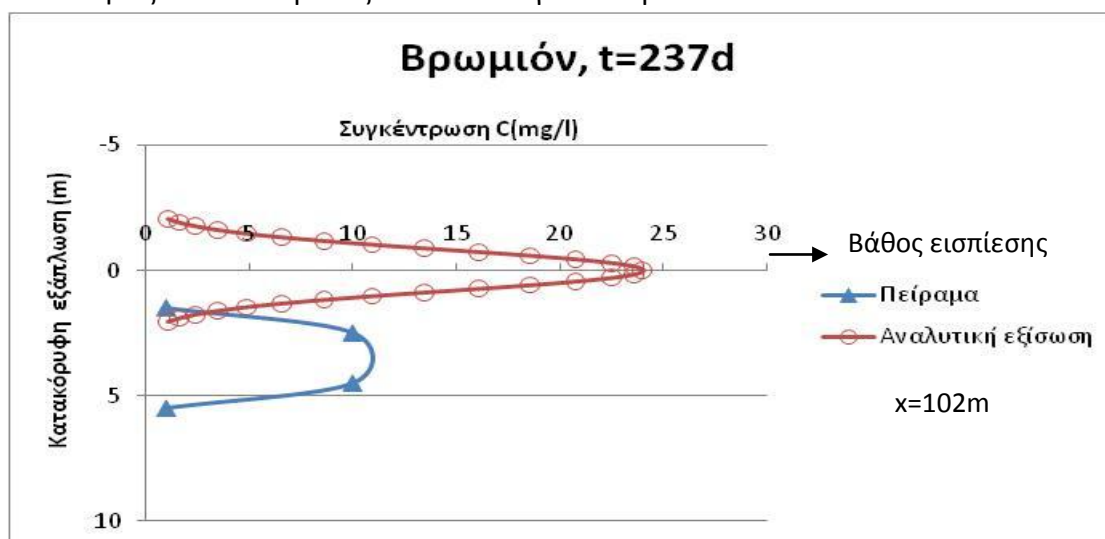
προκύπτουν από το  $1/5$  έως  $1/20$  του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς. Τέλος η τιμή του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται η σύγκλιση των κατανομών είναι ίση με το  $1/10$  του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=1,1m$ ,  $\alpha_y=0,03m$  και  $\alpha_z=0,003m$ .



**Σχήμα 3.27** Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,1m$ ,  $\alpha_y=0,03m$  και  $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες  $x$  (α) και  $y$  (β)

Το εύρος των κατανομών του Σχήματος 3.27α διαφέρει κατά 1m ενώ στο Σχήμα 3.27β η διαφορά του εύρους των δύο κατανομών είναι ίση με 1,2m. Συγκεκριμένα, η καμπύλη του πειράματος στο Σχήμα 3.27α έχει εύρος ίσο με 77m ενώ η καμπύλη της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 78m. Παράλληλα, η κατανομή μεγίστων συγκεντρώσεων του πειράματος κατά μήκος του άξονα  $y$  (Σχήμα 3.27β) έχει εύρος ίσο με 11,4m ενώ η αντίστοιχη κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος 12,6m. Τέλος, στις κατανομές του Σχήματος 3.27 η μέγιστη συγκέντρωση των κατανομών του πειράματος είναι μεγαλύτερη από 10mg/l και των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης είναι περίπου ίση με 25mg/l.

Τέλος πολύ μικρή διαφορά έχει και το εύρος των κατανομών κατά τη διεύθυνση του άξονα z (Σχήμα 3.28), όπου η κατανομή του πειράματος έχει εύρος 4m και η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος 4,1m. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.28 η ρυπασμένη περιοχή του πειράματος παρουσιάζει και κατακόρυφη κίνηση με αποτέλεσμα 237 ημέρες μετά την εισπίεση το κέντρο μάζας (σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων) να έχει κινηθεί προς τα κάτω κατά 3,2m (LeBlanc et al. 1991). Αντίστοιχα το κέντρο μάζας της ρυπασμένης περιοχής που προκύπτει από την αναλυτική εξίσωση βρίσκεται πάνω στον άξονα x. Η κατακόρυφη αυτή κίνηση μπορεί να οφείλεται σε διακυμάνσεις του υδροφόρου ορίζοντα ή στη διαφορά πυκνότητας του διαλύματος και του υπόγειου νερού.



Σχήμα 3.28 Κατανομή των συγκεντρώσεων του βρωμιόντος κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,1m$ ,  $\alpha_y=0,03m$  και  $\alpha_z=0,003m$

Από τις παραπάνω προσπάθειες σύγκλισης των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης προέκυψαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.10. Στο κεφάλαιο 6 θα πραγματοποιηθεί συγκριτική ανάλυση των τιμών αυτών με τις τιμές που προέκυψαν από την εφαρμογή της μεθόδου των ροπών (spatial moments analysis) στα αποτελέσματα του πειράματος. Στο ίδιο κεφάλαιο θα γίνει και σύγκριση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, για τις τιμές του Πίνακα 3.10, τη χρονική στιγμή 461 ημέρες μετά την εισπίεση.

Πίνακας 3.10 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το πείραμα στο Κέιπ Κοντ

Παράμετρος	Τιμή
Συντελεστής διαμήκου μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$	1,1
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(m)$	0,03
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(m)$	0,003

## B) Ανόργανος ρύπος που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση

### 3.2.2.2.5 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ανόργανο ρύπο που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση

Η σύγκριση των κατανομών μεγίστων συγκεντρώσεων του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης θα γίνει και για έναν από τους ανόργανους ρύπους που εισπνέστηκαν και παρουσίασε υστέρηση σε σχέση με τον ιχνηθέτη. Από αυτούς τους ανόργανους ρύπους, παρουσιάζονται στην βιβλιογραφία (LeBlanc et al. 1991) οι κατανομές μεγίστων συγκεντρώσεων του λιθίου ( $\text{Li}^+$ ) και του διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαινίου (μολυβδαινικό ιόν,  $\text{MoO}_4^{-2}$ ). Από τους παραπάνω ρύπους επιλέχθηκε για την προσομοίωση το διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαίνιο ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ), λόγω της παρουσίας στη βιβλιογραφία (Stollenwerk 1995, 1998) εργαστηριακών δεδομένων για την ρόφηση του στον υδροφορέα του Κέιπ Κοντ.

Συγκρίνονται οι κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαινίου ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ), από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, κατά την διαμήκη και εγκάρσια κατεύθυνση. Οι κατανομές του πειράματος προκύπτουν από τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Ε.1, με τομή κατά μήκος του άξονα x (Τομή C-C) και τομή παράλληλη στον άξονα y (Τομή D-D), στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=127\text{m}$ , όπως περιγράφηκε στην Ενότητα 3.2.2.2.1 για τον ιχνηθέτη. Παράλληλα οι κατανομές της αναλυτικής εξίσωσης προκύπτουν από την εφαρμογή της στο σύστημα αξόνων (x, y, z) που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.2.2.2.1. Τέλος, τονίζεται ότι οι μέγιστες συγκεντρώσεις τόσο του πειράματος όσο και της αναλυτικής εξίσωσης προέκυψαν με τον ίδιο τρόπο όπως και για τον ιχνηθέτη (Ενότητα 3.2.2.2.1).

### 3.2.2.2.6 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ανόργανο ρύπο που αναμένεται να παρουσιάσει ρόφηση

Η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαίνιο ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) γίνεται για τις υδρογεωλογικές παραμέτρους του Πίνακα 3.8 και τη μάζα του διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαινίου ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) στο εισπνεσθέν διάλυμα που παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.9. Χρησιμοποιούνται οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που βρέθηκαν από το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης του ιχνηθέτη (Πίνακας 3.10). Παράλληλα λαμβάνεται τιμή του ρυθμού μετασχηματισμού πρώτης τάξης ίση με  $\lambda=0 \text{ d}^{-1}$  και η τιμή του συντελεστή διάχυσης στο έδαφος που είναι ίση με  $D_e=0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

Παράλληλα με την διεξαγωγή του πειράματος πραγματοποιήθηκαν εργαστηριακές δοκιμές για να καθοριστεί αν η παρατηρούμενη υστέρηση του διοξιδιο(διοξο)-μολυβδαινίου ( $\text{MoO}_4^{-}$ ) μπορεί να εξηγηθεί από το μοντέλο της γραμμικής ισόθερμης. Για το σκοπό αυτό ελήφθησαν πυρήνες από την κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα και από την αλλαγή των συγκεντρώσεων σε πείραμα διακοπτόμενου

έργου (batch test) προέκυψαν οι ισόθερμες καμπύλες σε κάθε βάθος. Από τις εργαστηριακές δοκιμές προέκυψε ότι το διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιο ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) παρουσιάζει ρόφηση που δεν μπορεί να περιγραφεί από την γραμμική ισόθερμη. Συγκεκριμένα η μεγαλύτερη ρόφηση παρατηρήθηκε στο δείγμα που προήλθε από τη ζώνη κοντά στον υδροφόρο ορίζοντα (Stollenwerk 1998). Στη ζώνη αυτή η ισόθερμη της ρόφησης παρουσίαζε τη μεγαλύτερη μη-γραμμικότητα. Σε μεγαλύτερα βάθη, όπου το pH και η συγκέντρωση άλλων ρύπων που δρουν ανταγωνιστικά (φωσφορικά και θειικά) αυξάνονταν, η ρόφηση του μειώνονταν και η ισόθερμη γίνονταν πιο γραμμική.

Η αναλυτική εξίσωση στιγμαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή θεωρεί γραμμική ρόφηση όπου η ισορροπία μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης επέρχεται στιγμαία (Ενότητα 2.1). Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης, βρέθηκαν οι τιμές των συντελεστών διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p$  του διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιου ( $\text{MoO}_4^{-}$ ) στις ζώνες διαφορετικού pH με τη θεώρηση γραμμικής ισόθερμης (Πίνακας 3.11). Παράλληλα υπολογίστηκαν οι τιμές των συντελεστών υστέρησης  $R=1+\rho_d K_p/n$ , για ξηρή πυκνότητα  $\rho_d=1,70 \text{ g/cm}^3$  και πορώδες  $n=0,39$  (Πίνακας 3.11). Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης θα χρησιμοποιηθεί η μέση τιμή του συντελεστή υστέρησης  $R$  που προκύπτει από τις ζώνες διαφορετικού pH που είναι ίση με 2,36 (Πίνακας 3.11).

**Πίνακας 3.11 Συντελεστές διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης  $K_p$  του διοξίδο(διοξο)μολυβδαίνιου ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) που προκύπτουν από τη θεώρηση γραμμικής ισόθερμης στα αποτελέσματα εργαστηριακής δοκιμής (Stollenwerk 1998) και οι συντελεστές υστέρησης  $R$  που προκύπτουν**

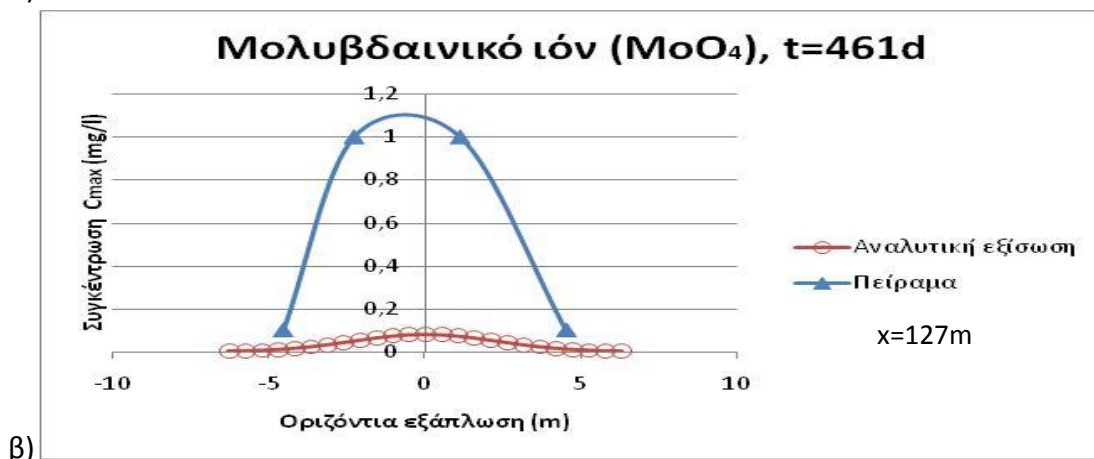
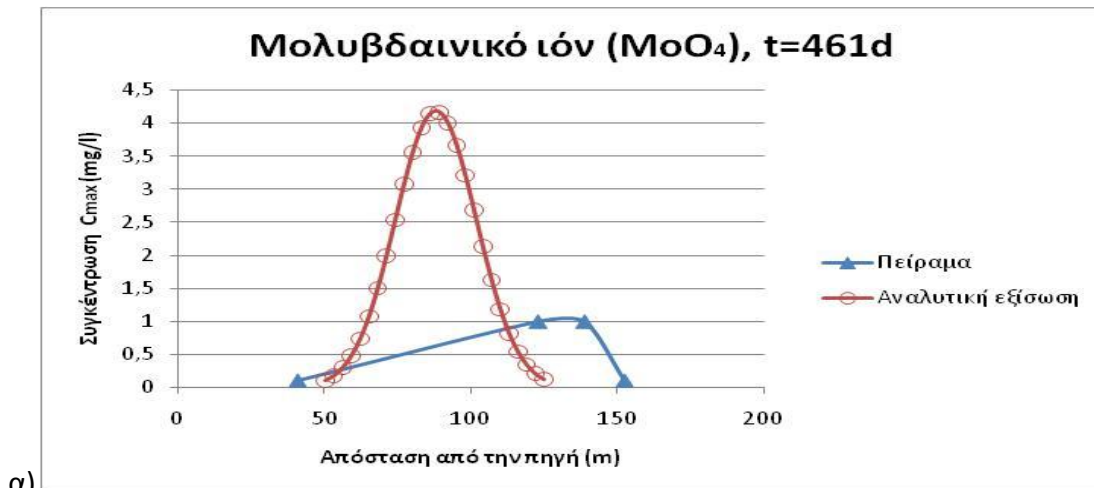
pH	Συντελεστής διαχωρισμού μεταξύ στερεάς και υδατικής φάσης $K_p$ (l/kg)	Συντελεστής υστέρησης $R$
5,70	0,714	4,11
5,95	0,391	2,70
6,10	0,198	1,86
6,30	0,160	1,70
6,50	0,1	1,44
Μέση τιμή	0,313	2,36

### 3.2.2.2.7 Σύγκριση των κατανομών του μολυβδαινικού ιόντος ( $\text{MoO}_4^{-2}$ ) για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς

Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.10), παρατηρείται ότι η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης στο Σχήμα 3.29α είναι της τάξεως των 36m. Συγκεκριμένα στο

Σχήμα 3.29α, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 111m και η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 75m. Παράλληλα η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών στο ίδιο σχήμα είναι της τάξεως των 3,2mg/l.

Στο Σχήμα 3.29β παρατηρείται ότι οι τιμές των συγκεντρώσεων που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση είναι μικρότερες από 0,1mg/l που είναι η ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση της κατανομής του πειράματος, επομένως το εύρος δεν είναι συγκρίσιμο με αυτό του πειράματος. Αυτό οφείλεται στο ότι η Τομή D-D (Σχήμα E.1), από την οποία προέκυψε η κατανομή του πειράματος του Σχήματος 3.29β, έγινε σε απόσταση από την πηγή ίση με 127m, δηλαδή στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας. Όμως, σύμφωνα με την αναλυτική εξίσωση, το μολυβδαινικό ιόν δεν έχει φτάσει σε συγκέντρωση μεγαλύτερη του ορίου ανίχνευσης στο πεδίο στην απόσταση αυτή.

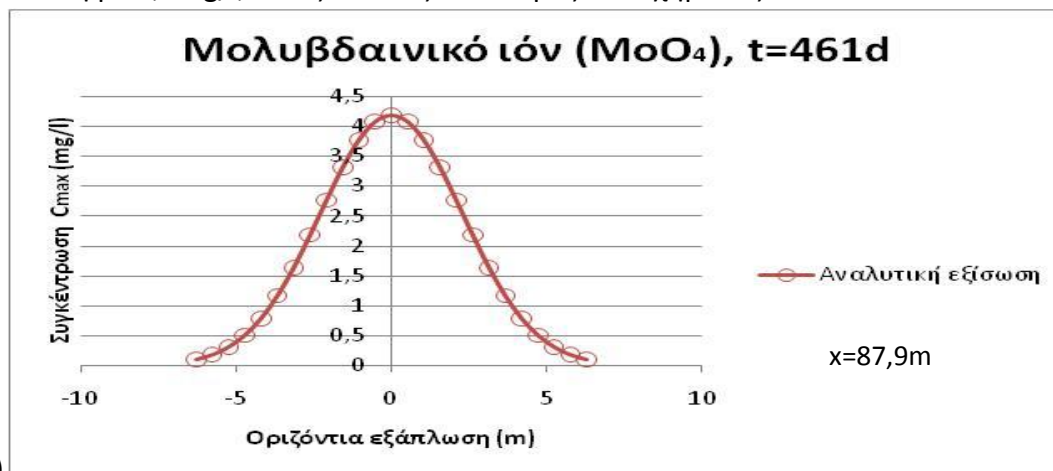


**Σχήμα 3.29 Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του μολυβδαινικού ιόντος (MoO<sub>4</sub><sup>-2</sup>), από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,1m$ ,  $\alpha_y=0,03m$  και  $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x (α) και y (β)**

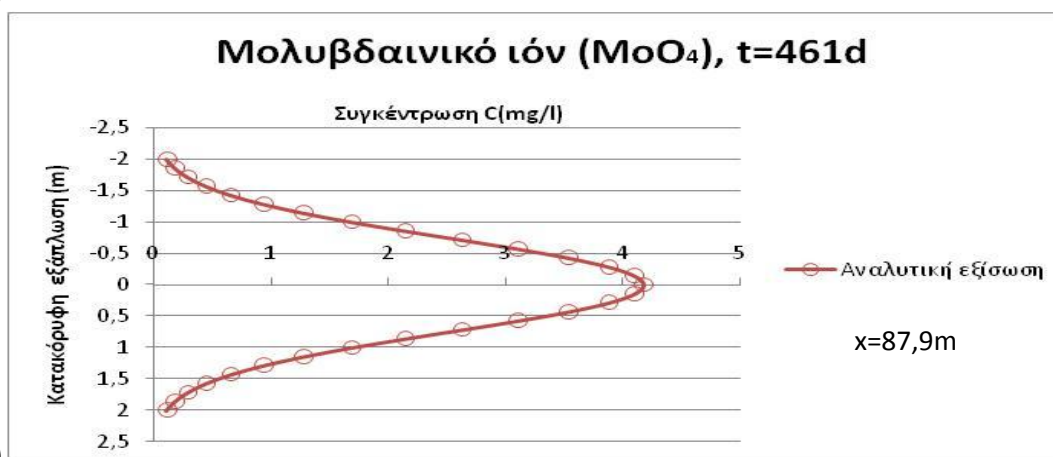
Από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων (κέντρο βάρους) του άξονα  $x=v_x t/R=87,9m$ , προκύπτουν οι κατανομές του Σχήματος 3.30. Η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.30α για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.10, έχει εύρος ίσο με 12,6m. Στο



ίδιο σχήμα η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης είναι ίση με 4,2mg/l. Η κατανομή των συγκεντρώσεων κατά την διεύθυνση του άξονα z από την αναλυτική εξίσωση παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.30β. Το εύρος της καμπύλης του Σχήματος 3.30β είναι ίσο με 4m και η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης ισούται με 4,2mg/l. Τονίζεται ότι η ελάχιστη συγκέντρωση των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 3.30 είναι ίση με 0,1mg/l, όπως και στις κατανομές του Σχήματος 3.29.



α)



β)

Σχήμα 3.30 Κατανομές των συγκεντρώσεων του μολυβδαινικού ιόντος ( $\text{MoO}_4^{2-}$ ) από εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο  $x=v_x t/R$  (κέντρο βάρους της μάζας), για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,1\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,03\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στους άξονες y (α) και z (β). Το διάγραμμα (α) προκύπτει από τις μέγιστες συγκεντρώσεις σε κάθε σημείο του άξονα x

### 3.3 Πείραμα μεταφοράς στο Κολόμπους, Μισισίπι, ΗΠΑ

Τα πειράματα μακροδιασποράς (Macrodispersion Experiments- MADE) διεξήχθησαν σε υδροφορέα πάχους 11m, στις εγκαταστάσεις ερευνών της αεροπορικής βάσης του Κολόμπους, στο Βορειοδυτικό Μισισισιπή. Ο υδροφορέας είναι ιδιαίτερα ανομοιογενής και η διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας ( $\sigma^2 \ln K$ ) είναι ίση με 2.8 (Rehfeldt et al. 1992), όταν η υδραυλική αγωγιμότητα K έχει μονάδες cm/s. Ένα χαρακτηριστικό του υδροφορέα είναι η ύπαρξη προτιμώμενων διόδων ροής, κλίμακας μερικών δεκάτων του μέτρου, με υψηλή περατότητα από καλά διαβαθμισμένη άμμο. Οι δίοδοι αυτές βρίσκονται

μεταξύ στρωμάτων χαμηλής περατότητας, από άργιλο και από κακώς διαβαθμισμένο μείγμα χαλικιών, άμμου και ιλύος που εμποδίζουν την υπόγεια ροή (Zheng et al. 2011).

### 3.3.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα

Ο υδροφορέας στον χώρο διεξαγωγής των πειραμάτων μακροδιασποράς (MADE site) έχει πάχος 11m και αποτελείται από κακώς έως καλώς διαβαθμισμένα αμμώδη χαλίκια και χαλικιώδη άμμο με σημαντικό ποσοστό ιλύος και αργίλου. Το κορεσμένο έδαφος είναι γενικά μη στερεοποιημένο και χωρίς συνοχή. Το πορώδες και η ξηρή πυκνότητα του εδάφους υπολογίστηκαν με την λήψη 84 πυρήνων από 4 σημεία του υδροφορέα και ο αριθμητικός μέσος των τιμών που προέκυψαν είναι ίσος με 0,31 και  $1,77\text{g/cm}^3$  αντίστοιχα (Boggs et al. 1993). Το ποσοστό οργανικού άνθρακα του εδάφους προσδιορίστηκε από 50 δείγματα και κυμαίνεται μεταξύ 0,02 και 0,06% (Boggs et al. 1993).

Το βάθος του υδροφόρου ορίζοντα παρουσιάζει έντονες διακυμάνσεις στη διάρκεια του έτους έως και 3m, με αποτέλεσμα να παρουσιάζεται κατά προσέγγιση 30% διακύμανση στο κορεσμένο πάχος του υδροφορέα. Η μέση τιμή της υδραυλικής κλίσης όπως προέκυψε από μετρήσεις πιεζομετρικού ύψους τον Ιούνιο του 1990 βρέθηκε ίση με 0,0017 (Boggs et al. 1993). Επίσης σημαντικά μεγάλη είναι η υδραυλική κλίση στην κατακόρυφη διεύθυνση που μπορεί να φτάσει ακόμα και στην ίδια τάξη μεγέθους με την υδραυλική κλίση στην οριζόντια διεύθυνση. Ο υδροφορέας παρουσιάζει μεγάλη ανομοιογένεια πράγμα που φαίνεται και από το μεγάλο εύρος των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας που μετρήθηκαν. Στην περιοχή της εισπίεσης, η μέση κατά το βάθος (depth averaged) τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας είναι μεταξύ  $10^{-3}$  και  $10^{-2}$  cm/s (Boggs et al. 1993) ενώ σε μεγάλη απόσταση από αυτήν η μέση κατά το βάθος τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας μειώνεται κατά μια με δύο τάξεις μεγέθους. Οι διακυμάνσεις της υδραυλικής αγωγιμότητας στην κατακόρυφη διεύθυνση κυμαίνονται μεταξύ 2 και 3 τάξεων μεγέθους. Η γεωμετρικά μέση τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας είναι ίση με  $5 \times 10^{-3}$  cm/s (Zheng et al. 2011).

Τα παραπάνω γεωλογικά και υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα συνοψίζονται στον Πίνακα 3.12, όπου παρουσιάζονται οι εδαφικές παράμετροι για την προσομοίωση των αποτελεσμάτων του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) με την εφαρμογή αναλυτικής εξίσωσης.

**Πίνακας 3.12 Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Κολόμπους**

<u>Παράμετρος:</u>	<u>Τιμή</u>
Ξηρή πυκνότητα του εδάφους $\rho_d$ (g/cm <sup>3</sup> )	1,77 (1)
Πορώδες n	0,31 (1)
Υδραυλική κλίση i	0,0017 (1)
Υδραυλική αγωγιμότητα K (cm/s)	$5 \times 10^{-3}$ (2)
Ταχύτητα μεταγωγής (m/s) $v_x = Ki/n$	$2,74 \times 10^{-7}$
Ταχύτητα μεταγωγής (m/d)	0,0237

Πηγές: (1) Boggs et al. 1993

(2) Zheng et al. 2011

### 3.3.2 Δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς στο Κολόμπους (MADE-2)

Στόχος των πειραμάτων μακροδιασποράς (Macrodispersion Experiments-MADE) ήταν η συμπλήρωση των πληροφοριών από προηγούμενα πειράματα, με παρατηρήσεις από το πεδίο για τη μεταφορά διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό ανομοιογενούς υδροφορέα. Όπως προαναφέρθηκε στην Ενότητα 2.2.3, πολλά θεωρητικά μοντέλα (Gelhar και Axness 1983, Dagan 1984) αναγνωρίζουν ότι η μακροσκοπική διασπορά παράγεται από τη διακύμανση των υδρογεωλογικών παραμέτρων του υδροφορέα. Τα πειράματα μακροδιασποράς (MADE) είχαν στόχο την αξιολόγηση αυτών των μοντέλων σε ανομοιογενή υδροφορέα με μεγάλη διακύμανση της υδραυλικής αγωγιμότητας. Επιλέχτηκε η παρουσίαση και προσομοίωση του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) που ξεκίνησε στις 26 Ιουνίου 1990, με την εισπίεση στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα 9,7m<sup>3</sup> διαλύματος τριτίου και τεσσάρων οργανικών ρύπων. Το πείραμα MADE-2 ήταν συνέχεια του πρώτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-1) που έγινε το 1986 και αφορούσε την εισπίεση διαλύματος που αποτελούνταν μόνο από ιχνηθέτες. Επιπλέον στόχος του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) ήταν η αξιολόγηση των εργαστηριακών μετρήσεων για την ρόφηση και υποβάθμιση των οργανικών ρύπων με βάση τα αποτελέσματα του πειράματος. Τέλος, όπως και στα προηγούμενα πειράματα μεταφοράς (Ενότητες 3.1 και 3.2), η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης στο χώρο και στο χρόνο έγινε από τριδιάστατο σύστημα δειγματοληψίας.

### 3.3.2.1 Περιγραφή πειράματος

Το διάλυμα που εισπνέστηκε κατά το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2), περιείχε τρίτιο ως ιχνηθέτη και βενζόλιο, ναφθαλίνη, ρ-ξυλόλιο και ο-διχλωροβενζόλιο (ο-DCB) που είναι γνωστά συστατικά καυσίμων και επίσης χρησιμοποιούνται ως διαλύτες. Ένα μικρό ποσοστό του ρ-ξυλολίου ταυτοποιήθηκε με  $^{14}\text{C}$  για την μελέτη της βιολογικής και χημικής αποδόμησης του ρ-ξυλολίου. Οι αρχικές συγκεντρώσεις και μάζες των παραπάνω ρύπων στο εισπνεσθέν διάλυμα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.13.

**Πίνακας 3.13 Οι εισπνεσθείσες ουσίες και οι ποσότητές τους στο διάλυμα του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους (Boggs et al. 1993)**

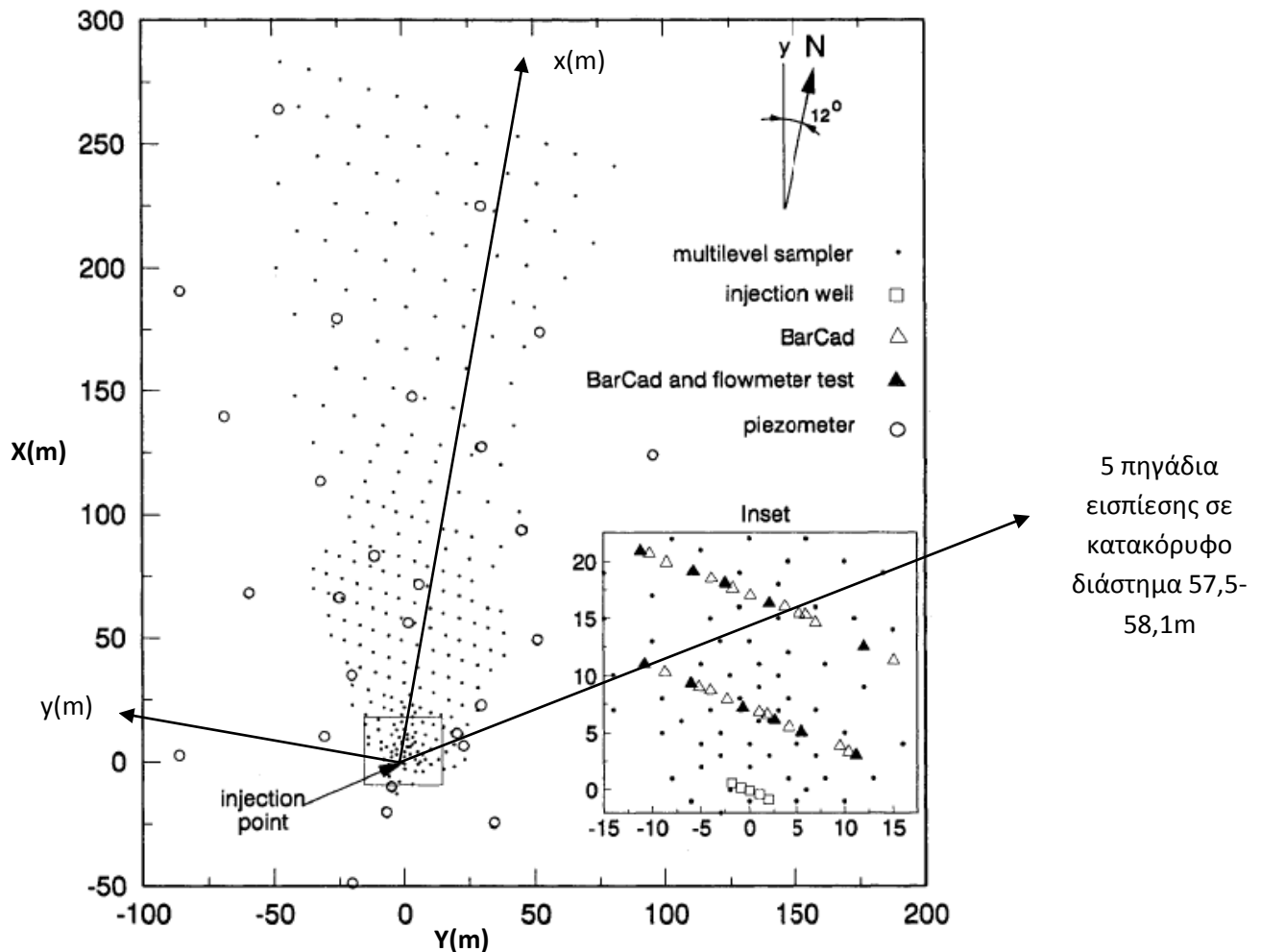
Διαλυμένες ουσίες	Εισπνεθείσα συγκέντρωση	Εισπνεθείσα μάζα
<b>Βενζόλιο</b>	68,1 mg/l	659,7 g
<b>Ρ-ξυλόλιο</b>	51,5 mg/l	402 g
<b>Ναφθαλίνη</b>	7,23mg/l	70 g
<b>Ο-διχλωροβενζόλιο</b>	32,8mg/l	317,7 g
<b>Τρίτιο</b>	55,610 $\mu\text{Ci/l}$	538,7 mCi
<b><math>^{14}\text{C}</math></b>	2,77 $\mu\text{Ci/l}$	26,8mCi

Η εισπνοή του διαλύματος έγινε από 5 πηγάδια με απόσταση μεταξύ τους ίση με 1m, σε κατακόρυφο διάστημα από 7,4 έως 8m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και διήρκεσε 48,5 ώρες. Το σύστημα εισπνοής σχεδιάστηκε έτσι ώστε να παράγει μία ομοιόμορφη εισπνοή του διαλύματος στο κέντρο της κορεσμένης ζώνης με τη μικρότερη δυνατή διατάραξη της φυσικής ροής.

Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω δικτύου 328 πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάρη (multilevel sampling-MLS) που λάμβαναν δείγματα ανά 0,38m σε συνολικό κατακόρυφο διάστημα ίσο με 11,4m. Η κάτοψη του δικτύου πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάρη του πειράματος παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.31.

Το πείραμα διήρκεσε 440 ημέρες και σε αυτό το χρονικό διάστημα πραγματοποιήθηκαν 12 επεισόδια δειγματοληψίας, ξεκινώντας από τη χρονική στιγμή των 13 ημερών μετά την εισπνοή. Οι Boggs et al. (1993) παρουσιάζουν τις κατανομές συγκεντρώσεων του τριτίου που προκύπτουν από μία οριζόντια τομή στην ρυπασμένη περιοχή από τρίτιο, σε 4 διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπνοή. Μία τέτοια κατανομή παρουσιάζεται στο Σχήμα Z.2, που προκύπτει από οριζόντια τομή σε κατακόρυφη απόσταση 1,7m από το σημείο εισπνοής, τη χρονική στιγμή  $t=328$  ημέρες μετά την εισπνοή. Παράλληλα παρουσιάζονται οι κατανομές των συγκεντρώσεων ως προς το βάθος, του τριτίου και των οργανικών ρύπων του πειράματος, κατά μήκος του διαμήκη άξονα, σε 5 διαφορετικές χρονικές

στιγμές μετά την εισπίεση. Δύο τέτοιες κατανομές παρουσιάζονται στο Σχήμα Z.1, για το τρίτιο και το βενζόλιο, τη χρονική στιγμή  $t=328$  ημέρες μετά την εισπίεση. Σημειώνεται ότι οι Boggs et al. (1993) παρουσιάζουν τις μετρημένες συγκεντρώσεις διαιρεμένες με την συγκέντρωση στο διάλυμα εισπίεσης Co. Γι'αυτό και τα αποτελέσματα της αναλυτικής λύσης (Ενότητα 3.3.2.2) ομοίως διαιρούνται με την ίδια αρχική συγκέντρωση στο εισπιασθέν διάλυμα.



Σχήμα 3.31 Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους (Boggs et al. 1993)

### 3.3.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Η διαδικασία της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος με την αναλυτική εξίσωση στιγμαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)) είναι όμοια με αυτή που εφαρμόστηκε για τα πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ (Ενότητες 3.1 και 3.2). Από τις κατανομές συγκέντρωσης του πειράματος παρατηρείται ότι οι μέγιστες συγκεντρώσεις των ρύπων παραμένουν κοντά στο σημείο εισπίεσης, ενώ ένα μικρό ποσοστό των συγκεντρώσεων απλώνεται σε μεγάλες αποστάσεις από αυτό. Λόγω της ασυμμετρίας αυτής είναι δύσκολη η σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, κυρίως κατά τη διαμήκη διεύθυνση. Επομένως, η επιλογή των τιμών των

συντελεστών μηχανικής διασποράς θα γίνει με βάση τη σύγκλιση του εύρους των κατανομών στην περιοχή των μεγίστων συγκεντρώσεων για το τρίτιο. Τέλος, για έναν από οργανικούς ρύπους του πειράματος, συγκρίνονται οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση του ιχνηθέτη.

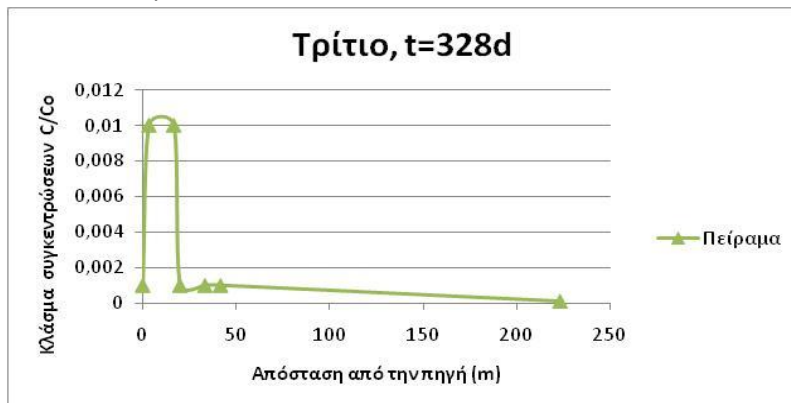
## A) Ιχνηθέτης

### 3.3.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για τον ιχνηθέτη

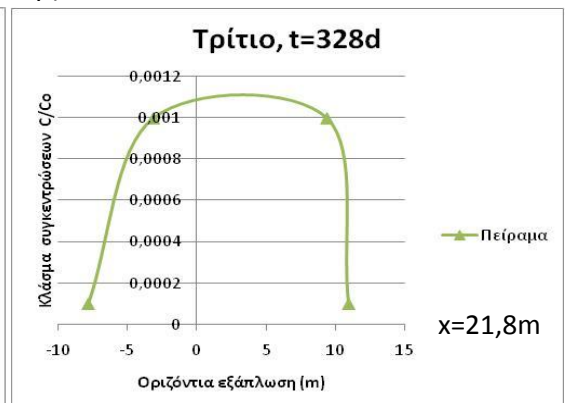
Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης επιλέγεται το σύστημα αξόνων ( $x, y, z$ ), η κάτοψη του οποίου παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.31. Ο άξονας  $x$  ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού και η αρχή του συστήματος αξόνων που αντιστοιχεί στο σημείο εισπίεσης βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=0, Y=0, Z=57,8m$ . Η συντεταγμένη  $Z=57,8m$  (στάθμη πάνω από την επιφάνεια της θάλασσας) αντιστοιχεί στο μέσο όρο του διαστήματος εισπίεσης που παρουσιάζεται στο Σχήμα Z.1α.

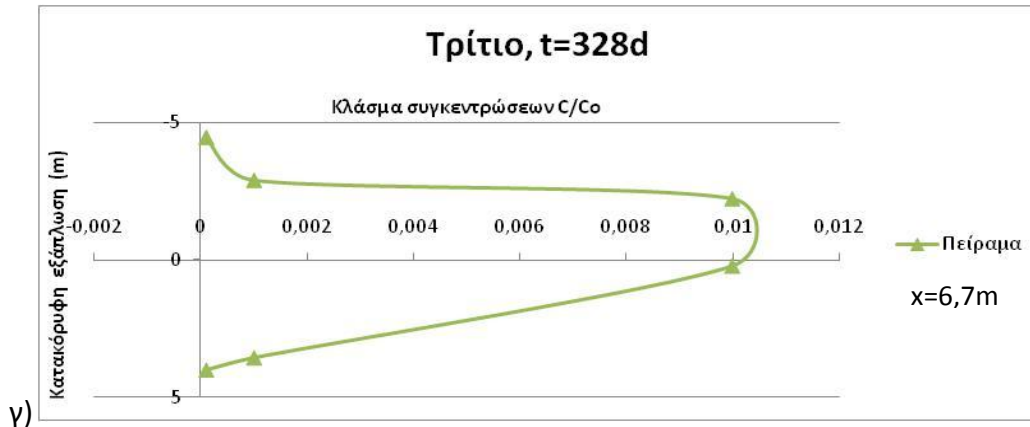
Η κατανομή των συγκεντρώσεων του τριτίου κατά τη διαμήκη διεύθυνση από το πείραμα (Σχήμα 3.32α) αντιστοιχεί στην Τομή A-A στο Σχήμα Z.1α. Η αντίστοιχη κατανομή από την αναλυτική εξίσωση προκύπτει από την εφαρμογή της κατά μήκος του άξονα  $x$ , σε κατακόρυφη απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,7m$ . Αντίστοιχα, η κατανομή των συγκεντρώσεων του τριτίου κατά την εγκάρσια οριζόντια διεύθυνση (Σχήμα 3.32β) από το πείραμα προκύπτει από το Σχήμα Z.2 με την Τομή E-E, στο σημείο του άξονα  $x=21,8m$ . Αντίστοιχα, η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης γίνεται στο σημείο του άξονα  $x$  όπου έγινε η Τομή E-E, για κατακόρυφη απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,7m$ . Τέλος, η κατανομή των συγκεντρώσεων του τριτίου κατά την εγκάρσια κατακόρυφη διεύθυνση από το πείραμα (Σχήμα 3.32γ) προκύπτει από το Σχήμα Z.1α με την Τομή B-B, στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=6,7m$ . Η αντίστοιχη κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης προκύπτει από την εφαρμογή της στο σημείο του άξονα  $x$  όπου έγινε η Τομή B-B για μηδενική οριζόντια εγκάρσια απόσταση από την πηγή ( $y=0$ ).

α)



β)





Σχήμα 3.32 Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του τριτίου από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 328 ημέρες μετά την εισπίεση, στον άξονα x (διεύθυνση υπόγειας ροής) (α) και στους άξονες γ (β) και z (γ) (εγκάρσιες διευθύνσεις)

### 3.3.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από σημειακή πηγή (εξίσωση (2.3)) θα χρησιμοποιηθεί η ταχύτητα μεταγωγής του Πίνακα 3.12 και η μάζα του τριτίου στο εισπιασθέν διάλυμα που παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.13. Επίσης, ο συντελεστής υστέρησης R λαμβάνεται ίσος με το 1 και ο ρυθμός μετασχηματισμού πρώτης τάξης λ λαμβάνεται ίσος με το  $0 \text{ d}^{-1}$ . Τέλος, όπως και για τα προηγούμενα πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ (Ενότητες 3.1 και 3.2), ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται ίσος με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

Για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, αρχικά εξετάστηκαν τιμές που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις όπως στις Ενότητες 3.1.2.2.3, 3.1.3.2.3 και 3.2.2.2.3 για τα πειράματα στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κόντ. Στο Σχήμα 3.32α παρατηρείται ότι οι μέγιστες συγκεντρώσεις του τριτίου παραμένουν κοντά στο σημείο εισπίεσης, ενώ ένα μικρό ποσοστό των συγκεντρώσεων του απλώνεται σε μεγάλες αποστάσεις από αυτό. Επομένως, οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς είναι αυτές για τις οποίες, το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης κατά τη διαμήκη διεύθυνση ταιριάζει κατά το δυνατόν με το εύρος στην περιοχή των μεγίστων συγκεντρώσεων της αντίστοιχης κατανομής του πειράματος. Για τις κατανομές κατά την εγκάρσια οριζόντια και κατακόρυφη διεύθυνση του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς προκύπτουν από το καλύτερο ταίριασμα του συνολικού εύρους τους. Τέλος σημειώνεται ότι η σύγκριση του εύρους των κατανομών γίνεται με την ίδια ελάχιστη τιμή του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co.

*3.3.2.2.3 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για τον ιχνηθέτη*

Το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται για τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς ίση με  $\alpha_x=7m$ . Παράλληλα, ο συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς λαμβάνεται ίσος με το 1/10 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, δηλαδή ίσος με 0,7m. Επίσης, ο συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς λαμβάνεται ίσος με το 1/100 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, δηλαδή ίσος με 0,07m. Τέλος, σημειώνεται ότι για την διαμήκη εξάπλωση του τριτίου στην περιοχή μεγίστων συγκεντρώσεων  $\Delta_x=41,6m$ , οι τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από τις εμπειρικές σχέσεις είναι της τάξεως των 4m. Αντίθετα, για την συνολική διαμήκη εξάπλωση του τριτίου  $L=225m$ , ο συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς που προκύπτει από την σχέση των Xu και Eckstein (1995) είναι της τάξεως των 7m, όσο και η τιμή για την οποία προκύπτει το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα των κατανομών στη περιοχή μεγίστων συγκεντρώσεων.

Για τις κατανομές του σχήματος 3.33α, όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 3.3.2.2.2, θεωρήθηκε στόχος το ταίριασμα, κατά το δυνατόν, του εύρους της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης με το εύρος της περιοχής των μεγίστων συγκεντρώσεων της κατανομής του πειράματος. Επομένως, παρότι η ελάχιστη τιμή του κλάσματος συγκεντρώσεων  $C/C_0$  της κατανομής του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίδια (0,0001), συγκρίνεται το συνολικό εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης που είναι ίσο με 40m με το εύρος της κατανομής του πειράματος  $\Delta_x=41,6m$  που αντιστοιχεί σε κλάσματα συγκεντρώσεων μεγαλύτερα από 0,001. Παράλληλα η κατανομή του πειράματος έχει μέγιστη τιμή του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  που ξεπερνά το 0,01 και μπορεί να φτάσει έως και την τιμή 0,1, όπως φαίνεται και στο Σχήμα Ζ.1. Η κατανομή που προέκυψε από την αναλυτική εξίσωση έχει μέγιστη τιμή του κλάσματος  $C/C_0$  ίση με 0,0147 που είναι εντός του παραπάνω εύρους.

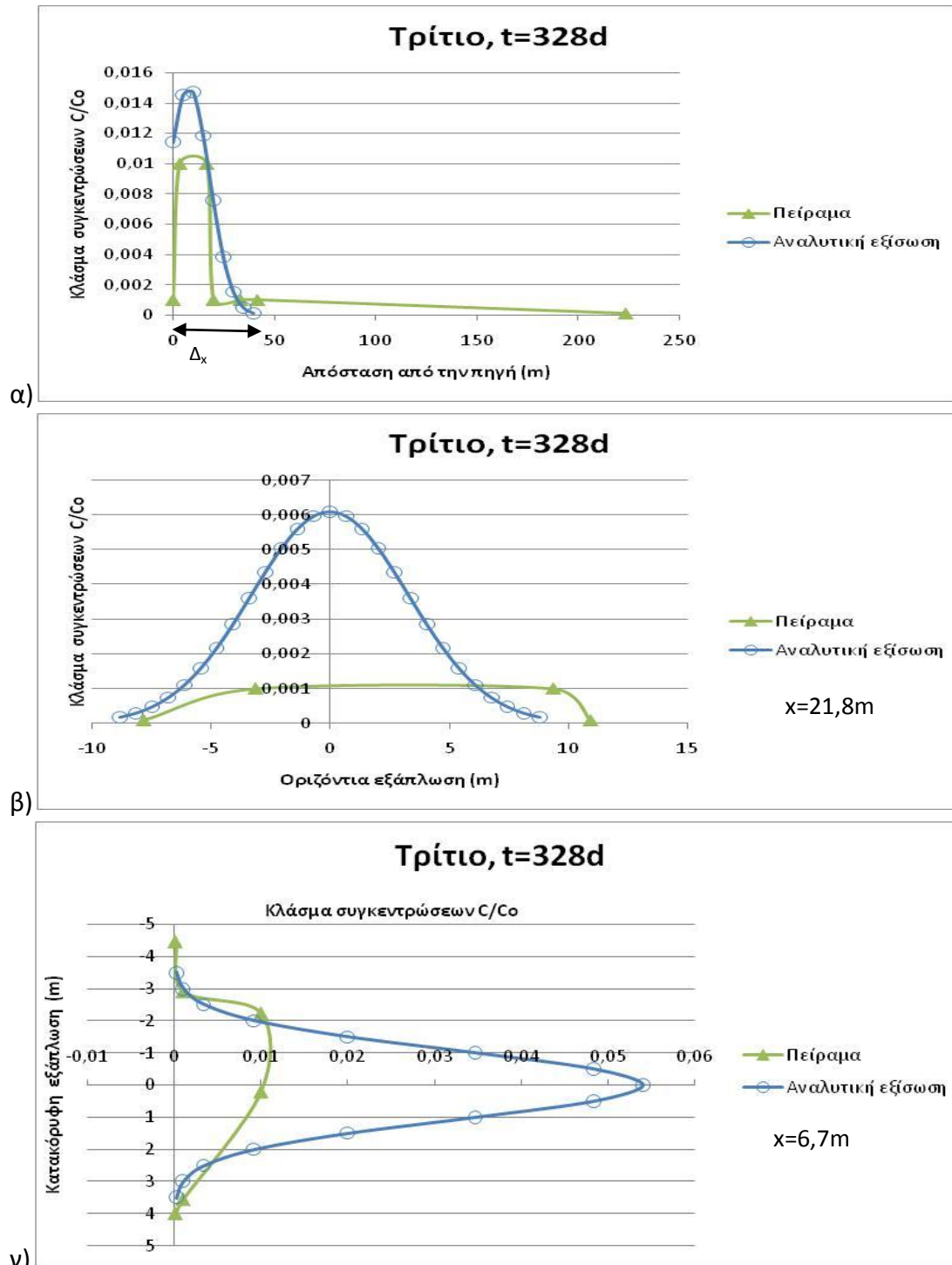
Η κατανομή του πειράματος του Σχήματος 3.33β έχει μέγιστη τιμή που ξεπερνά το 0,001 και μπορεί να φτάσει έως 0,01. Παράλληλα η ελάχιστη τιμή του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  είναι ίση με 0,0001. Από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης προέκυψε η κατανομή του Σχήματος 3.33β όπου η μέγιστη τιμή του κλάσματος  $C/C_0$  είναι ίση με 0,006 και η ελάχιστη είναι ίση με 0,0001. Στο Σχήμα 3.33β παρατηρείται σύγκλιση των κατανομών καθώς η οριζόντια εξάπλωση του τριτίου στο πείραμα είναι ίση με 18,7m και της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 17,6m.

Η κατανομή του πειράματος στο Σχήμα 3.33γ έχει μέγιστο κλάσμα συγκεντρώσεων  $C/C_0$  που ξεπερνά το 0,01 και ελάχιστο ίσο με 0,0001. Η κατανομή που προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης έχει μέγιστη τιμή του κλάσματος των



Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή

συγκεντρώσεων  $C/C_0$  ίση με 0,053 και ελάχιστη ίση με 0,0001. Επομένως παρατηρείται σύγκλιση των κατανομών καθώς η κατακόρυφη εξάπλωση του τριτίου από το πείραμα είναι ίση με 8,4m και από την αναλυτική εξίσωση είναι ίση με 7m.



Σχήμα 3.33 Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του τριτίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=7m$ ,  $\alpha_y=0,07m$  και  $\alpha_z=0,07m$ , στους άξονες x (α), y (β) και z (γ)

Στον Πίνακα 3.14 παρουσιάζονται οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είχαν το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα, με βάση τα κριτήρια που τέθηκαν για το

ταίριασμα των κατανομών στη διαμήκη διεύθυνση. Στο Κεφάλαιο 6, θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των τιμών αυτών με τιμές που προέκυψαν από την εφαρμογή μεθόδου ροπών (moments analysis) στα αποτελέσματα του πειράματος, με τη θεώρηση όμως μη ομοιόμορφου πεδίου ροής.

**Πίνακας 3.14 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους.**

<b>Παράμετρος</b>	<b>Τιμή</b>
Συντελεστής διαμήκου μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$	7
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(m)$	0,7
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(m)$	0,07

## B) Οργανικός ρύπος

### 3.3.2.2.4 Περιγραφή προσομοίωσης για τον οργανικό ρύπο

Από τους οργανικούς ρύπους επιλέχτηκε για την προσομοίωση το βενζόλιο καθώς, όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 3.1.3.2.5, είναι γνωστό καρκινογόνο (US.EPA) και η μέγιστη επιτρεπόμενη συγκέντρωση του στο πόσιμο νερό είναι μικρή (0,005mg/l).

Συγκρίνονται οι κατανομές του κλάσματος συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, κατά την διαμήκη και κατακόρυφη εγκάρσια διεύθυνση. Οι κατανομές του πειράματος προκύπτουν από το Σχήμα Z.1β, με τομή κατά μήκος του άξονα x (Τομή C-C) και τομή παράλληλη στον άξονα z (Τομή D-D), στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας του βενζολίου  $x=3,3m$ . Παράλληλα οι κατανομές της αναλυτικής εξίσωσης προκύπτουν από την εφαρμογή της στο σύστημα αξόνων (x, y, z) με τον τρόπο που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.3.2.2.1 για το τρίτιο.

### 3.3.2.2.5 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για τον οργανικό ρύπο

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης απαιτείται η μάζα του βενζολίου στο εισπνευσθέν διάλυμα (Πίνακας 3.13), οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα (Πίνακας 3.12) και οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.14). Παράλληλα η τιμή του συντελεστή διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται ίση με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ , όπως και για τον ιχνηθέτη του πειράματος.

Από τη μελέτη της χρονικής εξέλιξης της ρύπανσης υπολογίστηκε ο συντελεστής υστέρησης του βενζολίου και συγκρίθηκε με τα αποτελέσματα εργαστηριακών δοκιμών σε δείγματα από τον υδροφορέα του χώρου διεξαγωγής του πειράματος. Από τη μελέτη της ιστορίας της ρύπανσης προέκυψε το εύρος των τιμών του συντελεστή υστέρησης R του βενζολίου μεταξύ 1,07 και 1,33 (Boggs et al. 1993). Αντίστοιχα, από τις εργαστηριακές δοκιμές προέκυψε τιμή του συντελεστή

υστέρησης R ίση με 1,3 (Boggs et al. 1993). Παρατηρείται συνέπεια των τιμών των συντελεστών υστέρησης που προσδιορίστηκαν με τους παραπάνω τρόπους. Επίσης τόσο από τις εργαστηριακές δοκιμές όσο και από τη χρονική εξέλιξη της ρύπανσης έγινε φανερό ότι η ρόφηση μπορεί να περιγραφεί από τη γραμμική ισόθερμη. Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το βενζόλιο θα χρησιμοποιηθεί η τιμή του συντελεστή υστέρησης R που προέκυψε από τις εργαστηριακές δοκιμές, που είναι ίση με 1,3.

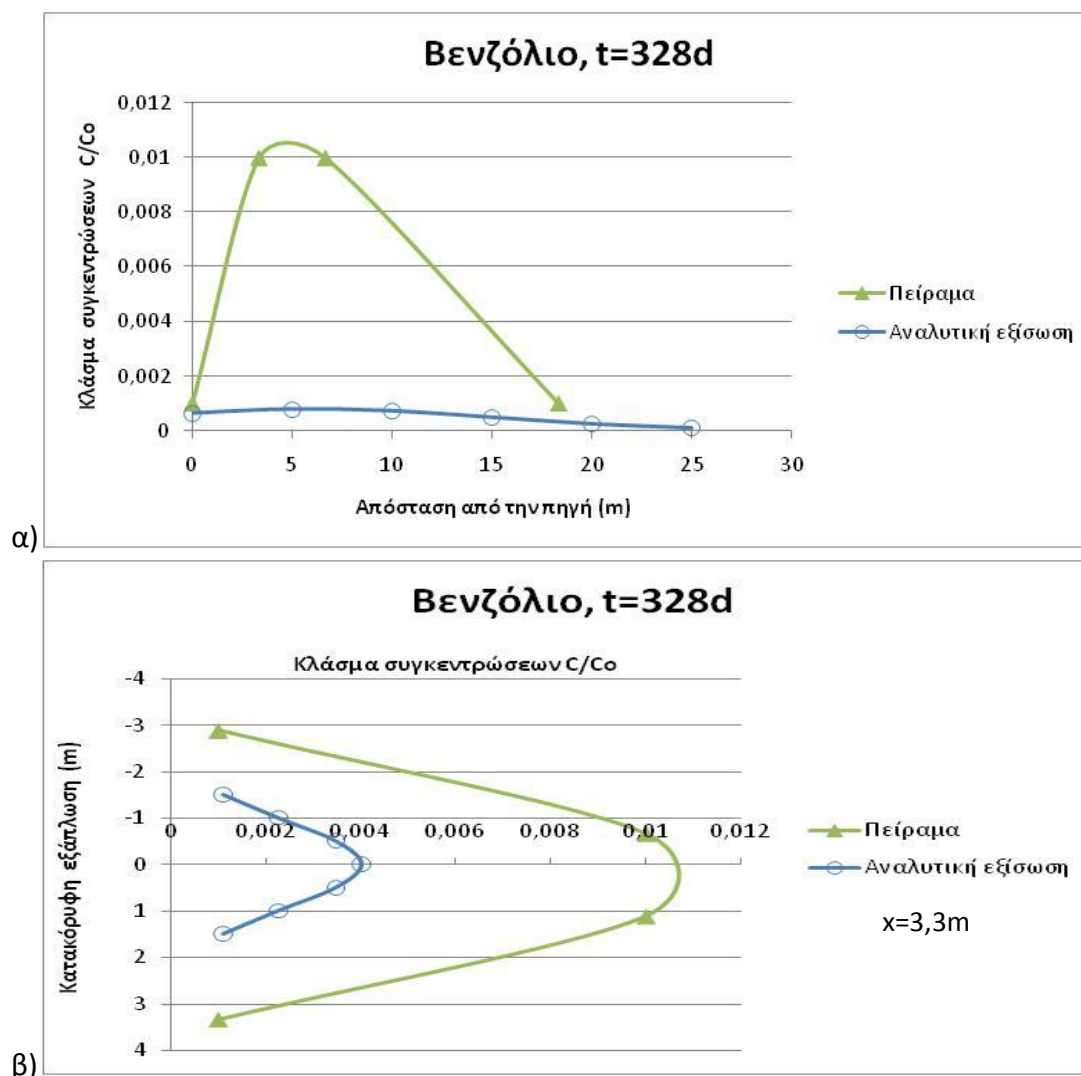
Τα αποτελέσματα εργαστηριακών δοκιμών σε συνδυασμό με την μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης καταδεικνύουν ότι η μείωση της συγκέντρωσης του βενζολίου στη διάρκεια του πειράματος οφείλεται σε φυσική αποδόμησή του. Μάλιστα η αυξημένη συγκέντρωση διαλυμένου διοξειδίου του άνθρακα (CO<sub>2</sub>) στον υδροφορέα φανερώνει αερόβια αποδόμηση του βενζολίου αφού το CO<sub>2</sub> είναι γνωστό προϊόν της βιοαποδόμησής του. Επίσης δεν υπάρχουν ενδείξεις για αναερόβιο βιομετασχηματισμό του, λόγω των μικρών συγκεντρώσεων νιτρικών και θεικών στον υδροφορέα. Από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης στο χώρο και τον χρόνο προέκυψαν οι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης του βενζολίου που είναι ίσοι με 0,008 και 0,010 d<sup>-1</sup> αντίστοιχα. Οι παραπάνω τιμές είναι εντός του εύρους των ρυθμών μετασχηματισμού πρώτης τάξης λ για αερόβια αποδόμηση του βενζολίου, που προκύπτουν από εργαστηριακές δοκιμές και ρυπασμένους χώρους, που είναι μεταξύ 0,00 και 2,5 d<sup>-1</sup> (Suarez και Rifai 1999). Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το βενζόλιο θα χρησιμοποιηθεί ο μέσος όρος των τιμών του ρυθμού μετασχηματισμού πρώτης τάξης λ, που προέκυψαν από το πείραμα, που είναι ίσος με 0,009 d<sup>-1</sup>.

#### *3.3.2.2.6 Σύγκριση των κατανομών του βενζολίου για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς*

Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 3.14) παρατηρείται στο Σχήμα 3.34α ότι η μέγιστη τιμή της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 0,0008 ενώ η ελάχιστη έχει επιλεγεί ίση με 0,0001. Αντίστοιχα στο ίδιο σχήμα, η μέγιστη τιμή της κατανομής του πειράματος είναι μεγαλύτερη από 0,01 και η ελάχιστη είναι ίση με 0,001. Παρατηρείται ότι η μέγιστη τιμή της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι μικρότερη ακόμα και από την μικρότερη αναφερόμενη τιμή του κλάσματος συγκεντρώσεων C/Co της κατανομής του πειράματος. Επομένως το εύρος των κατανομών του Σχήματος 3.34α δεν καθίσταται συγκρίσιμο.

Στο Σχήμα 3.34β, οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης έχουν την ίδια ελάχιστη τιμή που είναι ίση με 0,001. Επομένως το εύρος τους καθίσταται συγκρίσιμο και για την κατανομή του πειράματος είναι ίσο με 5,2m και για την κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 3m. Στο Σχήμα 3.34β, η μέγιστη τιμή του λόγου C/Co της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 0,004 και της κατανομής του πειράματος είναι μεγαλύτερη από 0,01.

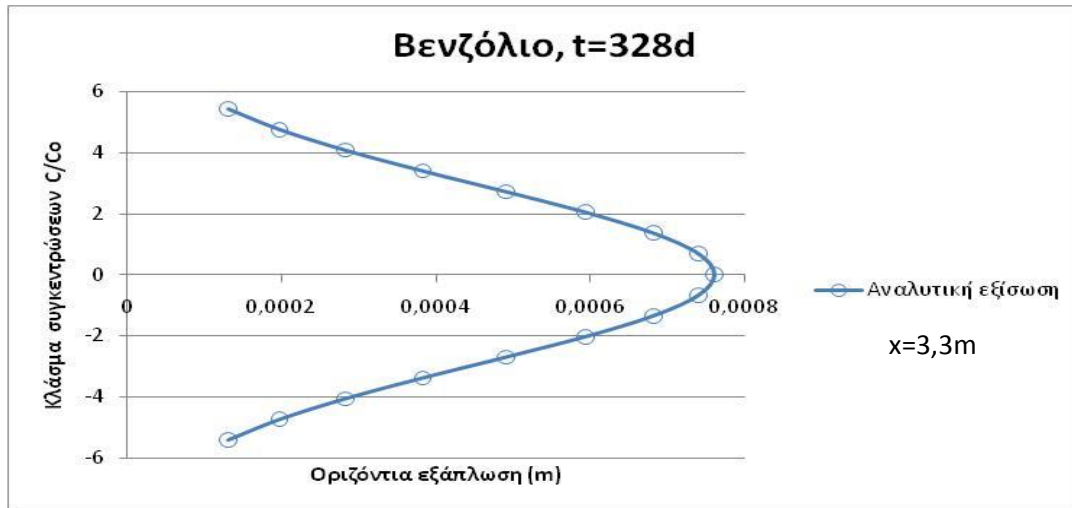
Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή



Σχήμα 3.34 Κατανομές του κλάσματος των συγκεντρώσεων C/Co του βενζολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=7m$ ,  $\alpha_y=0,7m$  και  $\alpha_z=0,07m$ , στους άξονες x (α) και z (β)

Από το πείραμα δεν παρέχονται πληροφορίες για την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του βενζολίου. Εφαρμόζεται η αναλυτική εξίσωση κατά τη διεύθυνση του άξονα y, τη χρονική στιγμή t=328 ημέρες μετά την εισπίεση, στο σημείο του άξονα x από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.34β και στο σημείο του άξονα z από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 3.34α. Η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης που προκύπτει για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 3.14 παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.35. Η ελάχιστη τιμή του κλάσματος των συγκεντρώσεων στο Σχήμα 3.35 είναι ίσο με 0,0001 και η μέγιστη τιμή είναι ίση με 0,00076. Το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης που προκύπτει από τις παραπάνω ελάχιστες τιμές του λόγου C/Co είναι ίσο με 10,8m.

Κεφάλαιο 3: Στιγμαία έκλυση ρύπου από σημειακή πηγή



Σχήμα 3.35 Κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του βενζολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $y$  από την αναλυτική εξίσωση, τη χρονική στιγμή 328 ημέρες μετά την εισπίεση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=7m$ ,  $\alpha_y=0,7m$  και  $\alpha_z=0,07m$

## Κεφάλαιο 4 Στιγμαία έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή

### 4.1 Πείραμα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ, Οντάριο, Καναδά

Τα πειράματα εισπίεσης διαλύματος ραδιοϊσοτόπων πραγματοποιήθηκαν στον υδροφορέα της περιοχής Τουίν Λέικ στα πυρηνικά εργαστήρια του Τσόκ Ρίβερ στον Καναδά. Ο υδροφορέας του χώρου διεξαγωγής των πειραμάτων μεταφοράς είναι αμμώδης με μεγάλη οριζόντια στρωμάτωση.

#### 4.1.1 Χαρακτηριστικά υδροφορέα

Ο υδροφορέας αποτελείται από αμμώδη στρώματα που υπέρκεινται του βραχώδους υποβάθρου, που είναι πρακτικώς αδιαπέρατο. Το πορώδες του εδάφους υπολογίστηκε από τη λήψη 60 πυρήνων από τον υδροφορέα και η μέση τιμή του βρέθηκε ίση με 0,408 (Killey και Molyaner 1988).

Στο χώρο διεξαγωγής των πειραμάτων μεταφοράς, ο υδροφόρος ορίζοντας βρίσκεται μεταξύ 2 και 8m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και το ύψος του παρουσιάζει διακυμάνσεις στην διάρκεια του έτους έως και 1,5m. Η κατεύθυνση της κίνησης του υπόγειου νερού είναι κυρίως οριζόντια με εξαίρεση το πάνω τμήμα του υδροφορέα κοντά στο σημείο εισπίεσης όπου η κίνηση του υπόγειου νερού είναι σχεδόν κατακόρυφη. Η μέση τιμή της υδραυλικής κλίσης είναι ίση με 0,032 (Killey και Molyaner 1988). Η υδραυλική αγωγιμότητα του υδροφορέα υπολογίστηκε από μετρήσεις σε γεωτρήσεις και το εύρος των τιμών που προέκυψαν κυμαίνονταν μεταξύ  $9,33 \times 10^{-3}$  και  $2,04 \times 10^{-2}$  cm/s· ο λογαριθμικός μέσος (LogK, όπου K σε cm/s) είναι ίσος με -1,86 (Killey και Molyaner 1988). Επίσης με βάση τις παραπάνω μετρήσεις βρέθηκε ότι ο λόγος της υδραυλικής αγωγιμότητας στην οριζόντια διεύθυνση προς την υδραυλική αγωγιμότητα στην κατακόρυφη διεύθυνση ( $K_h/K_v$ ) κυμαίνεται από 1,1 έως 10,8 (Killey και Molyaner 1988).

Τα παραπάνω γεωλογικά και υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα συνοψίζονται στον Πίνακα 4.1, όπου παρουσιάζονται οι εδαφικές παράμετροι για την προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πρώτου πειράματος εισπίεσης ραδιοϊσοτόπων με την εφαρμογή αναλυτικής εξίσωσης. Σημειώνεται ότι στον Πίνακα 4.1 παρουσιάζονται δύο τιμές της υδραυλικής αγωγιμότητας K, όπου η πρώτη αντιστοιχεί στον λογαριθμικό μέσο των τιμών που προέκυψαν από τις μετρήσεις σε γεωτρήσεις και η δεύτερη αντιστοιχεί στη μεγαλύτερη τιμή που προέκυψε από τις μετρήσεις. Επομένως, θα χρησιμοποιηθούν διαφορετικές τιμές για την προσομοίωση των δύο στρωμάτων της ρυπασμένης περιοχής, όπως περιγράφεται αναλυτικά στην Ενότητα 4.2.2.1.

**Πίνακας 4.1** Γεωλογικές και υδρογεωλογικές παράμετροι που απαιτούνται για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό στο Τουίν Λέικ

<u>Παράμετρος:</u>	<u>Τιμή</u>
Πορώδες n	0,408 (1)
Υδραυλική κλίση i	0,032 (1)
Υδραυλική αγωγιμότητα K(m/s)	1,38×10 <sup>-4</sup> (1) 2,04×10 <sup>-4</sup>
Ταχύτητα μεταγωγής (m/s) $v_x=Ki/n$ -Μέση	1,08×10 <sup>-5</sup>
-Μέγιστη	1,6×10 <sup>-5</sup>
Ταχύτητα μεταγωγής (m/d) -Μέση	0,935
-Μέγιστη	1,382

Πηγή: (1) Killely και Moltzaner 1988

## 4.2 Πρώτο πείραμα εισπίεσης ραδιοϊσοτόπου στο Τουίν Λέικ

Το πρώτο πείραμα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ πραγματοποιήθηκε το 1982 και περιελάμβανε την παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης από ραδιοϊσότοπο σε απόσταση 20m από το σημείο εισπίεσης. Ο κύριος στόχος του πειράματος ήταν ο ορισμός των κατανομών της υδραυλικής αγωγιμότητας του υδροφορέα με βάση τη μεταφορά διαλυμένου ρύπου στο υπόγειο νερό. Ο δεύτερος στόχος του πειράματος ήταν ο προσδιορισμός της διαμήκου και κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς από τα αποτελέσματα ενός επί τόπου πειράματος μικρής κλίμακας. Επίσης προσδιορίστηκε η σχέση της διαμήκου μηχανικής διασποράς με την απόσταση μεταφοράς του διαλυμένου ρύπου στο υπόγειο νερό του υδροφορέα. Ακολούθησε και δεύτερο πείραμα μεταφοράς που πραγματοποιήθηκε το 1983, στο οποίο η κλίμακα του πειράματος αυξήθηκε στα 40m. Επιλέχτηκε η παρουσίαση και προσομοίωση του πρώτου πειράματος μεταφοράς λόγω της πληρέστερης παρουσίας των κατανομών συγκέντρωσης του ραδιοϊσοτόπου από το πείραμα. Σημειώνεται ότι η παρακολούθηση της κίνησης του ραδιοϊσοτόπου στο υπόγειο νερό έγινε χωρίς τη διενέργεια δειγματοληψιών αλλά με την παρακολούθηση της εκπομπής ακτινοβολίας γάμμα.

### 4.2.1 Περιγραφή πειράματος

Το ραδιοϊσότοπο που επιλέχτηκε ήταν το ιώδιο-131, του οποίου η μάζα και συγκέντρωση στο εισπιοσθέν διάλυμα παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.2. Η εισπίεση του διαλύματος όγκου 5,54m<sup>3</sup> έγινε μέσω ενός πηγαδιού στη θέση TL-25 (Σχήμα 4.1), σε κατακόρυφο διάστημα ίσο με 8m και εντός χρονικής περιόδου ίσης με 6,5 ώρες. Επειδή το κατακόρυφο διάστημα εισπίεσης είναι μεγάλο, η πηγή

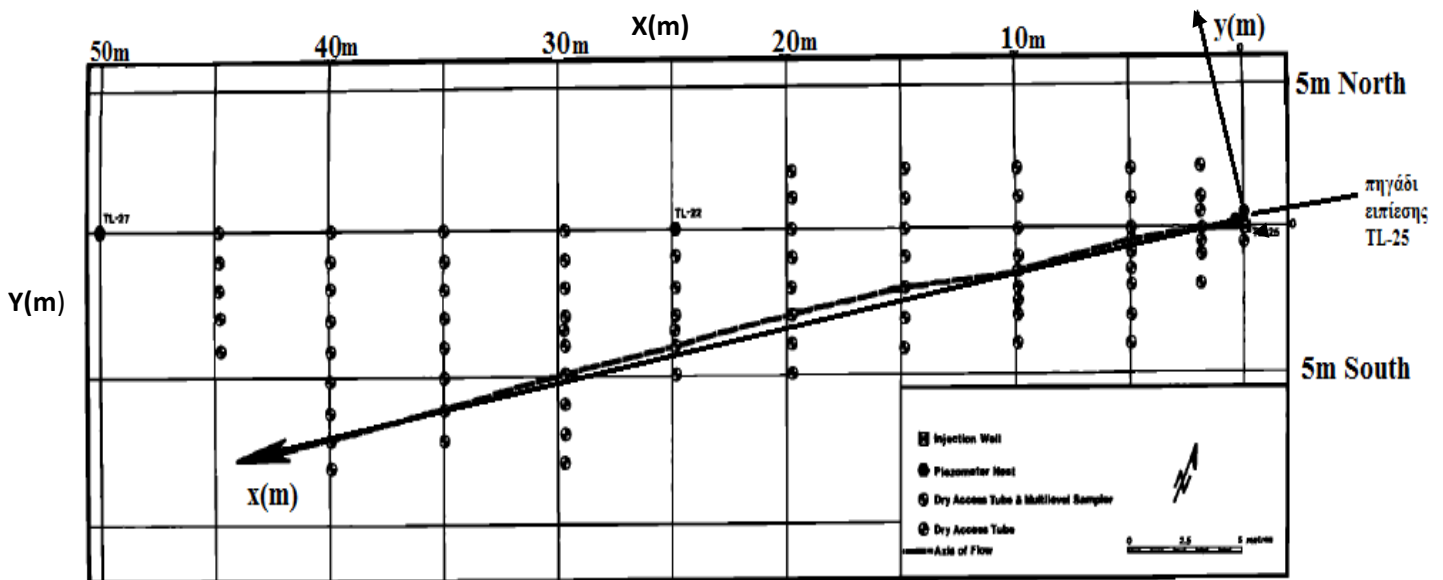
#### Κεφάλαιο 4: Στιγμαία έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή

προσομοιώθηκε ως παραλληλεπίπεδη, όπως θα συζητηθεί αναλυτικά στην Ενότητα 4.2.2.2. Τέλος, η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω δικτύου παρακολούθησης εκπομπής ακτίνων γάμμα, η κάτοψη του οποίου παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.1.

**Πίνακας 4.2 Η εισπιεσθείσα ουσία και η ποσότητά της στο διάλυμα του πρώτου πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Killey και Moltyaner 1988)**

Ραδιοϊσότοπο	Εισπιεθείσα συγκέντρωση	Εισπιεθείσα μάζα
Ιώδιο-131	7,29 $\mu\text{Ci/l}$	40mCi

Το πείραμα διήρκησε 25 ημέρες στις οποίες πραγματοποιούνταν μετρήσεις ακτινοβολίας γάμμα κάθε 12 ώρες. Οι Killey και Moltyaner (1988) παρουσιάζουν τις κατανομές συγκέντρωσης του ιωδίου-131 ως προς το βάθος κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού, σε τρεις διαφορετικές χρονικές στιγμές μετά την εισπίεση (6,5, 10,1 και 13 ημέρες μετά την εισπίεση). Μία τέτοια κατανομή συγκεντρώσεων ως κλάσμα ως προς την αρχική συγκέντρωση  $C_0$  παρουσιάζεται στο Σχήμα Η.1 του παραρτήματος για την χρονική στιγμή  $t=13$  ημέρες μετά την εισπίεση.



**Σχήμα 4.1 Κάτοψη του δικτύου παρακολούθησης της εξέλιξης της ρύπανσης του πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ (Killey και Moltyaner 1988)**

#### 4.2.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Ο στόχος της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος είναι η σύγκριση των μετρημένων συγκεντρώσεων του πειράματος με τις υπολογισμένες συγκεντρώσεις από την αναλυτική εξίσωση στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από παραλληλεπίπεδη πηγή (εξίσωση (2.4)), με τη θεώρηση διαφορετικών ταχυτήτων μεταγωγής για τα δύο στρώματα της ρυπασμένης περιοχής. Αναζητούνται οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες η οριζόντια και κατακόρυφη



εξάπλωση του ιωδίου-131 από το πείραμα συμπίπτει κατά το δυνατόν με τα αποτελέσματα της αναλυτικής εξίσωσης. Οι τιμές αυτές των συντελεστών μηχανικής διασποράς θα αναζητηθούν αρχικά από εμπειρικές σχέσεις (την απλή σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και την σχέση των Xu και Eckstein 1995). Εάν το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης δεν επιτευχθεί με τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις, τότε θα πραγματοποιηθούν δοκιμές μέχρι τη σύγκλιση των κατανομών. Τέλος, σημειώνεται ότι, όπως στα πειράματα του Κεφαλαίου 3, δεν πραγματοποιείται απόπειρα διαχωρισμού του είδους των ανομοιογενειών (στη μικροκλίμακα ή μακροκλίμακα) που συνεισφέρουν στο φαινόμενο της διασποράς.

#### 4.2.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης για το ιώδιο-131

Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης επιλέγεται το σύστημα αξόνων  $(x, y, z)$ , η κάτοψη του οποίου παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.1. Ο άξονας  $x$  ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού και η αρχή του συστήματος αξόνων αντιστοιχεί, όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1.2, στο κέντρο μάζας της παραλληλεπίπεδης πηγής. Η αρχή του συστήματος αξόνων  $(x, y, z)$  βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=0, Y=0, Z=148\text{m}$  (όπου η συντεταγμένη  $Z$  μετρά στάθμη πάνω από τη θάλασσα). Η συντεταγμένη  $Z$  αντιστοιχεί στο μέσο όρο του διαστήματος εισπίεσης (από 144 έως 152m) που παρουσιάζεται στο Σχήμα Η.1.

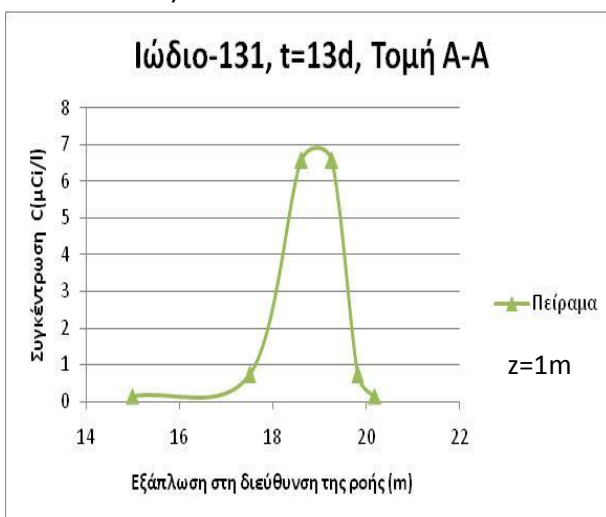
Στο Σχήμα Η.1 παρατηρείται ότι το πάνω μέρος της ρυπασμένης περιοχής από ιώδιο-131 κινείται πιο γρήγορα από το κάτω μέρος της. Πέρα από τη σαφή χρονική καθυστέρηση, το κάτω τμήμα της ρυπασμένης περιοχής παρουσιάζει μεγαλύτερη εξάπλωση από το πάνω. Οι διαφορές αυτές αποδίδονται από τους Killee και Moltzaner στη στρωμάτωση του υδροφορέα. Επομένως, οι κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διαμήκη διεύθυνση από το πείραμα (Σχήμα 4.2α,β) προκύπτουν από το Σχήμα Η.1, με τις Τομές Α-Α και Β-Β σε αντιπροσωπευτικά επίπεδα στα δύο στρώματα της ρυπασμένης περιοχής. Σημειώνεται ότι οι κατανομές του Σχήματος Η.1 δίνονται ως λόγος συγκεντρώσεων  $C/C_0$ . Αντίθετα, οι κατανομές του Σχήματος 4.2α,β, που προκύπτουν από τις Τομές Α-Α και Β-Β, έχουν μετατραπεί σε συγκεντρώσεις  $C(\mu\text{Ci/l})$ , πολλαπλασιάζοντας τους λόγους  $C/C_0$  με την εισπιασθείσα συγκέντρωση  $C_0=7,29\mu\text{Ci/l}$  (Πίνακας 4.2).

Οι αντίστοιχες κατανομές από την αναλυτική εξίσωση προκύπτουν από την εφαρμογή της κατά μήκος του άξονα  $x$ , σε κατακόρυφες αποστάσεις από το κέντρο μάζας της πηγής ίσες με  $z=1\text{m}$  και  $z=3,8\text{m}$  αντίστοιχα και για διαφορετικές τιμές της ταχύτητας μεταγωγής  $v_x$  για κάθε στρώμα. Συγκεκριμένα, η κατανομή του Σχήματος 4.2α θα προσομοιωθεί για την μέγιστη τιμή της ταχύτητας μεταγωγής του Πίνακα 4.1 ( $v_x=1,382\text{m/d}$ ) και η κατανομή του Σχήματος 4.2β για την μέση τιμή ( $v_x=0,935\text{m/d}$ ).

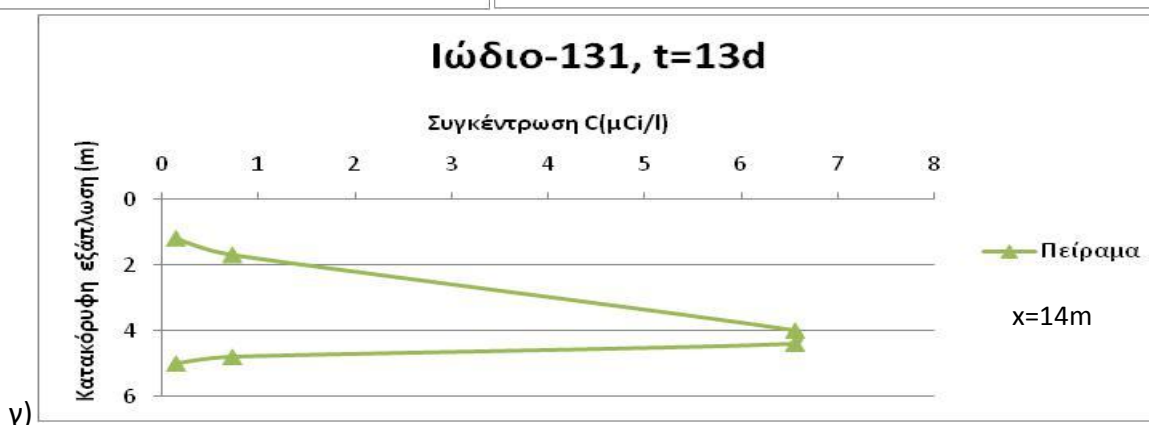
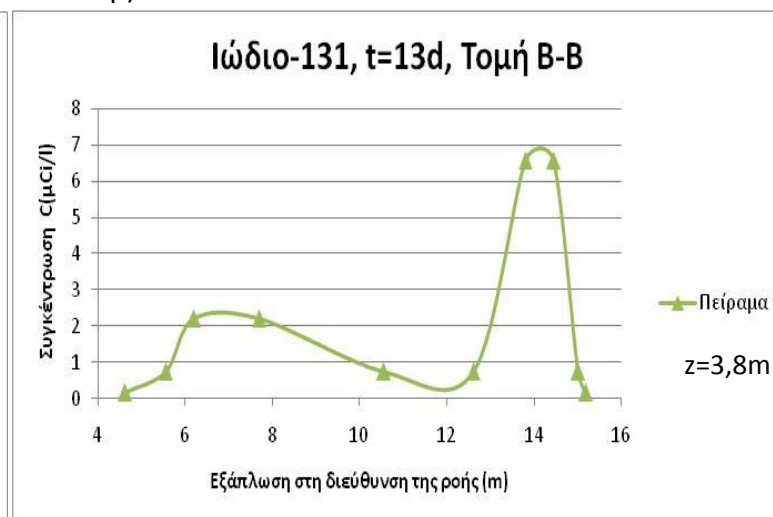
#### Κεφάλαιο 4: Στιγμαία έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλεπίπεδη πηγή

Παράλληλα, η κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά την εγκάρσια κατακόρυφη διεύθυνση (Σχήμα 4.2γ) από το πείραμα προκύπτει από το Σχήμα Η.1 με την Τομή C-C, στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας  $x=14\text{m}$ , πολλαπλασιάζοντας τους λόγους  $C/C_0$  με την εισπνευσθείσα συγκέντρωση  $C_0=7,29\mu\text{Ci/l}$  του Πίνακα 4.2. Η αντίστοιχη κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης προκύπτει από την εφαρμογή της στο σημείο του άξονα  $x$  όπου έγινε η Τομή C-C, για μηδενική οριζόντια εγκάρσια απόσταση από την πηγή ( $y=0$ ) και για τιμή της ταχύτητας μεταγωγής  $v_x=0,935\text{m/d}$ , που αντιστοιχεί στο λογαριθμικό μέσο των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας που προέκυψαν από τις μετρήσεις σε γεωτρήσεις (Πίνακας 4.1).

α)



β)



Σχήμα 4.2 Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 13 ημέρες μετά την εισπίεση, στους άξονες  $x$  (α),  $y$  (β) και  $z$  (γ)

Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 από το πείραμα (Σχήμα 4.2) και την αναλυτική εξίσωση συγκρίνονται ως προς δύο κύρια χαρακτηριστικά: την μέγιστη συγκέντρωση και το εύρος τους κατά τη διαμήκη και εγκάρσια κατεύθυνση. Η σύγκριση της έκτασης της ρύπανσης γίνεται για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης, που είναι ίση με  $0,146\mu\text{Ci/l}$ , που αντιστοιχεί σε λόγο συγκέντρωσης  $C/C_0$  (όπου  $C_0=7,29\mu\text{Ci/l}$ ) ίσο με  $0,02$ .

#### 4.2.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για το ιώδιο-131

Κατά τους Killely και Moltzner (1988), ιδανικά, η προσομοίωση της εισπίεσης θα είχε γίνει για συνοριακή συνθήκη κυλινδρικής πηγής διαμέτρου 2,25m (εξάπλωση στο τέλος της εισπίεσης) και ύψους ίσου με 8m, όμως τέτοια αναλυτική σχέση δεν υπάρχει. Για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου (εξίσωση (2.4)), θεωρείται προσεγγιστικά παραλληλεπίπεδη πηγή με τετραγωνική βάση διαστάσεων  $X_{\pi}=Y_{\pi}=2,25\text{m}$  και ύψος ίσο με  $Z_{\pi}=8\text{m}$ . Η συγκέντρωση  $C_0$  εντός του παραλληλεπιπέδου τη χρονική στιγμή  $t=0$ , όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1.2, είναι ίση με το λόγο της μάζας του ιωδίου-131 που εισπιάστηκε (Πίνακας 4.2) προς το γινόμενο του όγκου του παραλληλεπιπέδου με το πορώδες (Πίνακας 4.1), δηλαδή  $C_0=M/(nX_{\pi}Y_{\pi}Z_{\pi})$ . Εφόσον η μάζα εντός του παραλληλεπιπέδου είναι ομοιόμορφα κατανομημένη, τότε η συγκέντρωση  $C_0$  είναι ίση 2,42  $\mu\text{Ci/l}$ .

Επίσης για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης απαιτούνται οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα, οι συντελεστές μηχανικής διασποράς, ο συντελεστής διάχυσης καθώς και δεδομένη υστέρηση του ιωδίου-131. Οι υδρογεωλογικές παράμετροι (ταχύτητες μεταγωγής  $v_x$ ) παρουσιάζονται στο Πίνακα 4.1 (Ενότητα 4.2.2.1). Παράλληλα, όπως και για τα προηγούμενα πειράματα μεταφοράς στο Μπόρντεν, στο Κέιπ Κοντ και στο Κολόμπους (Κεφάλαιο 3), ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e=D_{\delta}\omega$  λαμβάνεται ίσος με  $0,6 \times 10^{-4} \text{m}^2/\text{d}$ . Τέλος, το ιώδιο-131 παρά τη μικρή ρόφηση που παρουσιάζει μπορεί να θεωρηθεί ιχνηθέτης. Αυτό προέκυψε από το δεύτερο πείραμα μεταφοράς στο Τουίν Λέικ κατά τα οποία εισπιάστηκε και τρίτο το οποίο είναι γνωστός ιχνηθέτης. Από τη σύγκριση των καμπυλών συγκέντρωσης-χρόνου για το τρίτο και το ιώδιο-131 προέκυψε ότι η διαφορά των δύο καμπυλών αντιπροσωπεύει λιγότερο από 1% απόκλιση των ταχυτήτων μεταγωγής τους (Killely και Moltzner 1988). Επομένως, θεωρείται συντελεστής υστέρησης  $R$  για το ιώδιο-131 ίσος με 1.

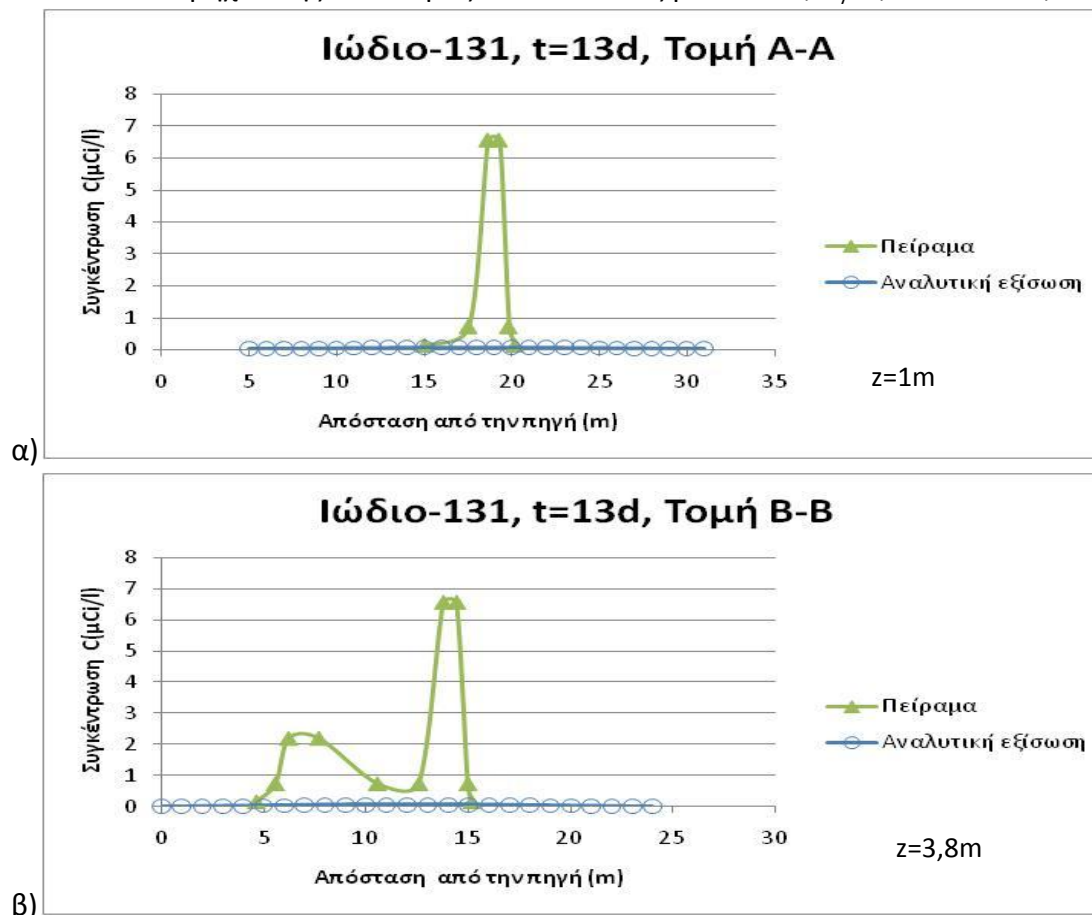
Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς με εμπειρικές σχέσεις. Χρησιμοποιήθηκε η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  καθώς και η σχέση  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  των Xu και Eckstein (1995). Παράλληλα, για τον λόγο  $\alpha_y/\alpha_x$  ελέγχθηκε η τιμή 1/10 (Gelhar et al. 1992) και για τον λόγο  $\alpha_z/\alpha_x$  ελέγχθησαν δύο τιμές που είναι ίσες με 1/10 και 1/100 (Gelhar et al. 1992). Οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς είναι αυτές για τις οποίες επιτυγχάνεται το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα του εύρους των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης.

#### 4.2.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για το ιώδιο-131

##### α) εμπειρικός κανόνας $\alpha_x=0,1x$

Αρχικά ο υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς θα γίνει χρησιμοποιώντας την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ . Από το Σχήμα Η.1, μετρώντας κατά μήκος του άξονα  $x$  παρατηρείται ότι μετά από 13 μέρες από την έναρξη του

πειράματος, η ελάχιστη μετρούμενη τιμή συγκέντρωσης (αντιστοιχεί σε λόγο  $C/C_0$  ίσο με 0,02, όπου  $C_0=7,29\mu\text{Ci/l}$ ) του ιωδίου-131 έχει φτάσει σε απόσταση περίπου ίση με 20m. Ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος 0,1 (Gelhar et al., 1992) και ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  λαμβάνεται επίσης ίσος με 0,1. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=2\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,2\text{m}$  και  $\alpha_z=0,2\text{m}$ .



Σχήμα 4.3 Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής  $z=1\text{m}$  (α) και  $z=3,8\text{m}$  (β) και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2\text{m}$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,2\text{m}$

Για τις παραπάνω τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς παρατηρείται ότι η μέγιστη συγκέντρωση των αναλυτικών κατανομών είναι της τάξεως των  $0,06\mu\text{Ci/l}$  και είναι μικρότερη από την ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση των κατανομών του πειράματος ( $0,146\mu\text{Ci/l}$ ). Έτσι το εύρος των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 4.3 δεν καθίσταται συγκρίσιμο.

Με την μείωση του λόγου  $\alpha_z/\alpha_x$  σε 0,01, η μέγιστη συγκέντρωση των αναλυτικών κατανομών αυξάνεται σε  $0,08\mu\text{Ci/l}$ , αλλά παραμένει μικρότερη από την ελάχιστη αναφερόμενη συγκέντρωση των κατανομών του πειράματος.

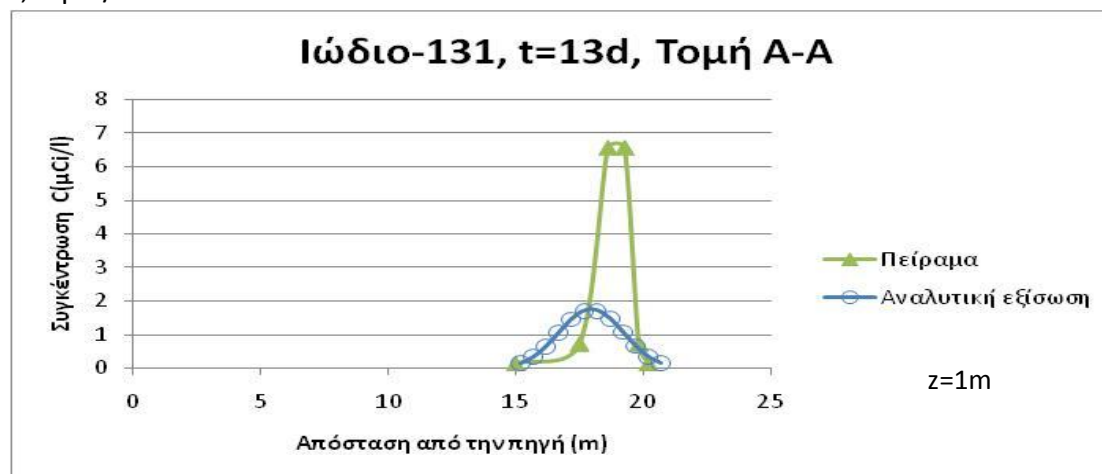
β) εμπειρική σχέση  $X_u$  και Eckstein (1995)

Από την εφαρμογή της σχέσης των  $X_u$  και Eckstein (1995) για την εκτίμηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, προκύπτει  $\alpha_x=1,57\text{m}$ , που έχει πολύ μικρή διαφορά από την τιμή που προέκυψε από την εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ .

#### 4.2.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για το ιώδιο-131

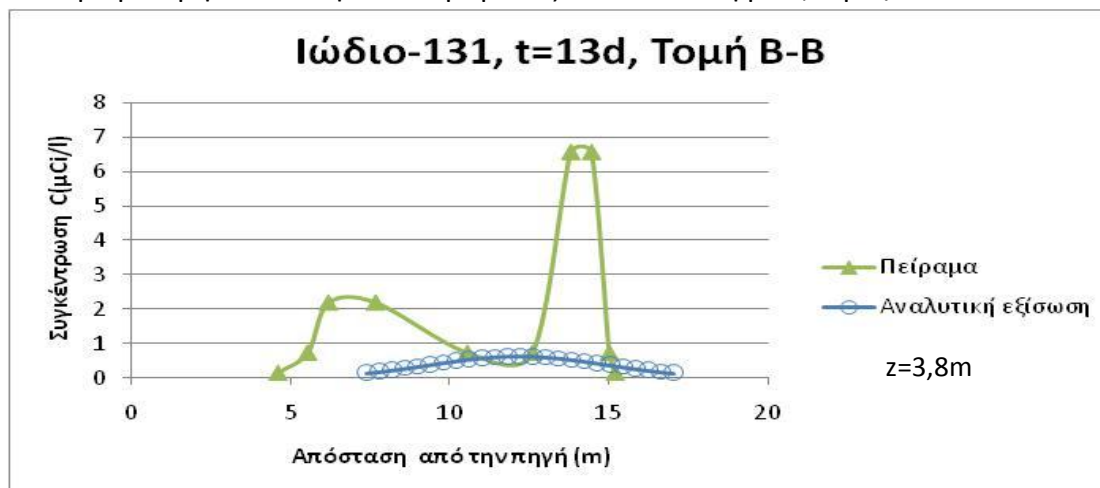
Το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται για διαφορετικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, για τα δύο στρώματα της ρυπασμένης περιοχής. Συγκεκριμένα, το καλύτερο ταίριασμα του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, σε βάθος  $z=1\text{m}$  από το κέντρο μάζας της πηγής, επιτυγχάνεται για τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς ίση με  $\alpha_x=0,03\text{m}$ . Αντίστοιχα, το καλύτερο, κατά το δυνατόν, ταίριασμα των αναλυτικών και πειραματικών κατανομών, σε βάθος  $z=3,8\text{m}$  από το κέντρο μάζας της πηγής, επιτυγχάνεται για τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς, μίας τάξης μεγέθους μεγαλύτερη, δηλαδή ίση με  $\alpha_x=0,3\text{m}$ . Παράλληλα, οι τιμές του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για τις οποίες επιτυγχάνεται η καλύτερη σύγκλιση των κατανομών είναι ίσες με το  $1/20$  των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς. Τέλος, οι τιμές του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για τις οποίες επιτυγχάνεται η σύγκλιση των κατανομών είναι ίσες με το  $1/200$  των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που για το βάθος  $z=1\text{m}$  είναι ίσες με  $\alpha_x=0,03\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,0015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,00015\text{m}$  και για το βάθος  $z=3,8\text{m}$  είναι ίσες με  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,015\text{m}$  και  $\alpha_z=0,0015\text{m}$ .

Για τις παραπάνω τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς, οι κατανομές του Σχήματος 4.4 συγκρίνονται ικανοποιητικά ως προς το εύρος τους, καθώς η διαφορά του είναι ίση με  $0,5\text{m}$ . Συγκεκριμένα, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με  $5\text{m}$ , ενώ η αναλυτική κατανομή έχει εύρος ίσο με  $5,5\text{m}$ . Αντίθετα, μεγάλη διαφορά ( $4,84\mu\text{Ci/l}$ ) έχουν οι μέγιστες τιμές των κατανομών, όπου η μέγιστη τιμή της αναλυτικής κατανομής είναι ίση με  $6,56\mu\text{Ci/l}$  και της πειραματικής είναι ίση με  $1,72\mu\text{Ci/l}$ .



Σχήμα 4.4 Κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής  $z=1\text{m}$  και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,03\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,0015$  και  $\alpha_z=0,00015$

Παράλληλα, οι κατανομές του Σχήματος 4.5 συγκλίνουν ικανοποιητικά ως προς το εύρος τους που διαφέρει κατά 1m. Συγκεκριμένα, η αναλυτική κατανομή έχει εύρος ίσο με 9,6m, ενώ η πειραματική κατανομή έχει εύρος ίσο με 10,6m. Αντίθετα, η μέγιστη τιμή της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης ισούται με 0,62μCi/l και είναι πολύ μικρότερη από αυτή του πειράματος που είναι ίση με 6,56μCi/l.



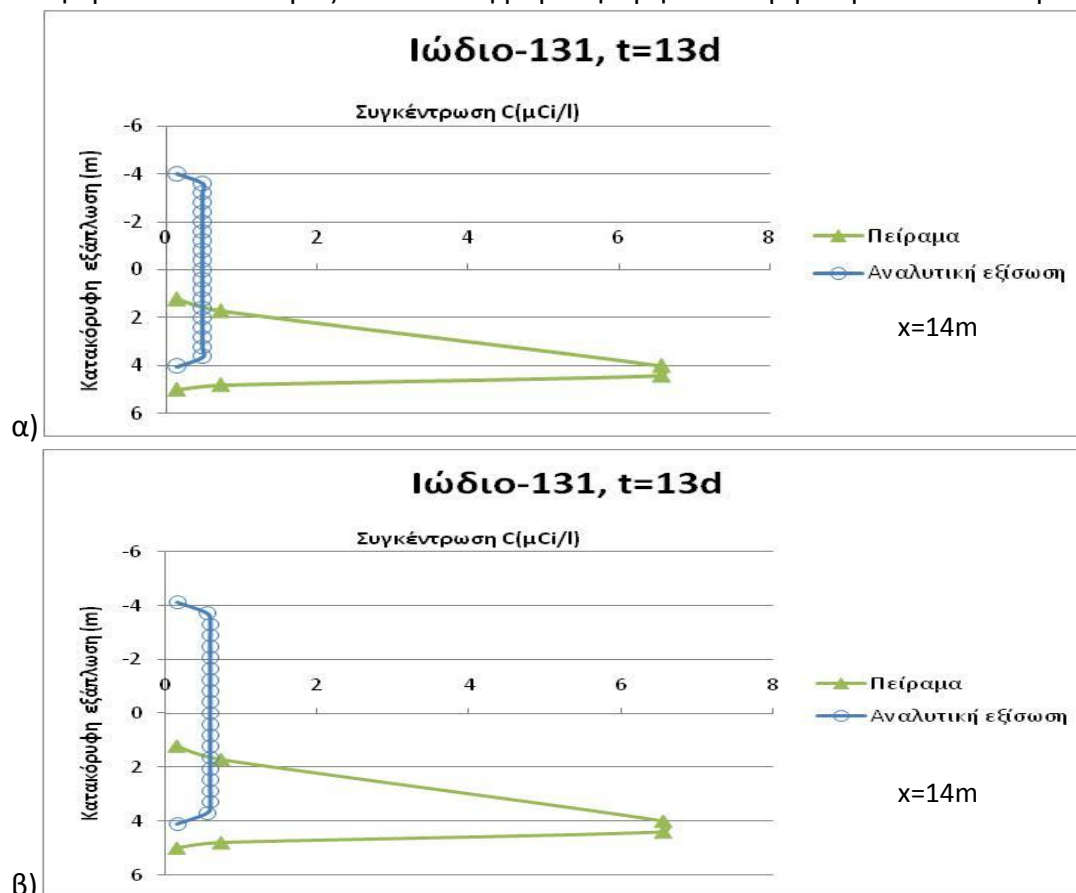
**Σχήμα 4.5** Κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα x, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής  $z=3,8m$  και για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,015$  και  $\alpha_z=0,0015$

Τέλος, στα Σχήματα 4.4 και 4.5, παρατηρείται ότι η καθυστέρηση της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης είναι πολύ μικρή και οι μέγιστες τιμές των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης βρίσκονται περίπου στην ίδια απόσταση από την πηγή. Επομένως, ο ορισμός διαφορετικών ταχυτήτων μεταγωγής για την προσομοίωση των δύο κατανομών υποστηρίζεται από τα αποτελέσματα (Ενότητα 4.2.2.1).

Στο Σχήμα 4.6 παρουσιάζονται οι κατανομές των συγκεντρώσεων κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες προέκυψε το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών των Σχημάτων 4.4 και 4.5. Στο Σχήμα 4.6α, το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 8,08m και η μέγιστη τιμή είναι ίση με 0,48μCi/l. Αντίστοιχα, στο Σχήμα 4.6β, το εύρος της αναλυτικής κατανομής είναι ίσο με 8,24m και η μέγιστη τιμή της είναι ίση με 0,59μCi/l. Τέλος, το εύρος της κατανομής του πειράματος στο Σχήμα 4.6 είναι ίσο με 3,8m και η μέγιστη τιμή της είναι ίση με 6,56μCi/l.

Στο χρονικό και χωρικό πλαίσιο του πειράματος, η συγκέντρωση στην πηγή  $C_0=2,42\mu Ci/l$  ύψους 8m, δεν φτάνει κάτω από την ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης ( $C=0,146\mu Ci/l$ ) στο εύρος της πηγής. Ένα στοιχείο που θα πρέπει να τονιστεί είναι ότι λόγω της κατακόρυφης κίνησης του υπόγειου νερού κοντά στο πηγάδι εισπίεσης (έως απόσταση 5m από αυτό), η μάζα που εισπιάστηκε πάνω από τα 150m κινήθηκε προς τα κάτω (Killley και Molyaner 1988). Λόγω της κατακόρυφης αυτής κίνησης,

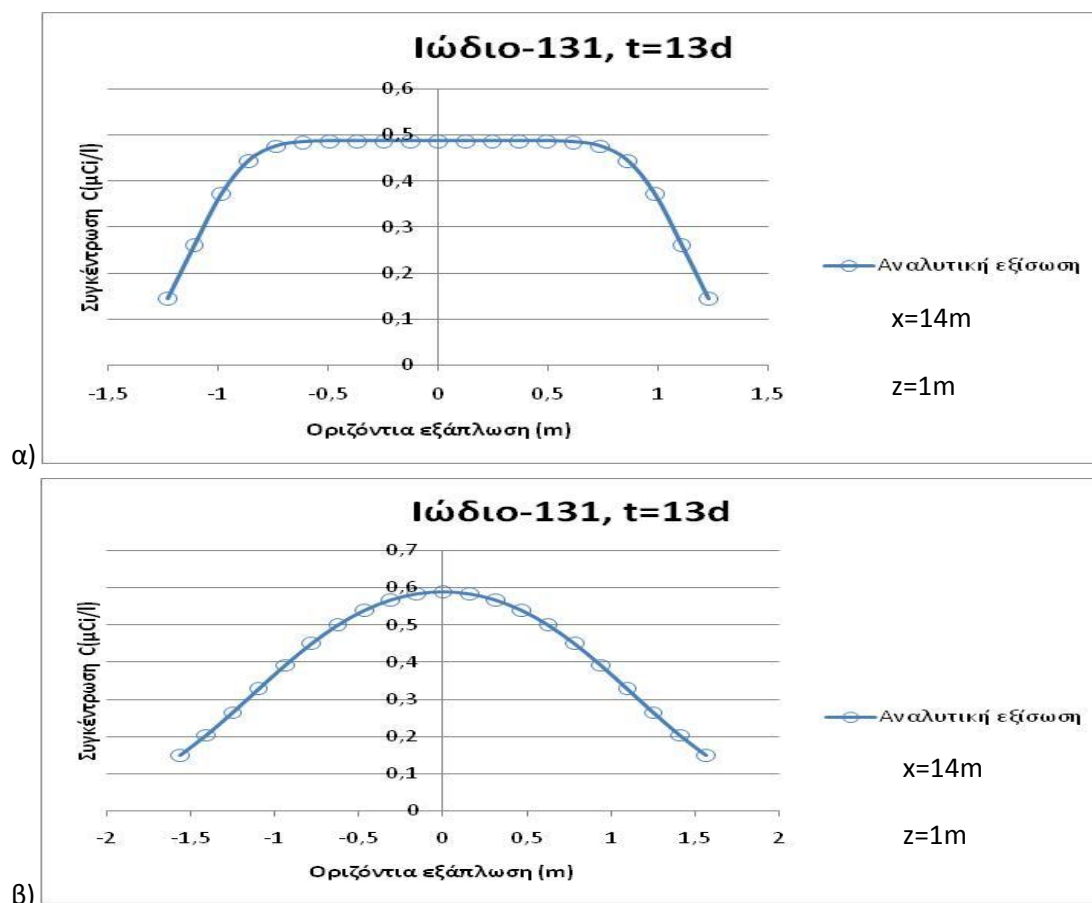
την οποία δεν μπορεί να προσομοιώσει η αναλυτική εξίσωση δημιουργείται μεγάλη διαφορά τόσο στο εύρος όσο και στη μέγιστη τιμή των συγκρινόμενων κατανομών.



Σχήμα 4.6 Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,03m$ ,  $\alpha_y=0,0015$  και  $\alpha_z=0,00015m$  (α) και  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,015$  και  $\alpha_z=0,00015m$  (β)

Εφόσον δεν υπάρχει κατανομή των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα γ από το πείραμα, δεν υπάρχει εικόνα για την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του. Εφαρμόζεται η αναλυτική εξίσωση στην ίδια απόσταση από την πηγή (σημείο του άξονα x) από την οποία προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 4.6 και σε βάθος από το κέντρο μάζας της πηγής ίσο με  $z=1m$ . Οι κατανομές των συγκεντρώσεων κατά την διεύθυνση του άξονα γ από την αναλυτική εξίσωση, για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες προέκυψε η σύγκλιση του εύρους των κατανομών των Σχημάτων 4.4 και 4.5, παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.7.

Το εύρος της καμπύλης του Σχήματος 4.7α είναι ίσο με 2,46m και η μέγιστη τιμή της ισούται με 0,48μCi/l. Αντίστοιχα, το εύρος της αναλυτικής καμπύλης του Σχήματος 4.7β είναι ίσο με 3,12m και η μέγιστη τιμή της ισούται με 0,58μCi/l. Τονίζεται ότι η ελάχιστη τιμή των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 4.7 είναι ίση με 0,146μCi/l, όπως και στις κατανομές του Σχήματος 4.6.



Σχήμα 4.7 Κατανομές των συγκεντρώσεων του ιωδίου-131 κατά τη διεύθυνση του άξονα γ, από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,03m$ ,  $\alpha_y=0,0015$  και  $\alpha_z=0,00015m$  (α) και  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,015$  και  $\alpha_z=0,0015m$  (β)

#### 4.2.2.5 Συμπερασματικά σχόλια

Από την προσομοίωση του πειράματος με την χρήση της αναλυτικής εξίσωσης στιγμιαίας έκλυσης ρύπου από παραλληλεπίπεδη πηγή (εξίσωση (2.4)) προέκυψαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 4.3. Λόγω της οριζόντιας στρωμάτωσης του υδροφορέα, παρατηρήθηκε ότι το πάνω μέρος της ρυπασμένης περιοχής από ιώδιο-131 κινήθηκε πιο γρήγορα από το κάτω μέρος της (Σχήμα Η.1). Γι'αυτό επιλέγησαν δύο τιμές της ταχύτητας μεταγωγής  $v_x$ , για την προσομοίωση των κατανομών του πειράματος σε αντιπροσωπευτικά σημεία του πάνω και κάτω μέρους της ρυπασμένης περιοχής. Η επιλογή δύο τιμών της ταχύτητας μεταγωγής υποστηρίζεται από τα αποτελέσματα, καθώς η μέγιστη τιμή των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης βρίσκεται στην ίδια περίπου απόσταση από την πηγή με τη μέγιστη τιμή των αντίστοιχων κατανομών του πειράματος. Παρόλα αυτά, δεν κατέστη δυνατή η σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης και στα δύο στρώματα, με την ίδια τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς. Επομένως, υπολογίστηκε μέγιστη διασπορά στο στρώμα μικρή ταχύτητας μεταγωγής, ώστε να επιτευχθεί το ταίριασμα του εύρους των αναλυτικών και πειραματικών κατανομών.



Τέλος, λόγω της κατακόρυφης κίνησης της μάζας του ιωδίου-131 που εισπιάστηκε πάνω από τα 150m (στάθμη πάνω από την επιφάνεια της θάλασσας), την οποία δεν μπορεί να προσομοιώσει η αναλυτική εξίσωση, δημιουργείται μεγάλη διαφορά τόσο στο εύρος όσο και στη μέγιστη τιμή των συγκρινόμενων κατανομών κατά την κατακόρυφη εγκάρσια διεύθυνση, για ύψος πηγής  $Z_{\pi}=8\text{m}$ . Οι Moltaner και Killey (1988) εφαρμόζοντας την ίδια εξίσωση (2.4), κατέληξαν ότι η σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται για ύψος πηγής  $Z_{\pi}$  μικρότερο από 3m.

**Πίνακας 4.3 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του πρώτου πειράματος μεταφοράς στο Τουίν Λέικ**

<u>Παράμετρος</u>	<u>Τιμή</u>
<b><u>Στρώμα μεγάλης ταχύτητας μεταγωγής (<math>v_x=1,382\text{m/d}</math>)</u></b>	
Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(\text{m})$	0,03
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(\text{m})$	0,0015
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(\text{m})$	0,00015
<b><u>Στρώμα μικρής ταχύτητας μεταγωγής (<math>v_x=0,935\text{m/d}</math>)</u></b>	
Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(\text{m})$	0,3
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(\text{m})$	0,015
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(\text{m})$	0,0015

## Κεφάλαιο 5 Έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης

### 5.1 Τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους, Μισισίπι, ΗΠΑ

Τον Δεκέμβριο 1995 ξεκίνησε το τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) στον υδροφορέα των εγκαταστάσεων ερευνών της αεροπορικής βάσης του Κολόμπους, στο Βορειοδυτικό Μισισίπι (MADE site). Τα γεωλογικά και υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά του υδροφορέα παρουσιάστηκαν στην Ενότητα 3.3.1 για το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2). Στόχος του πειράματος ήταν η μελέτη της φυσικής εξασθένησης των υδρογονανθράκων (Natural attenuation study-NATS) σε υδροφορέα που παρουσιάζει μεγάλη ανομοιογένεια. Πραγματοποιήθηκε ελεγχόμενη απελευθέρωση στην κορεσμένη ζώνη του υδροφορέα συστατικών του πετρελαίου σε μη υδατική φάση (NAPL) και στη συνέχεια έγινε παρακολούθηση της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Με βάση τα αποτελέσματα του πειράματος αξιολογήθηκαν αριθμητικά μοντέλα για την προσομοίωση της μεταφοράς διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό (Brauner και Widdowson 2001). Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης στο χώρο και στο χρόνο έγινε από το δίκτυο πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη που περιγράφηκε στην Ενότητα 3.3.2.1 για το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2).

#### 5.1.1 Περιγραφή πειράματος

Στο τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) καταγράφηκε η εξάπλωση του βρωμιόντος (ιχνηθέτης) και των οργανικών ρύπων: βενζόλιο, τολουόλιο, αιθυλοβενζόλιο, p- ξυλόλιο (BTEX) και ναφθαλίνη. Οι παραπάνω οργανικές ενώσεις, μαζί με δεκάνιο, εισήχθησαν στο έδαφος ως ένα μη υδατικό μείγμα (NAPL). Τα ποσοστά των BTEX και της ναφθαλίνης στο μείγμα αντιστοιχούν στα ποσοστά των τυπικών καυσίμων JP-4. Το ποσοστό τους κατά βάρος στη μη υδατική φάση καθώς και η διαλυτότητα και το μοριακό βάρος τους παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.1.

Το μη υδατικό μείγμα (NAPL) ανακατεύτηκε με 30m<sup>3</sup> καθαρής άμμου και στη συνέχεια τοποθετήθηκε σε τάφρο και καλύφθηκε με εδαφικό υλικό του υδροφορέα. Στο μείγμα υδρογονανθράκων της πηγής προστέθηκε διάλυμα βρωμίου το οποίο λειτούργησε ως ιχνηθέτης του πειράματος. Οι πασσαλοσανίδες που είχαν τοποθετηθεί στα τοιχώματα της τάφρου ώστε να εξασφαλιστεί ο υδραυλικός έλεγχος, αφαιρέθηκαν ώστε να επιτραπεί η ροή του υπόγειου νερού και η σταδιακή διάλυση των ρύπων της μη υδατικής φάσης.

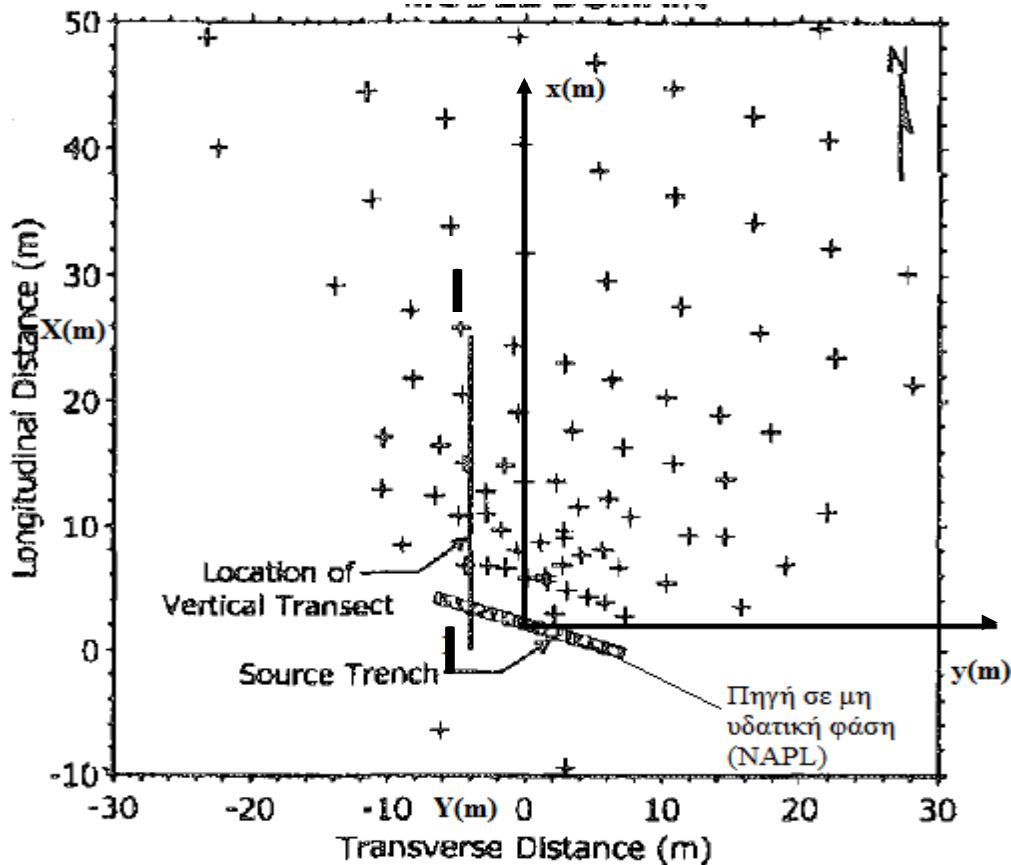
Η παρακολούθηση της εξέλιξης της ρύπανσης έγινε μέσω του δικτύου πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling-MLS) που χρησιμοποιήθηκε και για την παρακολούθηση της μεταφοράς των ρύπων που

εισπρέστηκαν κατά το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (Ενότητα 3.3.2.1). Η κάτοψη της τάφρου και του δικτύου δειγματοληψίας παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.1.

Το πείραμα διήρκησε 833 ημέρες και σε αυτό το χρονικό διάστημα πραγματοποιήθηκαν 7 επεισόδια δειγματοληψίας, ξεκινώντας από τη χρονική στιγμή των 40 ημερών μετά την έναρξη του πειράματος. Οι Brauner και Widdowson (2001) παρουσιάζουν τις κατανομές των μετρημένων συγκεντρώσεων του βενζολίου, τολουολίου, αιθυλοβενζολίου, p-ξυλολίου και της ναφθαλίνης σε δύο χρονικές στιγμές μετά την έναρξη του πειράματος (στις χρονικές στιγμές t=5 και t=9 μήνες). Οι παραπάνω κατανομές των συγκεντρώσεων προέκυψαν από κατακόρυφη τομή στη ρυπασμένη περιοχή, σε απόσταση 4m δυτικά του μέσου της πηγής (Τομή I-I, Σχήμα 5.1). Δύο τέτοιες κατανομές παρουσιάζονται στο Σχήμα Θ.1 (παράρτημα), για το p-ξυλόλιο και τη ναφθαλίνη, τη χρονική στιγμή t= 278 ημέρες μετά την έναρξη του πειράματος.

**Πίνακας 5.1** Σύνθεση και χημικές ιδιότητες των συστατικών στο οργανικό μείγμα του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους (Brauner και Widdowson 2001)

Συστατικό μη υδατικής φάσης (NAPL)	Διαλυτότητα καθαρού ρύπου $S_i$ (mg/l) (1)	Μοριακό βάρος (g/mol) (2)	Ποσοστό στη μη υδατική φάση (κατά βάρος) (3)	Ποσοστό στο μείγμα σε όρους mol (g/mol) (4)=(3)/(2)	Μοριακό κλάσμα $x_{in}$ (6)=(4)/(5)	Ενεργή διαλυτότητα (mg/l) $Se^i$ (7)=(1)×(6)
Βενζόλιο	1790	78,1	0,05	0,00064	0,0008	1,494
Τολουόλιο	500	92,1	6,6	0,07166	0,0935	46,727
Αιθυλοβενζόλιο	165	106,7	7,1	0,06654	0,0868	14,318
P-ξυλόλιο	185	106,7	6,9	0,06467	0,0843	15,602
Ναφθαλίνη	34	128,3	7,8	0,06080	0,0793	2,698
Δεκάνιο	0,009	142,3	71,5	0,50246	0,6553	0,006
<b>Σύνολο</b>			99,95	0,76677 (5)	1	80,845



Σχήμα 5.1 Κάτοψη του δικτύου δειγματοληψίας και της τάφρου του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους (Brauner και Widdowson 2001)

### 5.1.2 Προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος

Για την προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος θα χρησιμοποιηθεί η ημιαναλυτική εξίσωση συνεχούς έκλυσης ρύπου από πηγή σταθερής έντασης ορθογωνικού σχήματος (εξίσωση (2.8)). Θεωρείται μεταγωγή του διαλυμένου ρύπου μόνο κατά τη θετική διεύθυνση του άξονα  $x$  και εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής τόσο κατά τη θετική όσο και κατά την αρνητική διεύθυνση των εγκάρσιων αξόνων. Επίσης θεωρείται γραμμική ρόφηση και υποβάθμιση πρώτης τάξης τόσο στην στερεά όσο και στην υδατική φάση με τον ίδιο ρυθμό  $\lambda$ . Ο στόχος της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος με την παραπάνω εξίσωση είναι η σύγκριση των μετρημένων συγκεντρώσεων του πειράματος με τις υπολογισμένες συγκεντρώσεις από την ημιαναλυτική εξίσωση. Θα αναζητηθούν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες η οριζόντια και κατακόρυφη εξάπλωση ενός από τους οργανικούς ρύπους του πειράματος συμπίπτει κατά το δυνατόν με τα αποτελέσματα της ημιαναλυτικής εξίσωσης. Σημειώνεται ότι η διαδικασία προσομοίωσης είναι διαφορετική σε σχέση με τα προηγούμενα πειράματα, καθώς λόγω της απουσίας δεδομένων για τη μεταφορά του ιχνηθέτη, η επιλογή των συντελεστών μηχανικής διασποράς έγινε με βάση την εξάπλωση ενός οργανικού ρύπου. Στη συνέχεια, για αυτές τις τιμές των

συντελεστών μηχανικής διασποράς θα συγκριθούν οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης και για έναν δεύτερο οργανικό ρύπο.

#### 5.1.2.1 Περιγραφή προσομοίωσης

Η προσομοίωση των αποτελεσμάτων του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) θεωρήθηκε σκόπιμο να γίνει για ρύπους που είχαν εισπνεστεί κατά το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους. Από το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) προέκυψαν πολύτιμα στοιχεία για την κινητικότητα και την επιμονή των ρύπων που εισπνέστηκαν. Από εργαστηριακές δοκιμές βρέθηκαν οι τιμές των συντελεστών υστέρησης  $R$  και από τη μελέτη των αποτελεσμάτων του πειράματος προέκυψαν οι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  για κάθε ρύπο. Οι τιμές των παραπάνω παραμέτρων για κάθε ρύπο από βιβλιογραφία παρουσιάζουν μεγάλη διακύμανση. Επομένως, με την χρήση των τιμών των παραμέτρων που προέκυψαν από το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2), για την προσομοίωση με την ημιαναλυτική εξίσωση των αποτελεσμάτων του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3), αυξάνεται σημαντικά η αξιοπιστία των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς που θα προκύψουν. Οι κοινοί ρύποι των δύο πειραμάτων μακροδιασποράς είναι το βενζόλιο, το  $p$ -ξυλόλιο και η ναφθαλίνη. Το βενζόλιο απορρίφθηκε επειδή οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος αποτελούνταν μόνο από μια καμπύλη ίσων συγκεντρώσεων. Επομένως επιλέχτηκαν για την προσομοίωση το  $p$ -ξυλόλιο και η ναφθαλίνη.

Για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης επιλέγεται το σύστημα αξόνων  $(x, y, z)$ , η κάτοψη του οποίου παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.1. Ο άξονας  $x$  ταυτίζεται με την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού και η αρχή του συστήματος αξόνων βρίσκεται, όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1.3, στο κέντρο της ορθογωνικής πηγής. Η αρχή του συστήματος αξόνων  $(x, y, z)$  βρίσκεται στις συντεταγμένες  $X=2, Y=0, Z=59,3\text{m}$  (Σχήμα 5.1). Η συντεταγμένη  $Z$  αντιστοιχεί στο κέντρο της κατακόρυφης διάστασης της πηγής που κυμαίνεται από 58,45 έως 60,15m.

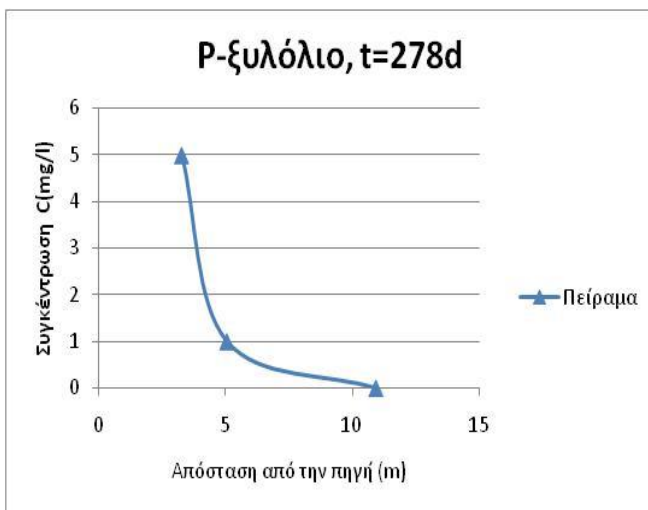
Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του  $p$ -ξυλολίου (Σχήμα 5.2α) και της ναφθαλίνης κατά τη διαμήκη διεύθυνση από το πείραμα προκύπτουν από το Σχήμα Θ.1 του παραρτήματος με τις οριζόντιες τομές A-A και B-B. Οι αντίστοιχες κατανομές από την ημιαναλυτική εξίσωση προκύπτουν από την εφαρμογή της κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$ , σε κατακόρυφη απόσταση από την αρχή των αξόνων ίση με  $z=-0,7\text{m}$  και σε οριζόντια εγκάρσια απόσταση από την αρχή των αξόνων ίση με  $y=-4\text{m}$ .

Αντίστοιχα, οι κατανομές των συγκεντρώσεων του  $p$ -ξυλολίου (Σχήμα 5.2β) και της ναφθαλίνης κατά την εγκάρσια κατακόρυφη διεύθυνση προκύπτουν από το Σχήμα Θ.1 με τις κατακόρυφες τομές C-C και D-D, στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας που βρίσκεται σε απόσταση από την πηγή ίση με  $x=5\text{m}$ . Οι αντίστοιχες κατανομές της ημιαναλυτικής εξίσωσης προκύπτουν από την εφαρμογή της στο σημείο του

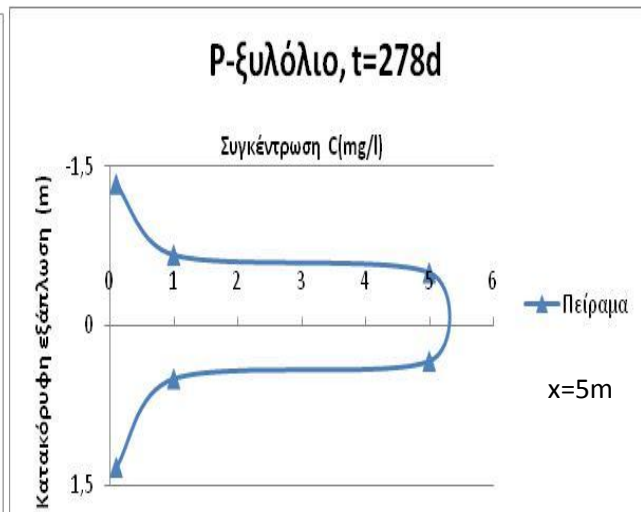
άξονα x όπου έγιναν οι τομές και για οριζόντια εγκάρσια απόσταση από την αρχή των αξόνων ίση με  $\gamma = -4\text{m}$ .

Οι παραπάνω κατανομές συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου και της ναφθαλίνης από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση συγκρίνονται ως προς την μέγιστη συγκέντρωση και το εύρος τους κατά τη διαμήκη και την εγκάρσια κατακόρυφη διεύθυνση. Η σύγκριση των κατανομών γίνεται για την ίδια ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης. Παράλληλα, στις κατανομές του Σχήματος Θ.1 δεν υπάρχει ακριβής τιμή συγκέντρωσης στο σημείο που βρίσκεται η πηγή. Επομένως η σύγκριση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης θα γίνει από το σημείο του διαμήκη άξονα για το οποίο υπάρχει ακριβής τιμή συγκέντρωσης. Στο Σχήμα 5.2α το σημείο αυτό απέχει από την πηγή απόσταση ίση με 3,25m.

α)



β)



Σχήμα 5.2 Κατανομές των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 278 ημέρες μετά την έναρξη του πειράματος, στους άξονες x (α) και z (β)

#### 5.1.2.2 Απαραίτητες παράμετροι για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης για τους οργανικούς ρύπους

Εφόσον πρόκειται για μείγμα ρύπων σε μη υδατική φάση απαιτείται ο υπολογισμός της ενεργής διαλυτότητας  $Se^i$  του p-ξυλολίου και της ναφθαλίνης, που εκφράζει την μέγιστη ποσότητα του ρύπου που μπορεί να διαλυθεί στο νερό. Για τον υπολογισμό της ενεργής διαλυτότητας απαιτείται το μοριακό κλάσμα  $x_{in}$  του κάθε ρύπου στο μη υδατικό υγρό μείγμα n. Για την εύρεση του μοριακού κλάσματος κάθε ρύπου απαιτείται η εύρεση της αναλογίας του στο μείγμα σε όρους γραμμομορίου. Αυτό προκύπτει από τη διαίρεση του ποσοστού αυτού με το μοριακό βάρος κάθε ρύπου (στήλη (2), Πίνακας 5.1) και παρουσιάζεται στην στήλη (4) του Πίνακα 5.1. Επομένως, η ενεργή διαλυτότητα προκύπτει από το γινόμενο της διαλυτότητας του καθαρού ρύπου  $S_i$  με το μοριακό κλάσμα κάθε ρύπου,  $Se^i = S_i x_{in}$  και παρουσιάζεται στη στήλη (7) του Πίνακα 5.1. Για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης για το p-ξυλόλιο και τη ναφθαλίνη η αρχική συγκέντρωση  $C_0$  θα ληφθεί ίση με την ενεργή διαλυτότά τους που παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.1.

Για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης συνεχούς έκλυσης ρύπου από πηγή σταθερής έντασης (εξίσωση (2.8)), θεωρείται ορθογωνική πηγή με πλάτος ίσο  $Y_{\pi}=13,7\text{m}$  και ύψος ίσο με  $Z_{\pi}=1,7\text{m}$ , που αντιστοιχούν στις αρχικές διαστάσεις της μη υδατικής φάσης (NAPL) από το πείραμα. Παράλληλα θεωρείται ότι η πηγή βρίσκεται κάτω από τον υδροφόρο ορίζοντα και η εξάπλωση της ρυπασμένης περιοχής γίνεται τόσο κατά τη θετική όσο και κατά την αρνητική διεύθυνση του εγκάρσιου άξονα  $z$ .

Επιπλέον, για την εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης απαιτούνται οι υδρογεωλογικές παράμετροι του υδροφορέα, οι συντελεστές μηχανικής διασποράς, ο συντελεστής διάχυσης καθώς και δεδομένη υστέρηση και υποβάθμιση πρώτης τάξης των οργανικών ρύπων. Οι υδρογεωλογικές παράμετροι (ταχύτητα μεταγωγής  $v_x$ ) παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 3.12 της Ενότητας 3.3.1 για το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους. Παράλληλα, όπως και για τη προσομοίωση του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) (Ενότητα 3.3.2.2), ο συντελεστής διάχυσης στο έδαφος  $D_e$  λαμβάνεται ίσος με  $0,6 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ .

Όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 5.1.2.1, η προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος για το  $p$ -ξυλόλιο και την ναφθαλίνη θα γίνει για τους συντελεστές υστέρησης που προέκυψαν από τις εργαστηριακές δοκιμές σε πυρήνες του υδροφορέα κατά το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2). Παράλληλα θα χρησιμοποιηθούν οι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης που προέκυψαν από την μελέτη των αποτελεσμάτων του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2). Από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης στο χώρο και τον χρόνο προέκυψαν οι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης του  $p$ -ξυλολίου που είναι ίσοι με  $0,011$  και  $0,016 \text{ d}^{-1}$  αντίστοιχα (Boggs et al. 1993). Οι αντίστοιχοι ρυθμοί μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  που προέκυψαν για τη ναφθαλίνη είναι ίσοι με  $0,007$  και  $0,013 \text{ d}^{-1}$  (Boggs et al. 1993). Η εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης για το  $p$ -ξυλόλιο θα γίνει για συντελεστή υστέρησης ίσο με  $R=1,24$  (Boggs et al. 1993) και για ρυθμό μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda$  ίσο με το μέσο όρο των τιμών που προέκυψαν από τη μελέτη της εξέλιξης της ρύπανσης στο δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2), δηλαδή για τιμή ίση με  $\lambda=0,0135\text{d}^{-1}$ . Αντίστοιχα, η εφαρμογή της ημιαναλυτικής εξίσωσης για τη ναφθαλίνη θα γίνει για συντελεστή υστέρησης ίσο με  $R=1,42$  (Boggs et al. 1993) και για ρυθμό μετασχηματισμού πρώτης τάξης  $\lambda=0,01\text{d}^{-1}$ .

Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς του  $p$ -ξυλολίου που έχει μεγαλύτερη ενεργή διαλυτότητα σε σχέση με την ναφθαλίνη, με εμπειρικές σχέσεις. Όπως και στις προηγούμενες ενότητες, πρώτα εξετάστηκε η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και η σχέση  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  των Xu και Eckstein (1995). Ομοίως, για τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς ελέγχθηκε η τιμή που ισούται με το  $1/10$  του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς (Gelhar et al. 1992). Τέλος, για τον συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας

μηχανικής διασποράς ελέγχθησαν δύο τιμές που είναι ίσες με το 1/10 και το 1/100 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς (Gelhar et al. 1992).

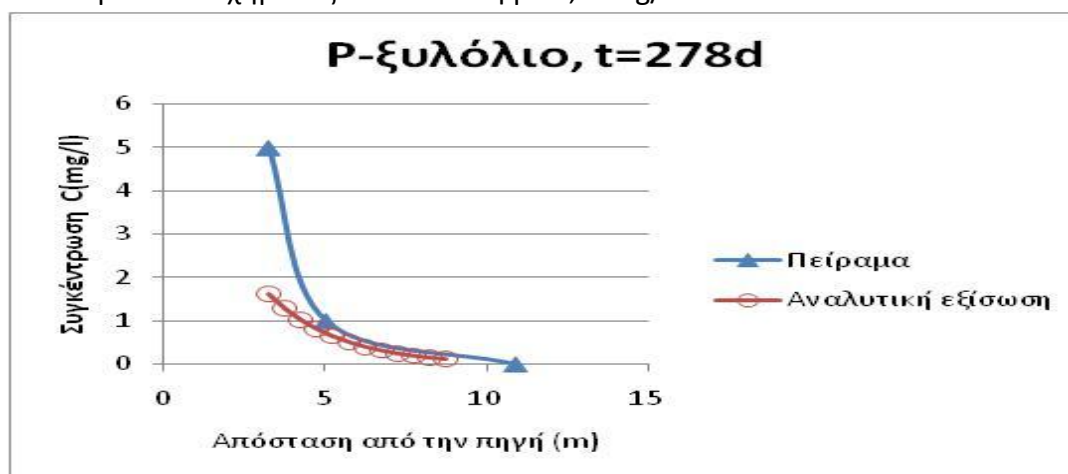
Οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς είναι αυτές για τις οποίες επιτυγχάνεται το καλύτερο κατά το δυνατόν ταίριασμα του εύρους των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης του  $\rho$ -ξυλόλιου. Εάν το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών δεν επιτευχθεί με τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προκύπτουν από τις εμπειρικές σχέσεις, τότε θα πραγματοποιηθούν δοκιμές μέχρι τη σύγκλιση των κατανομών. Στη συνέχεια, για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς συγκρίνονται οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης της ναφθαλίνης.

### 5.1.2.3 Συντελεστές μηχανικής διασποράς από εμπειρικές σχέσεις για το $\rho$ -ξυλόλιο

α) εμπειρικός κανόνας  $\alpha_x=0,1x$

Αρχικά γίνεται υπολογισμός του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς για το  $\rho$ -ξυλόλιο με την απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ . Από το Σχήμα Θ.1, παρατηρείται ότι μετά από 278 ημέρες από την έναρξη του πειράματος η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση του  $\rho$ -ξυλόλιου έχει φτάσει σε απόσταση  $L=12m$  από την πηγή. Ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  λαμβάνεται ίσος με 0,1 και ο λόγος  $\alpha_z/\alpha_x$  λαμβάνεται επίσης ίσος με 0,1. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=1,2m$ ,  $\alpha_y=0,12m$  και  $\alpha_z=0,12m$ .

Οι κατανομές του Σχήματος 5.3 δεν συγκρίνονται ικανοποιητικά μεταξύ τους καθώς η διαφορά του εύρους τους είναι ίση με 2,15m. Συγκεκριμένα η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 7,65m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 5,5m. Παράλληλα η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών του Σχήματος 5.3 είναι ίση με 3,37mg/l.

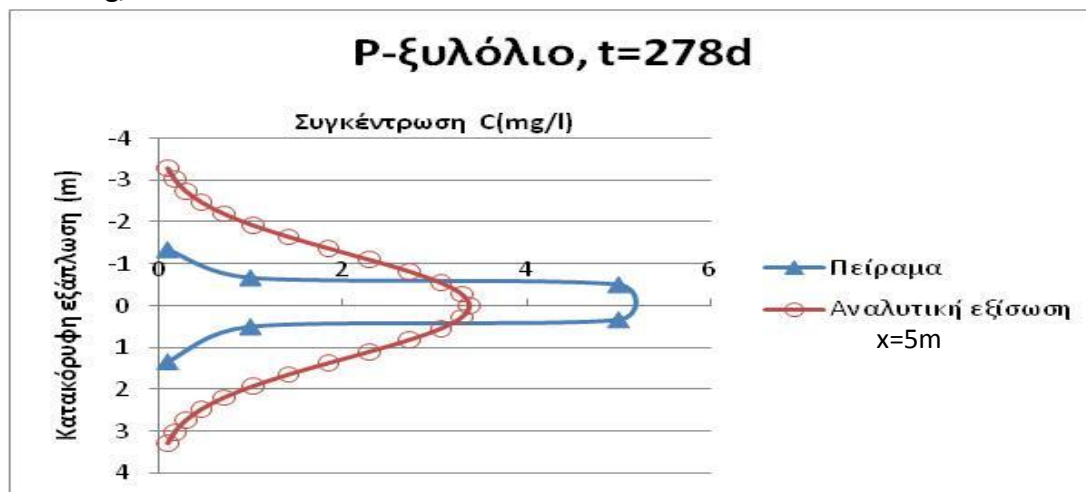


Σχήμα 5.3 Κατανομή των συγκεντρώσεων του  $\rho$ -ξυλόλιου κατά τη διεύθυνση του άξονα  $x$ , από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$

Για την επιλογή των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς συγκρίνονται και οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης κατά την

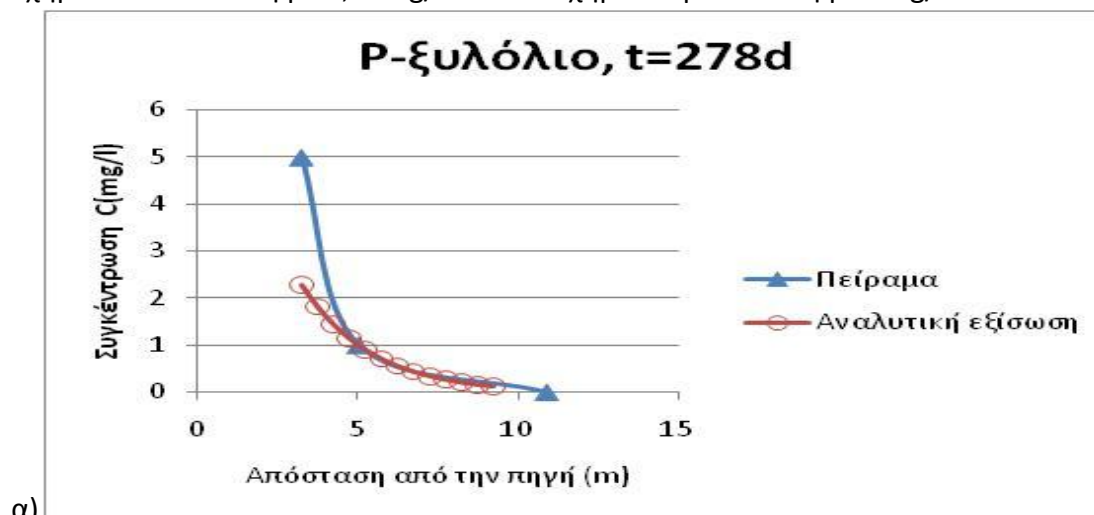


κατακόρυφη εγκάρσια διεύθυνση. Οι κατανομές του Σχήματος 5.4 δεν συγκρίνονται ικανοποιητικά ως προς το εύρος τους καθώς η διαφορά του είναι ίση με 3,94m. Συγκεκριμένα η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 2,7m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 6,6m. Παράλληλα η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών του Σχήματος 5.4 είναι μεγαλύτερη από 1,6mg/l. Η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης στο Σχήμα 5.4 έχει μέγιστη τιμή ίση με 3,4mg/l ενώ η κατανομή του πειράματος έχει μέγιστη τιμή που είναι μεγαλύτερη από 5mg/l.

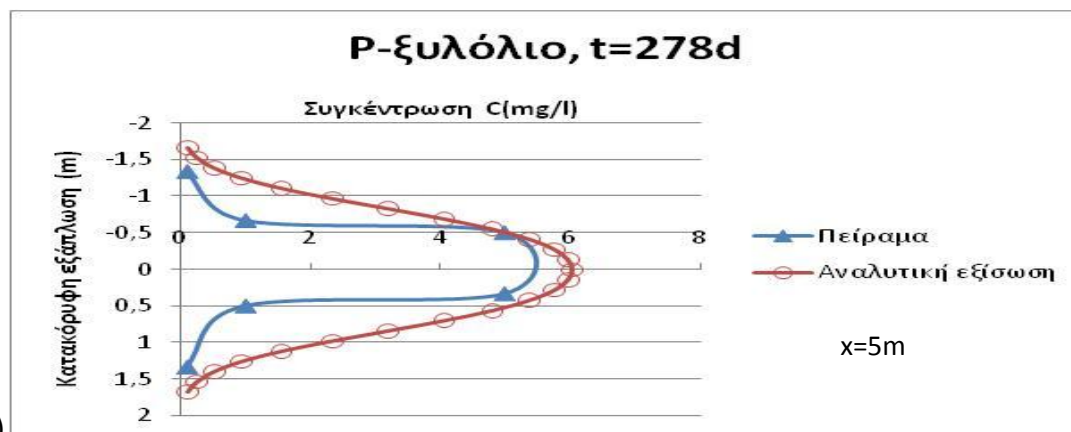


Σχήμα 5.4 Κατανομή των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα z, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$

Με την μείωση του λόγου  $\alpha_z/\alpha_x$  σε 0,01 και διατηρώντας σταθερές τις τιμές των συντελεστών διαμήκους και εγκάρσιας οριζόντιας μηχανικής διασποράς προκύπτουν οι κατανομές του Σχήματος 5.5. Με την μείωση του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 5.5α αυξήθηκε σε 6m ενώ το εύρος της κατανομής του Σχήματος 5.5β μειώθηκε σε 3,34m. Παράλληλα αυξήθηκε και η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης όπου στο Σχήμα 5.5α είναι ίση με 2,27mg/l και στο Σχήμα 5.5β είναι ίση με 6mg/l.



α)



β)

Σχήμα 5.5 Κατανομές των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,2m$ ,  $\alpha_y=0,12m$  και  $\alpha_z=0,012m$ , στους άξονες x ( $\alpha$ ) και z ( $\beta$ )

β) εμπειρική σχέση Xu και Eckstein (1995)

Από την εφαρμογή της εμπειρικής σχέσης υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,83(\log L)^{2,414}$  (Xu and Eckstein 1995), προκύπτει τιμή ίση με  $\alpha_x=1m$  που έχει μικρή διαφορά από την τιμή που προκύπτει από την εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$ . Επομένως είναι φανερό ότι θα πρέπει να αυξηθεί η τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης.

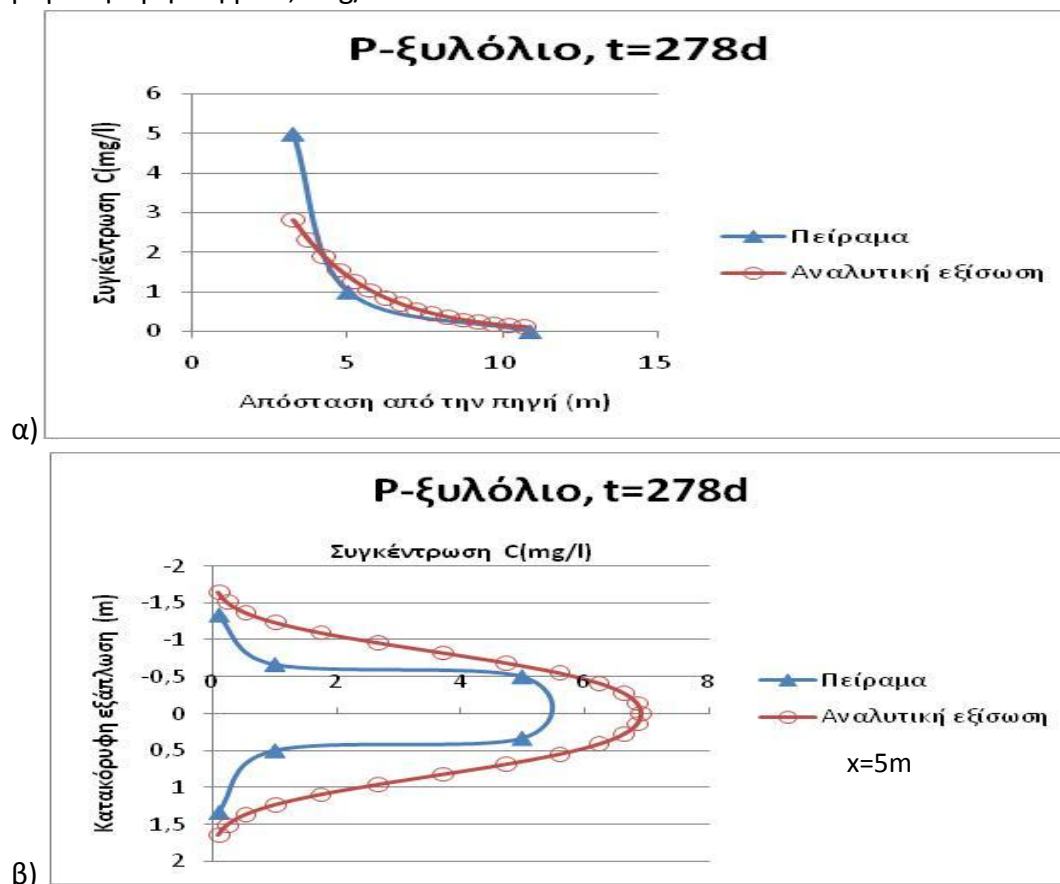
#### 5.1.2.4 Επιλογή συντελεστών μηχανικής διασποράς για την σύγκλιση των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης για το p-ξυλόλιο

Η σύγκλιση του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης επιτυγχάνεται με την αύξηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς σε  $\alpha_x=2m$ . Παράλληλα η τιμή του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται το καλύτερο ταίριασμα των κατανομών είναι ίση με το 1/20 του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς. Τέλος, η τιμή του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς για την οποία επιτυγχάνεται η σύγκλιση των κατανομών είναι ίση με το 1/10 του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς. Από τα παραπάνω προκύπτουν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που είναι ίσες με  $\alpha_x=2m$ ,  $\alpha_y=0,1m$  και  $\alpha_z=0,01m$ .

Στο Σχήμα 5.6 παρατηρείται ότι η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι της τάξεως των 0,6m. Επομένως θεωρείται ότι οι κατανομές συγκρίνονται ικανοποιητικά ως προς τη διαμήκη και την κατακόρυφη εγκάρσια διεύθυνση. Συγκεκριμένα στο Σχήμα 5.6α η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 7,65m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 7,5m. Στο ίδιο σχήμα η μέγιστη τιμή της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 2,83mg/l. Αντίστοιχα στο Σχήμα 5.6β η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 2,7m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει

Κεφάλαιο 5: Έκλυση ρύπου από ορθογώνια παραλληλόγραμμη πηγή σταθερής έντασης

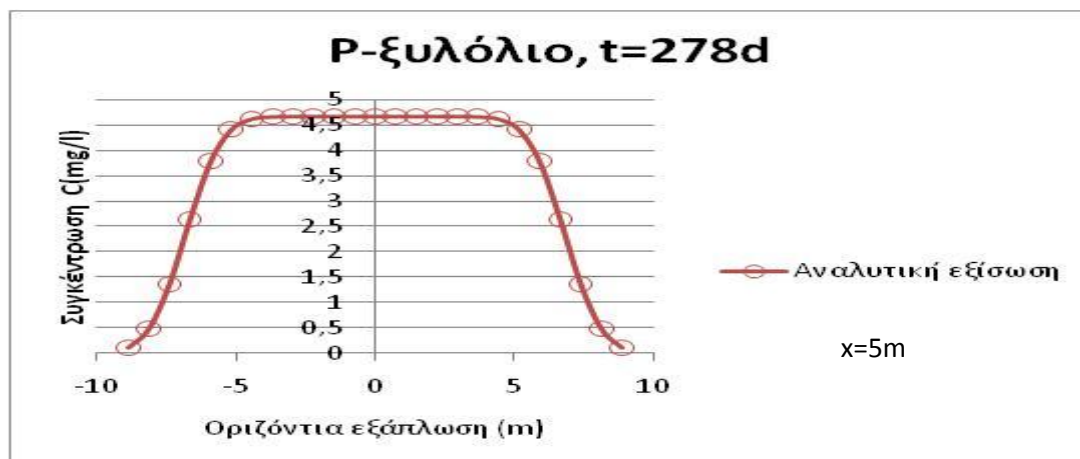
εύρος ίσο με 3,3m. Τέλος στο Σχήμα 5.6β η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει μέγιστη τιμή ίση με 6,9mg/l.



Σχήμα 5.6 Κατανομές των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2m$ ,  $\alpha_y=0,1m$  και  $\alpha_z=0,01m$ , στους άξονες x (α) και z (β)

Εφόσον δεν υπάρχει κατανομή των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα y από το πείραμα, δεν υπάρχει εικόνα για την οριζόντια εγκάρσια εξάπλωση του. Εφαρμόζεται η αναλυτική εξίσωση για τις τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 5.2, στην ίδια απόσταση από την πηγή (σημείο του άξονα x) από την οποία προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 5.6β και στο βάθος από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 5.6α. Η κατανομή των συγκεντρώσεων κατά την διεύθυνση του άξονα y από την αναλυτική εξίσωση παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.7.

Το εύρος της καμπύλης του Σχήματος 5.7 είναι ίσο με 17,8m και η μέγιστη τιμή της ισούται με 4,67mg/l. Τονίζεται ότι η ελάχιστη τιμή της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης του Σχήματος 5.7 είναι ίση με 0,1mg/l, όπως και στις κατανομές του Σχήματος 5.6.



Σχήμα 5.7 Κατανομή των συγκεντρώσεων του p-ξυλολίου κατά τη διεύθυνση του άξονα γ, από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2m$ ,  $\alpha_y=0,1m$  και  $\alpha_z=0,01m$

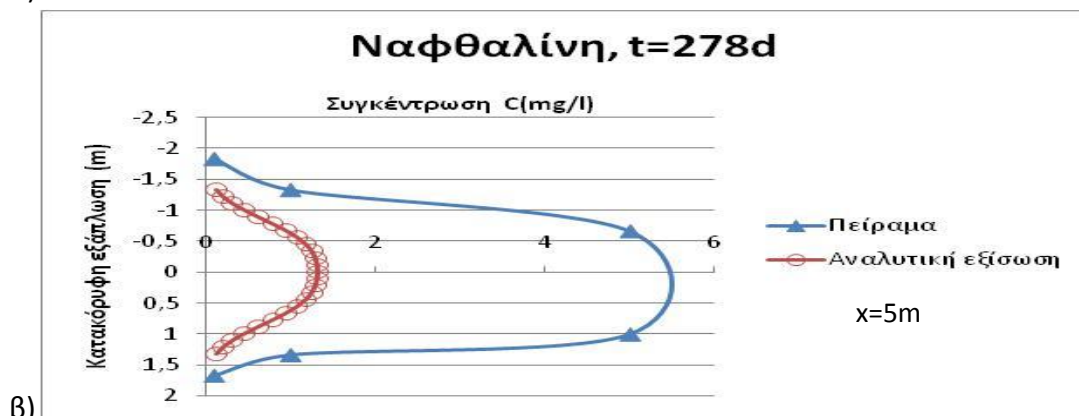
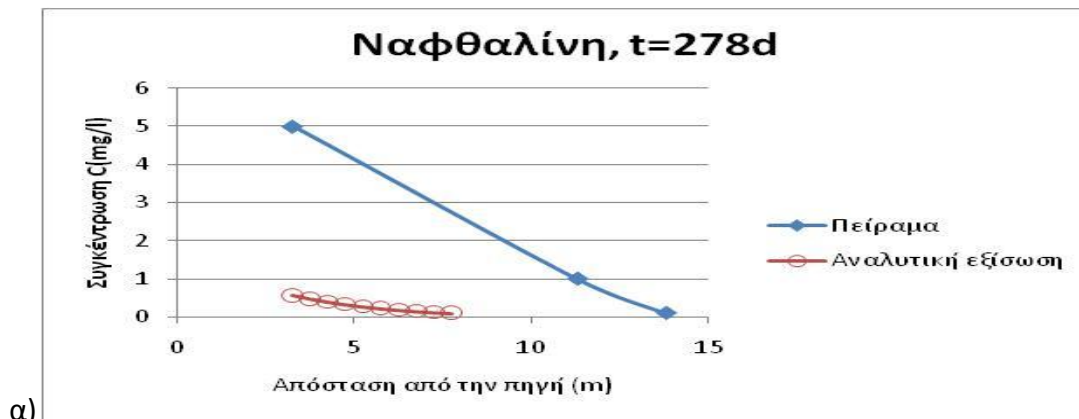
Οι τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από τις παραπάνω προσπάθειες σύγκλισης παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.2. Παρατηρείται ότι οι τιμές του Πίνακα 5.2 είναι μικρότερες από τις τιμές που προέκυψαν από το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (Πίνακας 3.14).

Πίνακας 5.2 Τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για το τρίτο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους

<u>Παράμετρος</u>	<u>Τιμή</u>
Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$	2
Συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_y(m)$	0,1
Συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς $\alpha_z(m)$	0,01

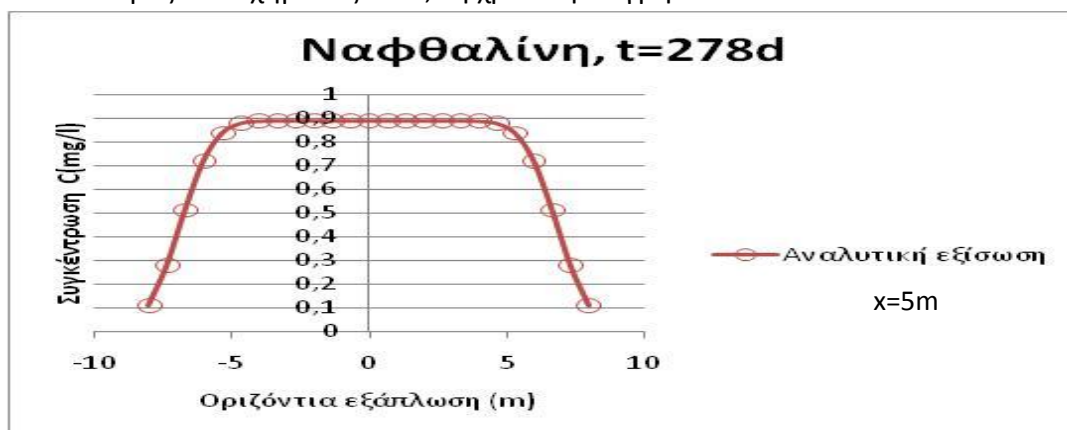
#### 5.1.2.5 Σύγκριση των κατανομών της ναφθαλίνης για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς

Για τις τελικές τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς (Πίνακας 5.2) παρατηρείται πολύ μεγάλη διαφορά του εύρους των κατανομών ναφθαλίνης στο πείραμα και από την αναλυτική εξίσωση στο Σχήμα 5.8α. Συγκεκριμένα το εύρος της καμπύλης του πειράματος στο Σχήμα 5.8α είναι ίσο με 10,55m ενώ το αντίστοιχο εύρος της καμπύλης της αναλυτικής εξίσωσης είναι 4,5m. Αντίστοιχα στο Σχήμα 5.8β το εύρος της κατανομής του πειράματος είναι 3,5m και το εύρος της κατανομής της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίσο με 2,66m. Μεγάλη όμως διαφορά παρουσιάζεται στις μέγιστες τιμές των συγκεντρώσεων που διαφέρουν έως και 4,5mg/l. Βέβαια για την ναφθαλίνη από τις μετρήσεις του πειράματος προέκυψαν τιμές συγκέντρωσης μεγαλύτερες από 5mg/l, δηλαδή μεγαλύτερες από την ενεργή διαλυτότητα της που είναι 2,698mg/l. Αυτό σημαίνει ότι στην κατανομή του πειράματος περιλαμβάνονται και συγκεντρώσεις που αντιστοιχούν σε δείγματα με μη υδατική φάση του ρύπου.



Σχήμα 5.8 Κατανομές των συγκεντρώσεων της ναφθαλίνης, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2m$ ,  $\alpha_y=0,1m$  και  $\alpha_z=0,01m$ , στους άξονες x (α) και z (β)

Στο πείραμα, οι Brauner και Widdowson (2001) δεν παρουσιάζουν κατανομή των συγκεντρώσεων της ναφθαλίνης κατά την οριζόντια εγκάρσια διεύθυνση. Στο Σχήμα 5.9, παρουσιάζεται η κατανομή των συγκεντρώσεων της κατά τη διεύθυνση του άξονα y, που προέκυψε από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης. Η αναλυτική εξίσωση εφαρμόστηκε στο ίδιο σημείο του άξονα x από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 5.8β και στο σημείο του άξονα z από το οποίο προέκυψαν οι κατανομές του Σχήματος 5.8α, τη χρονική στιγμή  $t=278d$ .



Σχήμα 5.9 Κατανομή των συγκεντρώσεων της ναφθαλίνης κατά τη διεύθυνση του άξονα y, από την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2m$ ,  $\alpha_y=0,1m$  και  $\alpha_z=0,01m$

Το εύρος της οριζόντιας εγκάρσιας εξάπλωσης της ναφθαλίνης στο Σχήμα 5.9 είναι ίσο με 16m και η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής είναι ίση με 0,9mg/l. Σημειώνεται ότι η ελάχιστη τιμή συγκέντρωσης στην κατανομή είναι ίση με 0,1mg/l όπως και στις κατανομές του Σχήματος 5.8.

### 5.1.3 Συμπερασματικά σχόλια

Η διαδικασία προσομοίωσης του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους διαφοροποιείται σε σχέση με τα προηγούμενα πειράματα μεταφοράς, λόγω της απουσίας στη βιβλιογραφία (Brauner και Widdowson 2001) αποτελεσμάτων για την μεταφορά του ιχνηθέτη. Επομένως, έγινε προσομοίωση των αποτελεσμάτων του πειράματος για έναν οργανικό ρύπο του οποίου η υστέρηση και υποβάθμιση είχαν προσδιοριστεί από τα αποτελέσματα του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2). Από το δεύτερο πείραμα (MADE-2) κατέστη σαφής η δυσκολία προσομοίωσης του πειράματος με την αναλυτική λύση (2.3) της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς (2.2), λόγω της ανομοιογένειας του υδροφορέα. Παρόλα αυτά επιχειρήθηκε η προσομοίωση του τρίτου πειράματος (MADE-3), καθώς υπήρχαν καλά ορισμένες αρχικές και συνοριακές συνθήκες και δίδεται η ευκαιρία να εφαρμοστεί η αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς για πηγή σταθερής έντασης (εξίσωση (2.8)).

Σημειώνεται ότι η ημιαναλυτική εξίσωση (2.8), βασίζεται σε μία σειρά παραδοχών (Ενότητα 2.1.3) και δεν ισχύει για μικρούς χρόνους και σε αποστάσεις κοντά στην πηγή. Συγκεκριμένα, οι Valocchi et al. (2001) ορίζουν για την εξίσωση του Domenico (1987), που αποτελεί παραλλαγή της εξίσωσης (2.8), ότι για να είναι η συγκέντρωση κατά μήκος του διαμήκη άξονα  $x$ , στο σημείο μεγίστων συγκεντρώσεων  $x=v_x t$  εντός του 5% της πραγματικής τιμής, θα πρέπει η απόσταση από την πηγή να είναι μεγαλύτερη από  $30\alpha_x$ . Στη συγκεκριμένη επί τόπου δοκιμή επιλέχθηκε τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=2m$ , οπότε οι μέγιστες τιμές συγκεντρώσεων προσεγγίζουν τις πραγματικές (με απόκλιση 5%) σε αποστάσεις από την πηγή μεγαλύτερες των 60m. Αντίθετα, οι αποστάσεις από την πηγή των πειραματικών δεδομένων είναι της τάξεως των 10m, οπότε η ακρίβεια των αναλυτικών αποτελεσμάτων αμφισβητείται.

Παράλληλα, οι Valocchi et al. (2001) θέτουν ένα ακόμη περιορισμό για να είναι οι συγκεντρώσεις κοντά στην πηγή εντός του 5% της πραγματικής τους τιμής. Ο περιορισμός αφορά τη χρονική στιγμή  $t$  για την οποία εφαρμόζεται η ημιαναλυτική εξίσωση, που θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη από  $5\alpha_x/v_x$ . Για την συγκεκριμένη επί τόπου δοκιμή η ταχύτητα μεταγωγής είναι ίση με 0,0237m/d. Επομένως, οι χρονικές στιγμές προσομοίωσης θα πρέπει να είναι μεγαλύτερες από 422 ημέρες. Αντίθετά, η χρονική στιγμή της προσομοίωσης των πειραματικών δεδομένων είναι ίση με 278 ημέρες, οπότε και πάλι η ακρίβεια των αναλυτικών αποτελεσμάτων είναι μικρή.

## Κεφάλαιο 6 Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

Στα προηγούμενα κεφάλαια έγινε προσομοίωση πειραμάτων μεταφοράς με αναλυτικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς, που περιγράφουν επαρκώς τις αρχικές συνθήκες των πειραμάτων αυτών. Συγκρίθηκαν οι μετρημένες συγκεντρώσεις από τα πειράματα με τις υπολογισμένες συγκεντρώσεις από τις αναλυτικές εξισώσεις σε συγκεκριμένη χρονική στιγμή μετά την έναρξη των πειραμάτων. Για να προσομοιωθούν τα πειράματα μεταφοράς με ιχνηθέτες σε φυσικούς υδροφορείς θα πρέπει να επιλεγούν κατάλληλες τιμές των παραμέτρων: ταχύτητα μεταγωγής και συντελεστές μηχανικής διασποράς. Στις επόμενες ενότητες πραγματοποιείται συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς που χρησιμοποιήθηκαν για την προσομοίωση με τις αντίστοιχες παραμέτρους που προέκυψαν από τις δοκιμές πεδίου.

### 6.1 Συγκριτική ανάλυση της ταχύτητας μεταγωγής των ιχνηθετών των πειραμάτων μεταφοράς

Η εφαρμογή των αναλυτικών εξισώσεων έγινε για συγκεκριμένη τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας  $K$ , που προσδιορίστηκε από μετρήσεις σε πυρήνες από τους υδροφορείς ή από γεωτρήσεις. Αντίστοιχα, χρησιμοποιήθηκε μοναδική τιμή του πορώδους που ήταν ίση με την μέση τιμή που προέκυψε από μετρήσεις σε πυρήνες. Επομένως, η εφαρμογή των αναλυτικών εξισώσεων έγινε για συγκεκριμένη τιμή της ταχύτητας μεταγωγής που παρουσιάζεται στον Πίνακα 6.1. Επιπλέον, στον Πίνακα 6.1 παρουσιάζονται οι ταχύτητες μεταγωγής του κέντρου μάζας των ιχνηθετών, όπως προέκυψαν από τα πειράματα μεταφοράς.

Πίνακας 6.1 Τιμές της μέσης ταχύτητας μεταγωγής  $v_x$

Υδροφόρας/πείραμα μεταφοράς	Ταχύτητα μεταγωγής $v_x$ (m/d) που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση	Ταχύτητα μεταγωγής $v_x$ (m/d) του κέντρου μάζας των ιχνηθετών από τα πειράματα	Πηγές
Μπόρντεν/CHC	0,081	0,091	Mackay et al. 1986
Μπόρντεν/ BTEX-Μεθανόλη	0,081	0,0942	American Petroleum Institute 1994
Κέιπ Κοντ	0,45	0,42	Garabedian et al. 1992
Κολόμπους/MADE-2	0,0237	0,063/0,35	Boggs et al. 1993

Στα πειράματα στο Μπόρντεν και το Κέιπ Κοντ, το κέντρο μάζας των ιχνηθετών ακολούθησε μία γραμμική οριζόντια τροχιά. Κατά μήκος αυτής της τροχιάς,

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

παρατηρήθηκε μία γραμμική σχέση της οριζόντιας μετακίνησης του κέντρου μάζας με τον χρόνο. Έτσι προέκυψε μία σχετικά σταθερή ταχύτητα μεταγωγής του κέντρου μάζας των ιχνηθετών, που παρουσιάζεται στον Πίνακα 6.1. Παράλληλα, στον Πίνακα 6.1 παρατηρείται ότι οι τιμές της ταχύτητας μεταγωγής που χρησιμοποιήθηκαν για την προσομοίωση των πειραμάτων είναι πολύ κοντά στις τιμές που προέκυψαν από τον προσδιορισμό της ταχύτητας μεταγωγής του κέντρου μάζας των ιχνηθετών.

Στο δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους, επίσης παρατηρήθηκε ότι η οριζόντια τροχιά του κέντρου μάζας του ιχνηθέτη ήταν γραμμική. Όμως, κατά μήκος αυτής της τροχιάς, η σχέση της μετακίνησης του κέντρου μάζας με τον χρόνο δεν ήταν γραμμική. Έτσι η μέση ταχύτητα μεταγωγής του κέντρου μάζας του ιχνηθέτη για τις πρώτες 132 ημέρες του πειράματος είναι ίση με 0,063m/d και για τις υπόλοιπες ημέρες είναι ίση με 0,35m/d (Boggs et al. 1993) (Πίνακας 6.1). Τέλος, στον Πίνακα 6.1 παρατηρείται ότι η τιμή της ταχύτητας μεταγωγής που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση είναι μικρότερη από αυτές που προέκυψαν από την κίνηση του κέντρου μάζας του ιχνηθέτη. Σημειώνεται ότι για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε ο γεωμετρικός μέσος των τιμών της υδραυλικής αγωγιμότητας που μετρήθηκαν πριν την έναρξη του πειράματος.

Ξεχωριστή περίπτωση αποτελεί το πείραμα στο Τουίν Λέικ, καθώς όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 4.2.2.1, το πάνω μέρος της ρυπασμένης περιοχής εκινείτο πιο γρήγορα από το κάτω μέρος της, λόγω της παρουσίας στρωμάτων με διαφορετική περατότητα. Από το πείραμα, προέκυψε ότι η μέση γραμμική ταχύτητα του υπόγειου νερού στο πάνω μέρος είναι ίση με 1,45m/d ενώ στο κάτω κυμαίνεται μεταξύ 0,7 και 1,3m/d (Killey και Moltzner 1988). Αντίστοιχα, η προσομοίωση του πειράματος έγινε για διαφορετικές ταχύτητες μεταγωγής που είναι ίσες με 1,382 και 0,935m/d για το πάνω και το κάτω μέρος της ρυπασμένης περιοχής αντίστοιχα.

## 6.2 Ο ρόλος της μηχανικής διασποράς

Από την εφαρμογή των αναλυτικών εξισώσεων αναζητήθηκαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς για τις οποίες το εύρος των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης συμπίπτει κατά τη διαμήκη και την εγκάρσια διεύθυνση, σε συγκεκριμένη χρονική στιγμή μετά την έναρξη του πειράματος. Τα αποτελέσματα των αναλυτικών εξισώσεων από τη χρήση μοναδικών τιμών για την υδραυλική αγωγιμότητα και το πορώδες έχουν μεγαλύτερη αξιοπιστία για ομοιογενείς υδροφορείς. Επειδή όμως οι φυσικοί υδροφορείς είναι πάντα ως ένα βαθμό ανομοιογενείς, η χρήση μοναδικών τιμών για την υδραυλική αγωγιμότητα και το πορώδες αποτελεί μία υπεραπλούστευση, καθώς δεν μπορεί να προσομοιώσει επαρκώς την ανομοιογενή κατανομή των τιμών αυτών στον υδροφορέα. Επομένως, η διασπορά οφείλεται σε διακυμάνσεις της υδραυλικής αγωγιμότητας και του πορώδους τόσο κατά τη διαμήκη όσο και κατά την εγκάρσια διεύθυνση, ενώ από την προσομοίωση κατέστη σαφές ότι πρόκειται για παράμετρο κλειδί.



Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

### 6.2.1 Ευρήματα για τους συντελεστές διαμήκους μηχανικής διασποράς

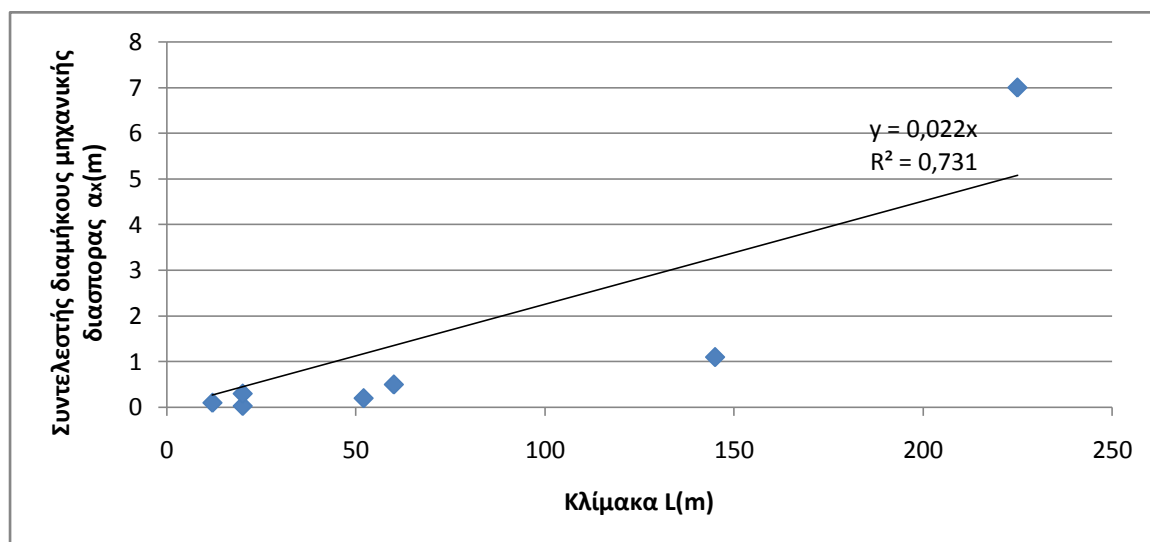
Τα προηγούμενα κεφάλαια έδειξαν ότι οι εμπειρικές σχέσεις υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που χρησιμοποιήθηκαν (η απλή εμπειρική σχέση  $\alpha_x=0,1x$  και η σχέση των Xu και Eckstein 1995) δεν μπόρεσαν να προσομοιώσουν τα αποτελέσματα των πειραμάτων μεταφοράς με ιχνηθέτες σε φυσικούς υδροφορείς. Αντίθετα, στα πειράματα που προσομοιώθηκαν, οι τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς προέκυψαν με την μέθοδο δοκιμής-λάθους. Στον Πίνακα 6.2, παρουσιάζονται οι τιμές των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση, η κλίμακα των πειραμάτων μεταφοράς και οι παράμετροι της αναλυτικής εξίσωσης που χρησιμοποιήθηκαν.

**Πίνακας 6.2 Τα στοιχεία της προσομοίωσης των πειραμάτων μεταφοράς και οι τιμές των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψαν**

Υδροφόρας/ Πείραμα μεταφοράς	Χρονική στιγμή στην οποία έγινε η προσομοίωση t(days)	Ταχύτητα μεταγωγής που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση $v_x(m/d)$	Κλίμακα του πειράματος L(m)	Συντελεστής διαμήκους μηχανικής διασποράς $\alpha_x(m)$
Μπόρντεν/CHC	462	0,081	52	0,3
Μπόρντεν/BTEX	108	0,081	12	0,1
Μπόρντεν/ BTEX-Μεθανόλη	476	0,081	60	0,5
Κέιπ Κοντ	237	0,45	145	1,1
Κολόμπους/MADE-2	328	0,0237	225	7
Τουίν Λέικ	13	1,382/0,935	20	0,03/0,3

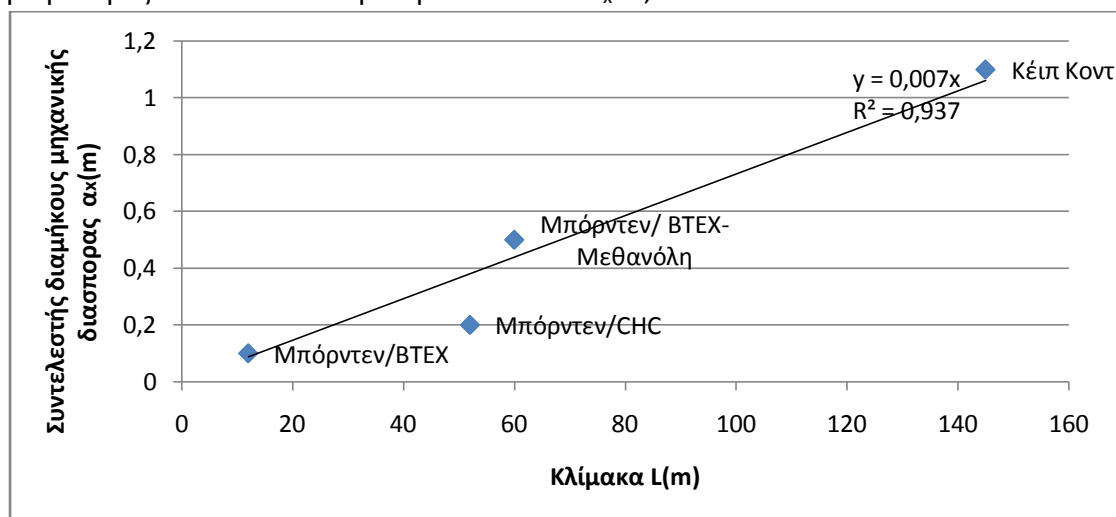
Ως κλίμακα του πειράματος στον Πίνακα 6.2, ορίστηκε η απόσταση από την πηγή στην οποία έφτασε η ελάχιστη μετρούμενη συγκέντρωση του ιχνηθέτη, μετρώντας κατά μήκος του διαμήκους άξονα x, τη χρονική στιγμή για την οποία έγινε η προσομοίωση. Στο Σχήμα 6.1, παρουσιάζεται το διάγραμμα των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση ως προς την κλίμακα των πειραμάτων. Επιπλέον, στο διάγραμμα παρατηρείται μία τάση αύξησης των τιμών των συντελεστών με την αύξηση της κλίμακας (scale effect).

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις



Σχήμα 6.1 Διάγραμμα των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς, που προέκυψαν από την προσομοίωση, ως προς την κλίμακα του πειράματος

Εάν αφαιρεθούν από το Σχήμα 6.1 οι τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση των πειραμάτων στο Κολόμπους και στο Τουίν Λέικ, λόγω χαμηλής αξιοπιστίας εξαιτίας της ανομοιογένειας του υδροφορέα, τότε προκύπτει το διάγραμμα του Σχήματος 6.2. Η σχέση που προκύπτει από γραμμική συσχέτιση των τιμών είναι  $\alpha_x = 0,007x$ , με επίπεδο αξιοπιστίας  $R^2 = 0,937$ . Επομένως, για την χωρική κλίμακα των επί τόπου δοκιμών που εξετάστηκαν, η σχέση υπολογισμού του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψε δίνει τιμές μίας τάξης μεγέθους μικρότερες από τον απλό εμπειρικό κανόνα  $\alpha_x = 0,1x$ .



Σχήμα 6.2 Διάγραμμα των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς υψηλής αξιοπιστίας ως προς την κλίμακα του πειράματος

### 6.2.2 Ευρήματα για τους συντελεστές εγκάρσιας μηχανικής διασποράς

Η πλειονότητα των λόγων του συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς προς τον συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς  $\alpha_y/\alpha_x$  που προέκυψαν από την προσομοίωση βρίσκονται εντός του διαστήματος 1/5 έως 1/20.

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

Όπως φαίνεται από τον Πίνακα 6.3, εξαίρεση αποτελεί το πείραμα στο Κέιπ Κοντ, όπου ο λόγος  $\alpha_y/\alpha_x$  είναι σημαντικά μικρότερος από το παραπάνω εύρος.

Στον Πίνακα 6.3, παρουσιάζονται και οι λόγοι του συντελεστή κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς προς τον συντελεστή διαμήκου μηχανικής διασποράς  $\alpha_z/\alpha_x$  που προέκυψαν από την προσομοίωση. Από τις τιμές υψηλής αξιοπιστίας (από το Μπόρντεν και το Κέιπ Κοντ) προκύπτει ότι ο συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς είναι μίας τάξης μεγέθους μικρότερος από τον συντελεστή οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, όπως σημειώθηκε από τους Gelhar et al. (1992).

**Πίνακας 6.3 Οι λόγοι  $\alpha_y/\alpha_x$  και  $\alpha_z/\alpha_x$  που προέκυψαν από την προσομοίωση των πειραμάτων μεταφοράς**

<b>Υδροφορέας/ Πείραμα μεταφοράς</b>	<b><math>\alpha_y/\alpha_x</math></b>	<b><math>\alpha_z/\alpha_x</math></b>
<b>Μπόρντεν/CHC</b>	1/5	1/100
<b>Μπόρντεν/BTEX</b>	1/5	1/100
<b>Μπόρντεν/BTEX-Μεθανόλη</b>	1/20	1/200
<b>Κέιπ Κοντ</b>	3/110	3/1100
<b>Κολόμπους/MADE-2</b>	1/10	1/100
<b>Τουίν Λέικ</b>	1/20	1/200
<b>Κολόμπους/MADE-3</b>	1/20	1/200

### 6.2.3 Συγκριτική ανάλυση των συντελεστών μηχανικής διασποράς των πειραμάτων μεταφοράς

Από την εφαρμογή της μεθόδου των ροπών (spatial moments analysis) και τον προσδιορισμό των μέτρων θέσης και μεταβλητότητας των κατανομών συγκέντρωσης των ιχνηθετών, προέκυψαν οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς του Πίνακα 6.4, που βρέθηκαν στην βιβλιογραφία. Εξαίρεση αποτελούν οι τιμές του πειράματος στο Τουίν Λέικ, οι οποίες προέκυψαν από την ίδια αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση στο Κεφάλαιο 4.

Στον Πίνακα 6.4 παρατηρείται ότι οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση των πειραμάτων στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ είναι ίδιας τάξης μεγέθους με τις τιμές που βρέθηκαν στην βιβλιογραφία. Εξαίρεση αποτελεί ο συντελεστής κατακόρυφης εγκάρσιας μηχανικής διασποράς του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν που είναι μίας τάξης μεγέθους μεγαλύτερος από αυτόν που προέκυψε από την προσομοίωση.

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

Η τιμή του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που προέκυψε από την προσομοίωση του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) είναι ίδιας τάξης μεγέθους με την τιμή που βρέθηκε στη βιβλιογραφία, παρά τη δυσκολία της προσομοίωσης των αποτελεσμάτων του πειράματος με την αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς. Αντίθετα, ο συντελεστής οριζόντιας εγκάρσιας μηχανικής διασποράς που προέκυψε από την προσομοίωση είναι μίας τάξης μεγέθους μικρότερος από αυτόν που βρέθηκε στη βιβλιογραφία. Επιπλέον, λόγω της μεγάλης ανομοιογένειας του υδροφορέα, οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς από την προσομοίωση και την βιβλιογραφία είναι μεγαλύτερες σε σχέση με τα πειράματα στο Μπόρντεν και το Κέιπ Κοντ, που έγιναν σε σχετικά ομοιογενείς υδροφορείς.

**Πίνακας 6.4 Συγκριτικός πίνακας των τιμών των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση με τιμές που βρέθηκαν στη βιβλιογραφία**

Υδροφορέας/ πείραμα μεταφοράς	Συντελεστές μηχανικής διασποράς από την προσομοίωση $\alpha_x/\alpha_y/\alpha_z(m)$	Συντελεστές μηχανικής διασποράς από την βιβλιογραφία $\alpha_x/\alpha_y/\alpha_z(m)$	Πηγές
<b>Μπόρντεν/CHC</b>	0,3/0,06/0,003	0,36/0,039/0,023	Freyberg et al.1986
<b>Μπόρντεν/BTEX</b>	0,1/0,02/0,001		
<b>Μπόρντεν BTEX- Μεθανόλη</b>	0,5/0,025/0,0025	0,39/0,031/-	American Petroleum Institute 1994
<b>Κέιπ Κοντ</b>	1,1/0,03/0,003	0,96/0,018/0,0015	Garabedian et al. 1992
<b>Κολόμπους/MADE-2</b>	7/0,7/0,07	9,5/2,2/-	Boggs et al. 1993
<b>Τουίν Λέικ</b>	0,03/0,0015/0,00015 0,3/0,015/0,0015	0,06-0,16/-/0,0006- 0,002	Moltyaner και Killey 1988
<b>Κολόμπους/MADE-3</b>	2/0,1/0,01		

Η μεγάλη ανομοιογένεια του υδροφορέα του Κολόμπους, φαίνεται και από τη μεγάλη διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας που παρουσιάζεται στον Πίνακα 6.5. Επιπλέον, στον Πίνακα 6.5 παρουσιάζονται οι ασυμπτωτικές τιμές του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς που προσδιορίστηκαν από το στοχαστικό μοντέλο των Gelhar και Axness (1983). Για το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν, οι Freyberg et al. (1986) σημειώνουν ότι οι ασυμπτωτικές συνθήκες δεν επετεύχθησαν κατά τις 647 ημέρες του πειράματος. Αντίθετα, οι Garabedian et al. (1991) αναφέρουν ότι στο πείραμα στο Κέιπ Κοντ, το ασυμπτωτικό όριο του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς 0,96m, που ήταν πολύ κοντά στην τιμή που

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

προέκυψε από το στοχαστικό μοντέλο, επετεύχθη όταν το κέντρο μάζας του ιχνηθέτη είχε μετακινηθεί σε απόσταση 26m από το σημείο εισπίεσης. Τέλος, η τιμή του συντελεστή διαμήκου μηχανικής διασποράς από το δεύτερο πείραμα μακροδιασποράς είναι μίας τάξης μεγέθους μεγαλύτερη από την ασυμπτωτική τιμή. Οι Adams και Gelhar (1992) σημειώνουν ότι αυτό δεν αποτελεί αποτυχία του στοχαστικού μοντέλου, αλλά αποτυχία στην ολοκληρωμένη περιγραφή των γεωστατιστικών παραμέτρων του πεδίου ροής.

**Πίνακας 6.5 Η διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας και οι ασυμπτωτικές τιμές του συντελεστή διαμήκου μηχανικής διασποράς από το στοχαστικό μοντέλο των Gelhar και Axness (1983)**

Υδροφόρας/ Πείραμα μεταφοράς	Διασπορά των τιμών του φυσικού λογαρίθμου της υδραυλικής αγωγιμότητας ( $\sigma^2 \ln K$ , K(cm/s))	Ασυμπτωτική τιμή του συντελεστή διαμήκου μηχανικής διασποράς $A_L$ (m)
Μπόρντεν/CHC	0,29	0,6 (Sudicky 1986)
Κέιπ Κοντ	0,24	0,5 (Garabedian et al. 1991)
Κολόμπους/MADE-2	2,8	1,5m (Rehfeldt et al. 1992)

### 6.3 Πρόβλεψη για τη μεταφορά των διαλυμένων ρύπων των πειραμάτων μεταφοράς σε μεταγενέστερες χρονικές στιγμές

Στην ενότητα αυτή θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης, σε μεταγενέστερες χρονικές στιγμές από αυτές που έγινε η προσομοίωση, για τους συντελεστές μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση. Θα γίνει σύγκριση των κατανομών του χλωριόντος, από το πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Ενότητα 3.1.2), τη χρονική στιγμή 647 ημέρες μετά την εισπίεση. Επιπλέον, θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των κατανομών του βρωμιόντος από το πείραμα στο Κέιπ Κοντ (Ενότητα 3.2.2), τη χρονική στιγμή 461 ημέρες μετά την εισπίεση. Σκοπός είναι να αξιολογηθεί αν η αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για προβλέψεις με βάση τους συντελεστές μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση.

#### Πείραμα εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν

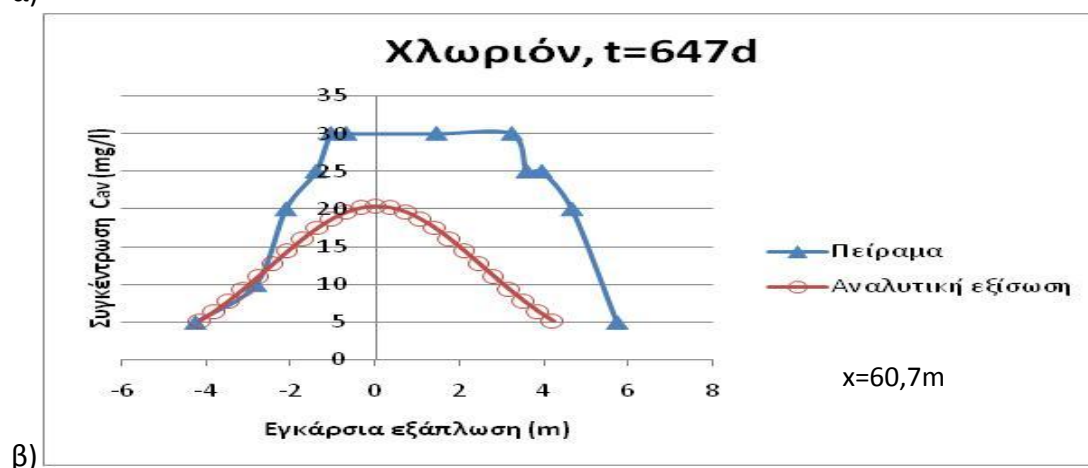
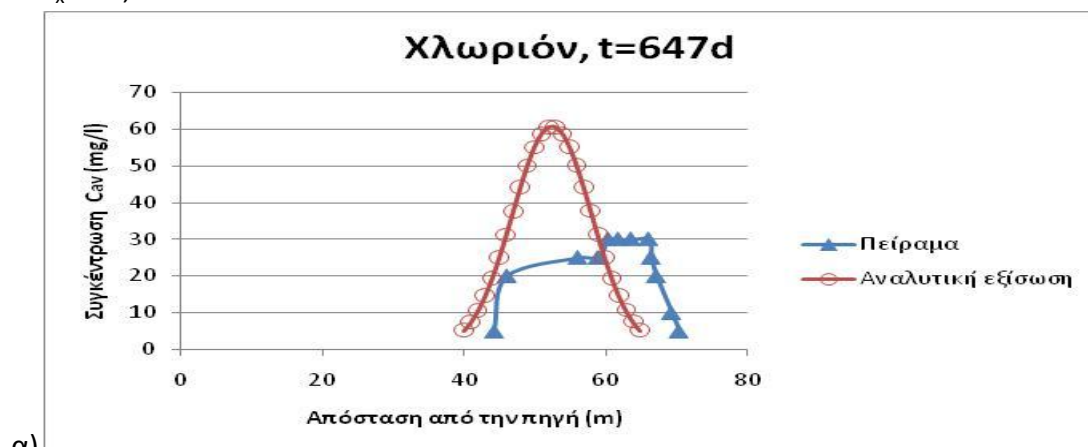
Οι κατανομές μέσω συγκεντρώσεων του χλωριόντος από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 647 ημέρες μετά την εισπίεση, προκύπτουν από το Σχήμα Α.1 με την Τομή D-D κατά μήκος του άξονα x και την Τομή C-C στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας,  $x=60,7m$ . Σημειώνεται ότι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

χρησιμοποιήθηκε το ίδιο σύστημα αξόνων (x,y,z) και η ίδια εξίσωση υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων, όπως περιγράφηκαν στην Ενότητα 3.1.2.2.1.

Στο Σχήμα 6.3α, οι κατανομές του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης συγκρίνονται επαρκώς ως προς το εύρος τους. Συγκριμένα η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 26m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 25m. Αντίθετα, η διαφορά των μεγίστων τιμών των κατανομών είναι ίση με 30mg/l.

Στο Σχήμα 6.3β, η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 1,6m. Συγκριμένα, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 10m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 8,4m. Στο ίδιο σχήμα παρατηρείται ότι η μέγιστη συγκέντρωση της κατανομής του πειράματος είναι ίση με 30mg/l ενώ της αναλυτικής εξίσωσης είναι ίση με 20mg/l. Σημειώνεται ότι η διαφορά της μέγιστης τιμής των κατανομών της αναλυτικής εξίσωσης στα Σχήματα 6.3α και 6.3β, οφείλεται στο ότι η εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης έγινε στο σημείο του άξονα x που πραγματοποιήθηκε η Τομή C-C (x=60,7m) και όχι στο κέντρο βάρους που προκύπτει από την αναλυτική εξίσωση  $x=v_x t=52,4m$ .



Σχήμα 6.3 Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,06m$  και  $\alpha_z=0,003m$ , στους άξονες x (α) και y (β), τη χρονική στιγμή t=647 ημέρες μετά την εισπίεση

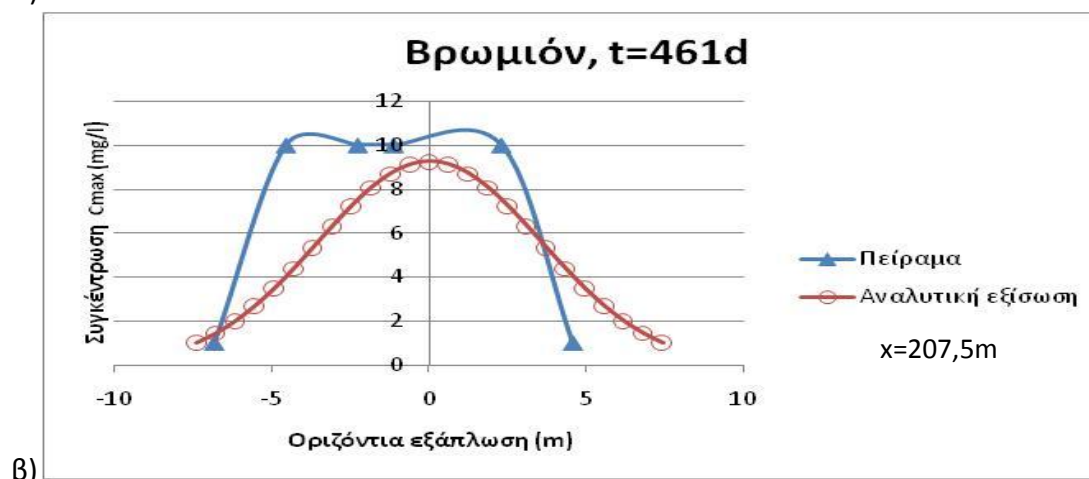
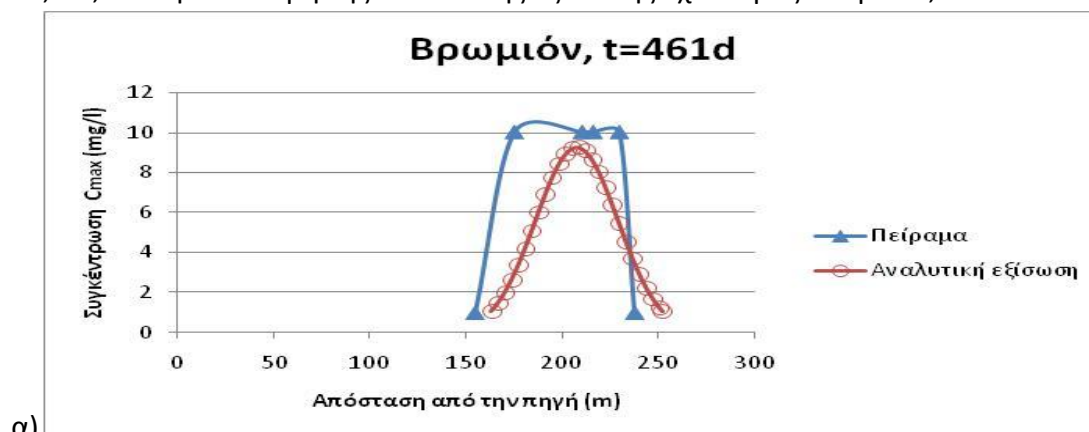
Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

### Πείραμα εισπίεσης ανόργανων ρύπων στο Κέιπ Κοντ

Οι κατανομές μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος από το πείραμα, τη χρονική στιγμή 461 ημέρες μετά την εισπίεση, προκύπτουν από το Σχήμα E.1 με την Τομή I-I κατά μήκος του άξονα x και την Τομή II-II στο εκτιμώμενο κέντρο βάρους της μάζας,  $x=207,5\text{m}$ . Σημειώνεται ότι για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης χρησιμοποιήθηκε το ίδιο σύστημα αξόνων (x,y,z) και ο ίδιος τρόπος υπολογισμού των μεγίστων συγκεντρώσεων σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας, όπως περιγράφηκε στην Ενότητα 3.2.2.2.1.

Η διαφορά του εύρους των κατανομών του πειράματος και της αναλυτικής εξίσωσης στο Σχήμα 6.4α είναι ίση με 6m. Συγκεκριμένα, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 83m ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 89m. Αντίθετα, πολύ μικρή διαφορά παρουσιάζεται στις μέγιστες συγκεντρώσεις των κατανομών, που διαφέρουν κατά 0,75mg/l.

Στο Σχήμα 6.4β, η διαφορά των μεγίστων συγκεντρώσεων των κατανομών είναι επίσης ίση με 0,75mg/l. Παράλληλα, η κατανομή του πειράματος έχει εύρος ίσο με 11,3m, ενώ η κατανομή της αναλυτικής εξίσωσης έχει εύρος ίσο με 14,8m.



Σχήμα 6.4 Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=1,1\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,03\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στους άξονες x (α) και y (β), τη χρονική στιγμή  $t=461$  ημέρες μετά την εισπίεση

Κεφάλαιο 6: Συγκριτική ανάλυση των παραμέτρων μεταφοράς και αξιολόγηση των αναλυτικών εξισώσεων σε προβλέψεις

Από τα παραπάνω παραδείγματα καθίσταται σαφές ότι η αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς μπορεί να προσομοιώσει με μικρή απόκλιση το εύρος της ρυπασμένης περιοχής, σε μεταγενέστερη χρονική στιγμή από αυτήν της προσομοίωσης. Ειδικότερα, για το πείραμα στο Μπόρντεν, η διαφορά του εύρους των κατανομών είναι μικρή, της τάξεως του 1m. Αντίθετα, στο πείραμα στο Κέιπ Κοντ, η διαφορά του εύρους των κατανομών είναι μεγαλύτερη αλλά όχι αποτρεπτική για την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για προβλέψεις της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό. Σημειώνεται ότι τα παραπάνω παραδείγματα αφορούν τους σχετικά ομοιογενείς υδροφορείς του Μπόρντεν και του Κέιπ Κοντ, όπου από την προσομοίωση κατέστη σαφές ότι οι αναλυτικές εξισώσεις μπορούν να προσομοιώσουν επαρκώς τη ρυπασμένη περιοχή.



## Κεφάλαιο 7 Σύνοψη και συμπεράσματα

Το βασικό ερώτημα που απαντάει η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία είναι κατά πόσο οι αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς μπορούν να προσομοιώσουν επαρκώς τη ρυπασμένη περιοχή από διαλυμένους ρύπους στο υπόγειο νερό. Για το σκοπό αυτό, αναζητήθηκαν στην επιστημονική βιβλιογραφία πειράματα μεταφοράς με ιχνηθέτες σε φυσικούς υδροφορείς και κατάλληλες αναλυτικές εξισώσεις που να ικανοποιούν τις αρχικές και συνοριακές συνθήκες των πειραμάτων αυτών. Για την απάντηση του βασικού ερωτήματος έγινε προσπάθεια να προσομοιωθεί η ρυπασμένη περιοχή από ιχνηθέτες, καθώς απαιτούνταν ο προσδιορισμός λιγότερων παραμέτρων της εξίσωσης μεταφοράς. Όπου αυτό δεν κατέστη δυνατό (Κεφάλαιο 5), λόγω απουσίας στην βιβλιογραφία πειραματικών αποτελεσμάτων για τους ιχνηθέτες, χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλες τιμές των παραμέτρων των μηχανισμών της ρόφησης και υποβάθμισης για την εξαγωγή κατά το δυνατόν αξιόπιστων αναλυτικών αποτελεσμάτων.

Το βασικό συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η επάρκεια προσομοίωσης της ρυπασμένης περιοχής από αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς εξαρτάται από την ομοιογένεια του υδροφορέα. Όσο περισσότερο ομοιόμορφη είναι η κατανομή των υδρογεωλογικών παραμέτρων του υδροφορέα, τόσο πιο κανονική είναι η κατανομή των συγκεντρώσεων γύρω από το κέντρο μάζας και καθίσταται δυνατή η προσομοίωση της ρυπασμένης περιοχής από αναλυτικές εξισώσεις.

Στα πειράματα στο Μπόρντεν και στο Κέιπ Κοντ, που έγιναν σε σχετικά ομοιογενείς υδροφορείς, η προσομοίωση κατέδειξε ότι μπορεί να επιτευχθεί προσαρμογή (fitting) του εύρους της ρυπασμένης περιοχής στις τρεις διαστάσεις από τα αναλυτικά αποτελέσματα. Επιπλέον, από την προσομοίωση συμπεραίνεται σχετικά καλή προσομοίωση της μέγιστης συγκέντρωσης των πειραματικών αποτελεσμάτων. Εξαιρεση αποτελεί το πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν, όπου προτεραιότητα δόθηκε στην προσομοίωση του εύρους της ρυπασμένης περιοχής και όχι στη μέγιστη τιμή συγκέντρωσης.

Αντίθετα, στον υδροφορέα του Κολόμπους, που παρουσιάζει μεγάλη ανομοιογένεια, η κατανομή των συγκεντρώσεων δεν ήταν κανονική. Τα πειραματικά αποτελέσματα του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) κατέδειξαν ότι το μεγαλύτερο ποσοστό της μάζας παρέμενε κοντά στο σημείο εισπίεσης, ενώ ένα μικρό ποσοστό της εκινείτο σε μεγάλη απόσταση από αυτό. Επομένως, η αναλυτική λύση της εξίσωσης μεταφοράς δεν κατάφερε να προσομοιώσει το πραγματικό διαμήκες εύρος της ρυπασμένης περιοχής. Όμως, επιτεύχθηκε επαρκής προσομοίωση του εύρους της περιοχής μεγίστων συγκεντρώσεων και της μέγιστης τιμής συγκέντρωσης των κατανομών του πειράματος. Στην ουσία, δηλαδή, η προσομοίωση αγνόησε μία περιοχή με διαμήκες εύρος περίπου ίσο με 150m, στην οποία οι συγκεντρώσεις του πειράματος ήταν μικρότερες από το 0,001 της εισπνευσθείσας συγκέντρωσης.

Επομένως, το συμπέρασμα που εξάγεται, το οποίο ήταν αναμενόμενο δεδομένου ότι υπήρχε αρκετά καλή γνώση των υδρογεωλογικών παραμέτρων και των ποσοτήτων των ιχνηθετών που εισήχθησαν στους υδροφορείς, είναι ότι επιβεβαιώνεται ο καθοριστικός ρόλος της μηχανικής διασποράς. Παράλληλα, οι συντελεστές μηχανικής διασποράς είναι οι παράμετροι που παρουσιάζουν τη μεγαλύτερη αβεβαιότητα ως προς τον προσδιορισμό τους.

Η διαδικασία προσομοίωσης κατέδειξε ότι οι εμπειρικές σχέσεις που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς δεν κατάφεραν να δώσουν τιμές ικανές να προσομοιώσουν το εύρος της ρυπασμένης περιοχής με τις αναλυτικές εξισώσεις. Από τις τιμές που προέκυψαν από τις δοκιμές σύγκλισης στα πειράματα στους σχετικά ομοιογενείς υδροφορείς, προέκυψε ότι οι τιμές των συντελεστών διαμήκους μηχανικής διασποράς είναι μίας τάξης μεγέθους μικρότερες από αυτές του απλού εμπειρικού κανόνα ( $\alpha_x = 0,1x$ ). Αντίθετα, οι συντελεστές εγκάρσιας μηχανικής διασποράς, που προέκυψαν από την προσομοίωση, ήταν στις περισσότερες περιπτώσεις εντός του εύρους των τιμών που προκύπτουν από εμπειρικές σχέσεις ως συνάρτηση του συντελεστή διαμήκους μηχανικής διασποράς. Επίσης, όπως αναμένονταν με βάση τα θεωρητικά δεδομένα για το φαινόμενο της διασποράς, οι τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς που προέκυψαν από την προσομοίωση παρουσιάζουν μια τάση αύξησης με την κλίμακα (scale effect). Τέλος, από την συγκριτική ανάλυση των συντελεστών μηχανικής διασποράς με τις μετρημένες τιμές από τα πειράματα (Ενότητα 6.2.3) βρέθηκε ότι ήταν γενικά ίδιας τάξης μεγέθους.

Τα παραπάνω αποτελέσματα είναι ενθαρρυντικά ως προς τη χρησιμοποίηση αναλυτικών εξισώσεων για την περιγραφή της μεταφοράς των διαλυμένων ρύπων στο υπόγειο νερό σχετικά ομοιογενών υδροφορέων. Επομένως, για αυτή την κατηγορία υδροφορέων, ένα απλό μοντέλο μεταφοράς, όπως η εξίσωση μεταφοράς διαλυμένου ρύπου που υπόκειται σε μονοδιάστατη μεταγωγή και τριδιάστατη διασπορά, μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα για το εύρος της ρυπασμένης περιοχής. Βέβαια, υπάρχουν και προβλήματα στην προσομοίωση, όπως η κατακόρυφη κίνηση του κέντρου μάζας των ιχνηθετών, λόγω διακυμάνσεων του υδροφόρου ορίζοντα ή της διαφοράς πυκνότητας του διαλύματος και του υπογείου νερού. Αυτή η κατακόρυφη κίνηση δεν καθίσταται δυνατό να προσομοιωθεί από τις αναλυτικές λύσεις της εξίσωσης μεταφοράς που θεωρούν μονοδιάστατη μεταγωγή του διαλυμένου ρύπου κατά την οριζόντια διεύθυνση.

#### Περαιτέρω έρευνα

Τα ως άνω συμπεράσματα βασίζονται σε ένα μικρό υποσύνολο φυσικών υδροφορέων, οι οποίοι επιλέχθησαν εν μέρει χάρις σε αυτά τα χαρακτηριστικά (Μπόρντεν, Κέιπ Κοντ: μικρή ανομοιογένεια, μεγάλη περατότητα, Κολόμπους: μεγάλη ανομοιογένεια). Κατόπιν τούτου, θα είχε πρακτική χρησιμότητα η κατηγοριοποίηση του συνόλου των φυσικών υδροφορέων σε ομάδες μικρής/μεγάλης ανομοιογένειας, ή σε ομάδες

## Κεφάλαιο 7: Σύνοψη και συμπεράσματα

μικρής/μέσης/μεγάλης ανομοιογένειας και ο έλεγχος των συμπερασμάτων αυτής της διπλωματικής εργασίας για την κατηγορία μέσης ανομοιογένειας.

## Βιβλιογραφία

### *Ελληνική βιβλιογραφία*

Καββαδάς Μ., 2013: Στοιχεία Περιβαλλοντικής Γεωτεχνικής, Εκδόσεις Τσότρας, Αθήνα

### *Διεθνής βιβλιογραφία*

Adams, E. E., and L. W. Gelhar, 1992: Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 2. Spatial Moments Analysis, Water Resources Research Vol.28, No. 12, pp 3293-3307

Ahsanuzzaman A., R. Kolar and M. Zaman 2003: Limiting Source Dimensions of Three-Dimensional Analytical Point Source Model for Solute Transport, Hydrology Days Proceedings, pp 1-15

American Petroleum Institute, 1994: Transport and fate of dissolved methanol, methyl-tertiary-butyl-ether and monoaromatic hydrocarbons in a shallow sand aquifer, American Petroleum Institute, Health and Environmental Sciences Department, API Publication No. 4601, April 1994

Aronson D., M. Citra, K. Shuler, H. Printup, and P. H. Howard, 1999: Aerobic Biodegradation of Organic Chemicals in Environmental Media: A Summary of Field and Laboratory Studies, Final report SRC TR 99-002, Environmental Science Center, Prepared by Syracuse Research Corporation for U.S Environmental Protection Agency

Arya, A., T. A. Hewett, R. G. Larson and L. W. Lake, 1988: Dispersion and Reservoir Heterogeneity, SPE Reservoir Engineering, pp 139-148

Baetsle, L. H., 1969: Migration of Radionuclides in Porous Media, Progress in Nuclear Energy, Series XII, Health Physics, ed. A. M. F. Duhamel Pergamon Press, Elmsford, New York, pp 707-730

Barker J. F., Patrick G. C. and Major D., 1987: Natural Attenuation of Aromatic Hydrocarbons in a Shallow Sand Aquifer, Ground Water Monitoring Review, Winter 1987, pp 64-72.

Batu, V., 2005: Applied Flow and Solute Transport Modeling in Aquifers: Fundamental Principles and Analytical and Numerical Methods, CRC press

Bear, J., 1972: Dynamics of Fluids in Porous Media, New York, American Elsevier Publishing Company

Bear, J., 1979: Hydraulics of Ground Water, New York, McGraw-Hill

## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Boggs, M. J., S. C. Young, L. M. Beard, L. W. Gelhar, K. R. Rehfeldt, and E. E. Adams, 1992: Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 1. Overview and Site Description, *Water Resources Research* Vol. 28, No.12, pp 3281-3291

Boggs, J. M., L. M. Beard, W. R Waldrop, T. B. Stauffer, W. G. MacIntyre and C. P. Antworth, 1993: Transport of Tritium and Four Organic Compounds During a Natural-Gradient Tracer Experiment (MADE-2), EPRI final report TR-101998, Research project 2485-05, Electric Power Research Institute, Palo Alto, California

Brauner, J. S., and M. A. Widdowson, 2001: Numerical Simulation of a Natural Attenuation Experiment with a Petroleum Hydrocarbon NAPL source, *Ground Water* 39, No. 6, pp 939–952

Cleary, R. and M. Unga., 1978: Report No. 78-WR-15, Water Resources Program, Princeton, New Jersey, Princeton University.

Crank, J., 1975: *The Mathematics of Diffusion*, 2nd ed. (1st ed. 1956), New York, Oxford University press

Curtis, G. P., M. Reinhard, and P. V. Roberts, 1986: A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, 4. Sorption of Organic Solutes and its Influence on Mobility, *Water Resources Research* Vol.22, No. 13, pp 2059-2067

Dagan, G., 1982: Stochastic Modeling of Groundwater Flow by Unconditional and Conditional Probabilities, 2. The Solute Transport, *Water Resources Research* Vol. 18, No.4, pp 835-848

Dagan, G., 1984: Solute Transport in Heterogeneous Porous Formation, *Journal of Fluid Mechanics* 145, pp 151-177

Dagan, G., 1988: Time-Dependent Macrodispersion for Solute Transport in Anisotropic Heterogeneous Aquifers, *Water Resources Research* Vol. 24, No.9, pp 1491-1500

Domenico, P. A., 1987: An Analytical Model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species, *Journal of Hydrology* 91, pp 49–58

Domenico, P. A. and G. A. Robbins, 1985: A New Method of Contaminant Plume Analysis, *Ground Water* Vol. 23, No. 4, pp 476–485

Domenico, P. A. and F. W. Schwartz, 1998: *Physical and Chemical Hydrology*, 2nd ed. (1st ed. 1990), New York, John Wiley & Sons Inc.

Fetter, C. W., 1999: *Contaminant Hydrogeology*, 2nd ed. (1st ed. 1993), Prentice-Hall, Inc.

## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Freeze, R. A., and J. A. Cherry, 1979: Groundwater, New Jersey, Prentice-Hall, Inc.
- Freyberg, D. L., 1986: A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, 2. Spatial Moments and the Advection and Dispersion of Nonreactive Tracers, *Water Resources Research* Vol.22, No. 13, pp 2031-2046
- Garabedian, S. P., L. W. Gelbar and M. A. Celia, 1988: Large-Scale Dispersive Transport in Aquifers: Field Experiments and Reactive Transport Theory, Rep. 315, Ralph M. Parsons Lab., Dep. of Civ. Eng., Mass. Inst. of Technol., Cambridge, 1988.
- Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar, and M. A. Celia, 1991: Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 2. Analysis of Spatial Moments for a Nonreactive Tracer, *Water Resources Research* Vol. 27, No. 5, pp 911-924
- Gelhar, L. W., A. L. Gutjahr and R. L. Naff, 1979: Stochastic Analysis of Macrodispersion in a Stratified Aquifer, *Water Resources Research* Vol.15, No.6, pp 1387-1397
- Gelhar, L. W., and C. L. Axness, 1983: Three-Dimensional Stochastic Analysis of Macrodispersion in Aquifers, *Water Resources Research* Vol.19, No 1, pp 161-180
- Gelhar, L. W., A. Mantoglou, C. Welty and K. R. Rehfeldt, 1985: A Review of Field-Scale Physical Solute Transport Processes in Saturated and Unsaturated Porous Media, Rep. EPRI EA-4190, Project 2485-5, Electric Power Research Institute, Palo Alto, California
- Gelhar, L. W., 1986: Stochastic Subsurface Hydrology from Theory to Applications, *Water Resources Research* Vol. 22, No. 9, pp 1355-1455
- Gelhar, L. W., C. Welty and K. R. Rehfeldt, 1992: A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers, *Water Resources Research* Vol. 21, No. 7, pp 1955–1974.
- Hess, K. M., Wolf, S. H. and Celia, M. A., 1992: Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 3. Hydraulic Conductivity Variability and Calculated Macrodispersivities, *Water Resources Research* Vol. 28, No. 8, pp 2011-2027.
- Hunt, B., 1978: Dispersive Sources in Uniform Ground-Water Flow, *Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of American Society of Civil Engineering*, 104, pp 75-85
- Killey, R. W. D., and G. L. Moltyaner, 1988: Twin Lake Tracer Tests: Setting, Methodology and Hydraulic Conductivity Distribution, *Water Resources Research* Vol. 24, No. 10, pp 1585-1612

## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

LaGrega, M., P. L. Buckingham and J. C. Evans, 1994: Hazardous Waste Management, International ed., McGraw Hill, Inc.

Lallemand-Barres, A. and P. Peaudecerf, 1978: Recherche des Relations Entre la Valeur de la Dispersivite Macroscopique d'un Milieu Aquifer, ses Autres Caracteristiques et les Conditions de Mesure, Bulletin de Recherches Geologiques et Minleres, 2e Serie., Section III, No. 4, pp 277-287

LeBlanc, D. R., 1984a: Sewage Plume in a Sand and Gravel Aquifer. Cape Cod, Massachusetts, U. S. Geological Survey, Water Supply Pap., 2218,

LeBlanc, D. R., 1984b: Movement and Fate of Solutes in a Plume of Sewage-Contaminated Ground Water, Cape Cod, Massachusetts, U.S. Geological Survey Toxic Waste Ground-Water Contamination Program, U.S. Geological Survey, Open File Rep., 84-475

LeBlanc, D. R., S. P. Garabedian, K. M. Hess, L. W. Gelhar, R. D. Quadri, K. G. Stollenwerk and W. W. Wood, 1991: Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 1. Experimental Design and Observed Tracer Movement, Water Resources. Research Vol. 27, No. 5, pp 895-910

MacFarlane, D. S., J. A. Cherry, R. W. Gillham and E. A. Sudicky, 1983: Migration of Contaminants in Groundwater at a Landfill: A Case Study, 1, Groundwater Flow and Plume Delineation, Journal of Hydrology 63, pp 1-29

Mackay, D. M., D. L. Freyberg, P. V. Roberts and J. A. Cherry, 1986: A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, 1. Approach and Overview of Plume Movement, Water Resources Research Vol. 22, No. 13, pp 2017-2029

Martin-Hayden, J. and G. Robbins, 1997: Plume Distortion and Apparent Attenuation due to Concentration Averaging in Monitoring Wells, Ground Water Vol.35, No. 2, pp 339-346

Moltyaner, G. L. and R. W. D. Killey, 1988: Twin Lake Tracer Tests: Longitudinal Dispersion, Water Resources Research Vol.24, No. 10, pp 1613-1627

Moltyaner, G. L. and R. W. D. Killey, 1988: Twin Lake Tracer Tests: Transverse Dispersion, Water Resources Research Vol. 24, No. 10, pp 1628-1637

Molz, F. 2015: Advection, Dispersion, and Confusion, Ground Water Vol. 53, No.3, pp 348-353

Neuman, S.P., 1990: Universal Scaling of Hydraulic Conductivities and Dispersivities in Geologic Media, Water Resources Research Vol.26, No. 8, pp 1749-1758

## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ogata, A. and R. Banks, 1961: A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media, USGS Prof. Pap. No. 411-A. Reston, Virginia, USGS

Patrick G. C. and J. F. Barker, 1985: A Natural-Gradient Tracer Study of Dissolved Benzene, Toluene and Xylenes in Ground Water, Second Annual Can/Amer. Conf. Hydrogeol. Hazardous Wastes in Ground Water: A Soluble Dilemma, Banff, Canada, June 1985, National Water Well Association, Dublin, Ohio, pp 141-147

Perkins, T. K. and O. C. Johnson, 1963: A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media, Society of Petroleum Engineers Journal 3, pp 70-84

Pickens, J. F. and G. E. Grisak, 1981a: Scale-Dependent Dispersion in a Stratified Granular Aquifer, Water Resources Research Vol. 17, No. 4, pp 1191-1211

Pickens, J. F. and G. E. Grisak, 1981b: Modeling of Scale-Dependent Dispersion in Hydrogeologic Systems, Water Resources Research Vol. 17, No. 6, pp 1701-1711

Rehfeldt, K. R., J. M. Boggs and L. W. Gelhar, 1992: Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 3. Geostatistical Analysis of Hydraulic Conductivity, Water Resources Research Vol. 28, No. 12, pp 3309-3324

Roberts, P. V., M. N. Goltz and D. M. Mackay, 1986: A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, 3. Retardation Estimates and Mass Balances for Organic Solutes, Water Resources Research Vol. 22, No. 13, pp 2047-2058

Schirmer, M. and Barker, J. F., 1998: A Study of Long-Term MTBE Attenuation in the Borden Aquifer, Ontario, Canada, Ground Water Monitoring & Remediation, Spring 1998, pp 113-122

Schirmer, M., B. J. Butler, J. F. Barker, C. D. Church and K. Schirmer, 1999: Evaluation of Biodegradation and Dispersion as Natural Attenuation Processes of MTBE and Benzene at the Borden Field Site, Physics and Chemistry of the Earth, Part B: Hydrology, Oceans and Atmosphere Vol. 24, Issue 6, pp 557-560

Schwarzenback, R. P., and J. Westall, 1981: Transport of Nonpolar Organic Compounds from Surface Water to Ground Water. Laboratory Sorption Studies, Environmental Science and Technology Vol. 15, No. 11, pp 1360-1367

Stollenwerk, K. G., 1995: Modeling the Effects of Variable Groundwater Chemistry on Adsorption of Molybdate, Water Resources Research Vol. 31, No.2, pp 347-357

Stollenwerk, K. G., 1998: Molybdate Transport in a Chemically Complex Aquifer: Field Measurements Compared with Solute-Transport Model Predictions, Water Resources Research Vol. 34, No.10, pp 2727-2740



## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Suarez, M. P. and Rifai, H. S., 1999: Biodegradation Rates for Fuel Hydrocarbons and Chlorinated Solvents in Groundwater, *Bioremediation Journal* 3, No. 4, pp 337-362.

Sudicky, E. A., 1986: A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, Spatial Variability of Hydraulic Conductivity and its Role in the Dispersion Process, *Water Resources Research* Vol.22, No. 13, pp 2069-2082

Sun, N. Z., 1996: *Mathematical Modeling of Groundwater Pollution*, Springer, New York

U.S. EPA. 1993: Determination of inorganic anions by ion chromatography, John D. Pfaff, Revision 2.1, August 1993

U.S. EPA. 2000: BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual Version 1.0, EPA/600/R-00/008, Washington, DC: US EPA, Office of Research and Development

U.S. EPA. 2002: BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System. Version 2.2 User's Manual Addendum, Washington, DC: U.S. EPA.

Valocchi, A.J., C.J. Werth, J.J. Decker, G. Hammond, P. Zhou, M. Hafiz, 2001: Approximate Domenico Solution: 3D Dispersion, Continuous Input, First-Type Boundary Condition, *Interactive Models for Groundwater Flow and Solute Transport*, Ανακτήθηκε 10 Μαρτίου 2016 από, [http://hydrolab.illinois.edu/gw\\_applets//domenico/tutorials/dom3/domen\\_3d.html](http://hydrolab.illinois.edu/gw_applets//domenico/tutorials/dom3/domen_3d.html)

West, M. and B. Kueper, and M. Unger, 2007: On the Use and Error of Approximation in the Domenico (1987) Solution, *Ground Water* 45, no. 2, pp 126-135

Wexler, E. 1992: Analytical Solutions for One-, Two-, and Three-dimensional Solute Transport in Groundwater Systems with Uniform flow. In *Techniques of Water Resources Investigations of the United States Geological Survey*, chap. B7, Book 3, Applications of Hydraulics, pp 53-55.

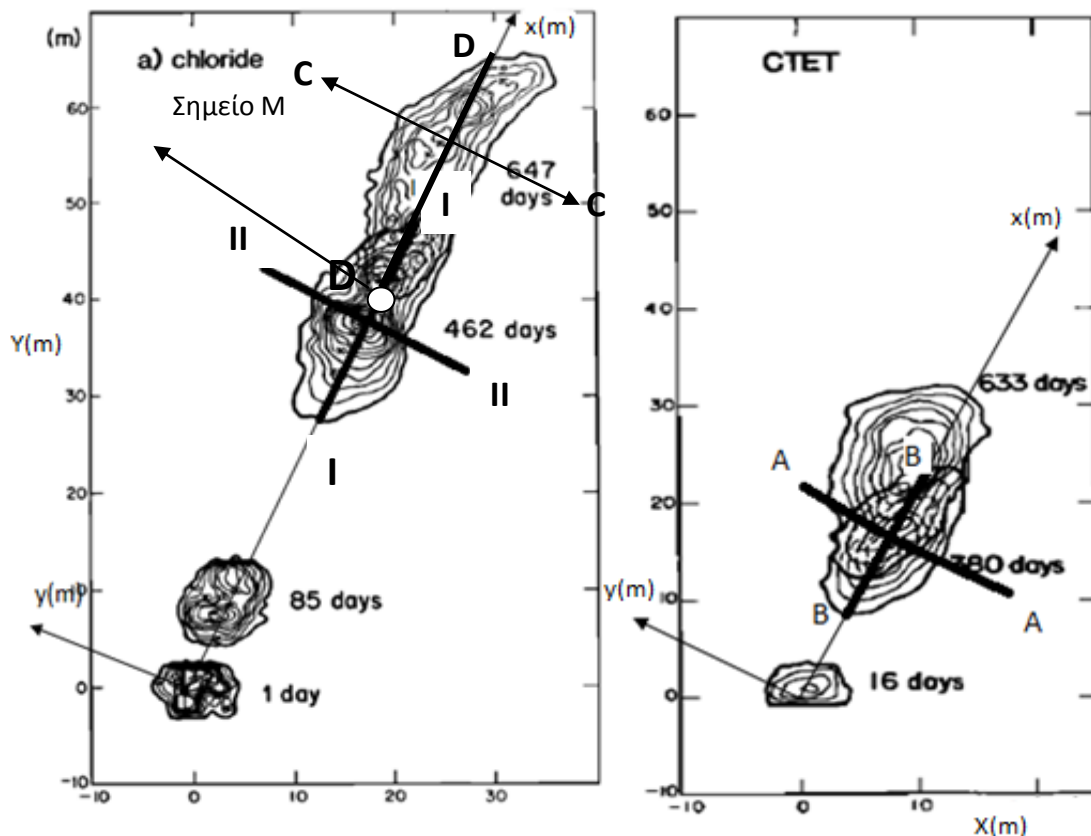
Xu, M. and Y. Eckstein, 1995: Use of Weighted Least-Squares Method in Evaluation of the Relationship Between Dispersivity and Scale, *Ground Water* Vol. 33, No.6, pp 905- 908

Zheng, C., M. Bianchi, S.M. Gorelick, 2011: Lessons Learned from 25 Years of Research at the MADE Site, *Ground Water* Vol. 49, No.5, pp 649-662

## Παραρτήματα

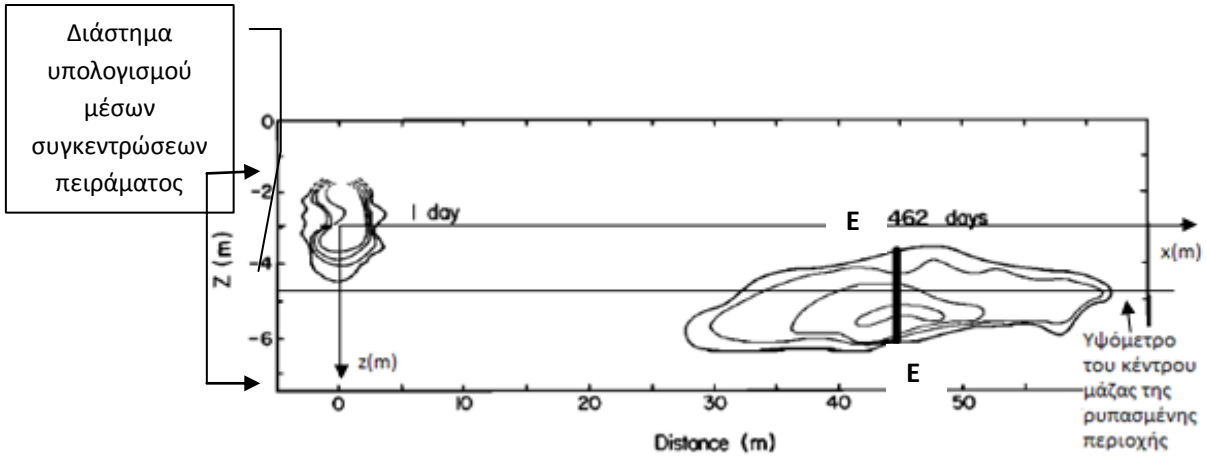
A. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν

Οι τομές I-I και B-B (Σχήμα A.1) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου και τετραχλωρομεθανίου, τις χρονικές στιγμές 462 και 380 ημέρες μετά την εισπίεση αντίστοιχα, πραγματοποιούνται κατά μήκος του άξονα x. Οι αντίστοιχες τομές στον άξονα γ, II-II και A-A (Σχήμα A.1) στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος και τετραχλωρομεθανίου, τις χρονικές στιγμές 462 και 380 ημέρες μετά την εισπίεση αντίστοιχα, βρίσκονται σε απόσταση από την πηγή 40,7 και 16,7m αντίστοιχα. Τέλος, πραγματοποιείται τομή στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου, παράλληλη στον άξονα z (τομή E-E, Σχήμα A.2), τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση, στο σημείο του άξονα x=45m.



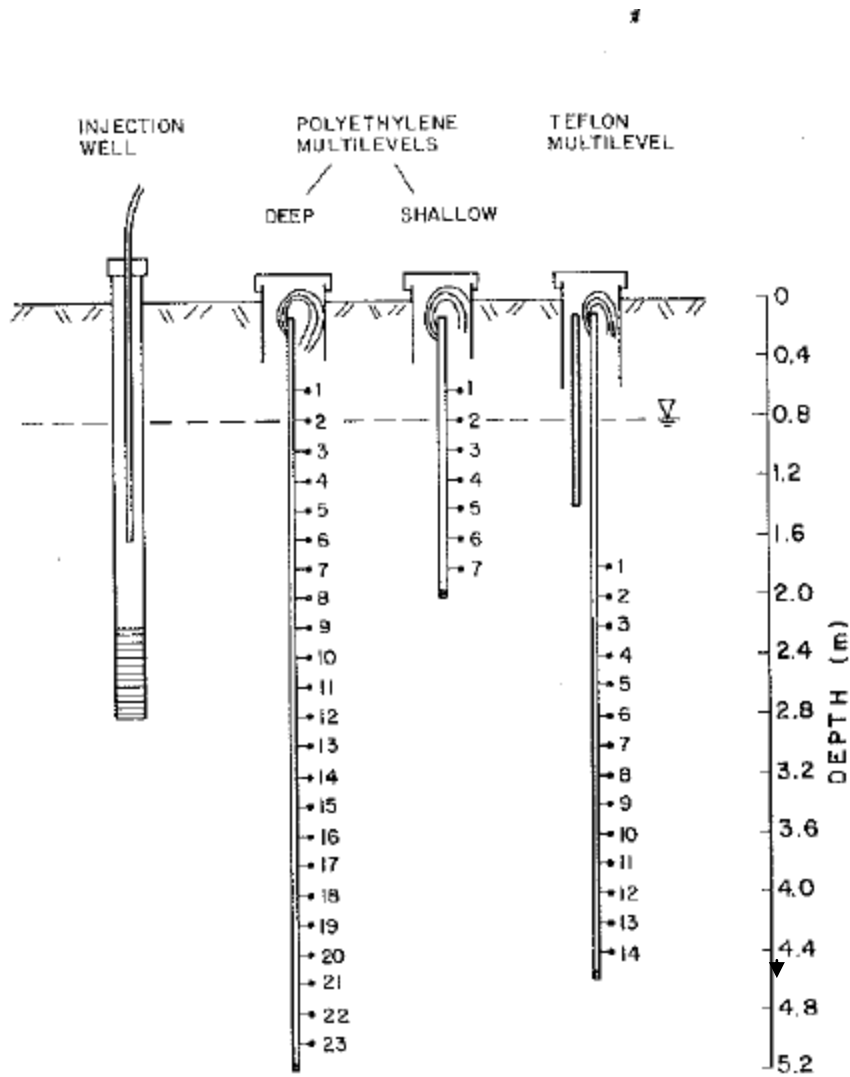
Σχήμα A.1 Κατανομές των μέσων συγκεντρώσεων (κατά την κατακόρυφη έννοια) του ιόντος χλωρίου και του τετραχλωρομεθανίου (CTET) (το διάστημα εύρεσης των μέσων συγκεντρώσεων για το χλώριο είναι από  $Z=-1,5$  έως  $Z=-7,5$ m και για το τετραχλωρομεθάνιο από  $Z=-1,5$  έως  $Z=-6$ m). Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος για τις χρονικές στιγμές 462, 647 ημέρες μετά την εισπίεση ξεκινούν από τα 5mg/l και αυξάνονται κατά 5mg/l. Αντίστοιχα, του τετραχλωρομεθανίου για τις χρονικές στιγμές 380 και 633 ημέρες ξεκινούν από 0,1μg/l και αυξάνονται κατά 0,1μg/l (Mackay et al. 1986)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ



Σχήμα A.2 Κατακόρυφες κατανομές των συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων για τη χρονική στιγμή 462 ημέρες μετά την εισπίεση είναι 10,30,100 και 300 mg/l (Mackay et al. 1986)

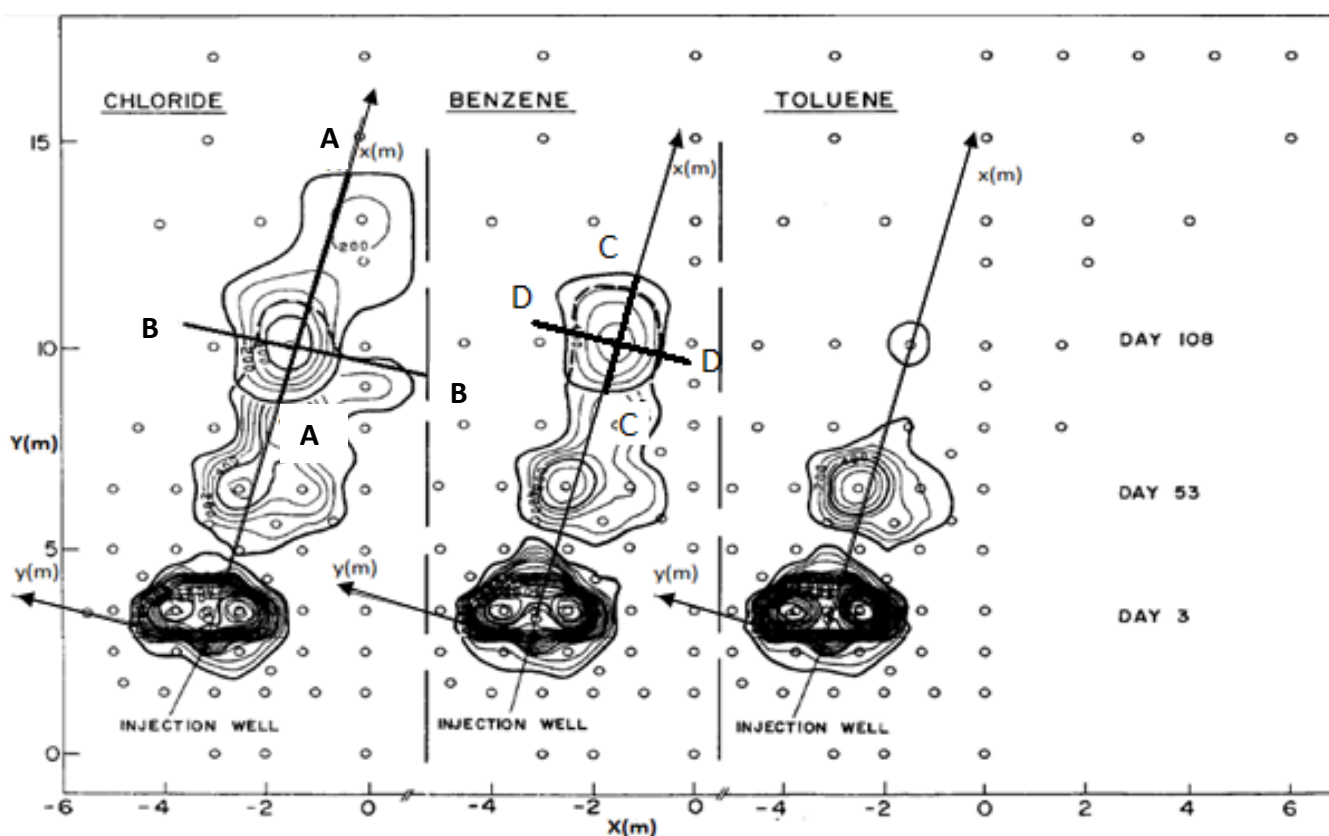
Β. Τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) στο πείραμα εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν



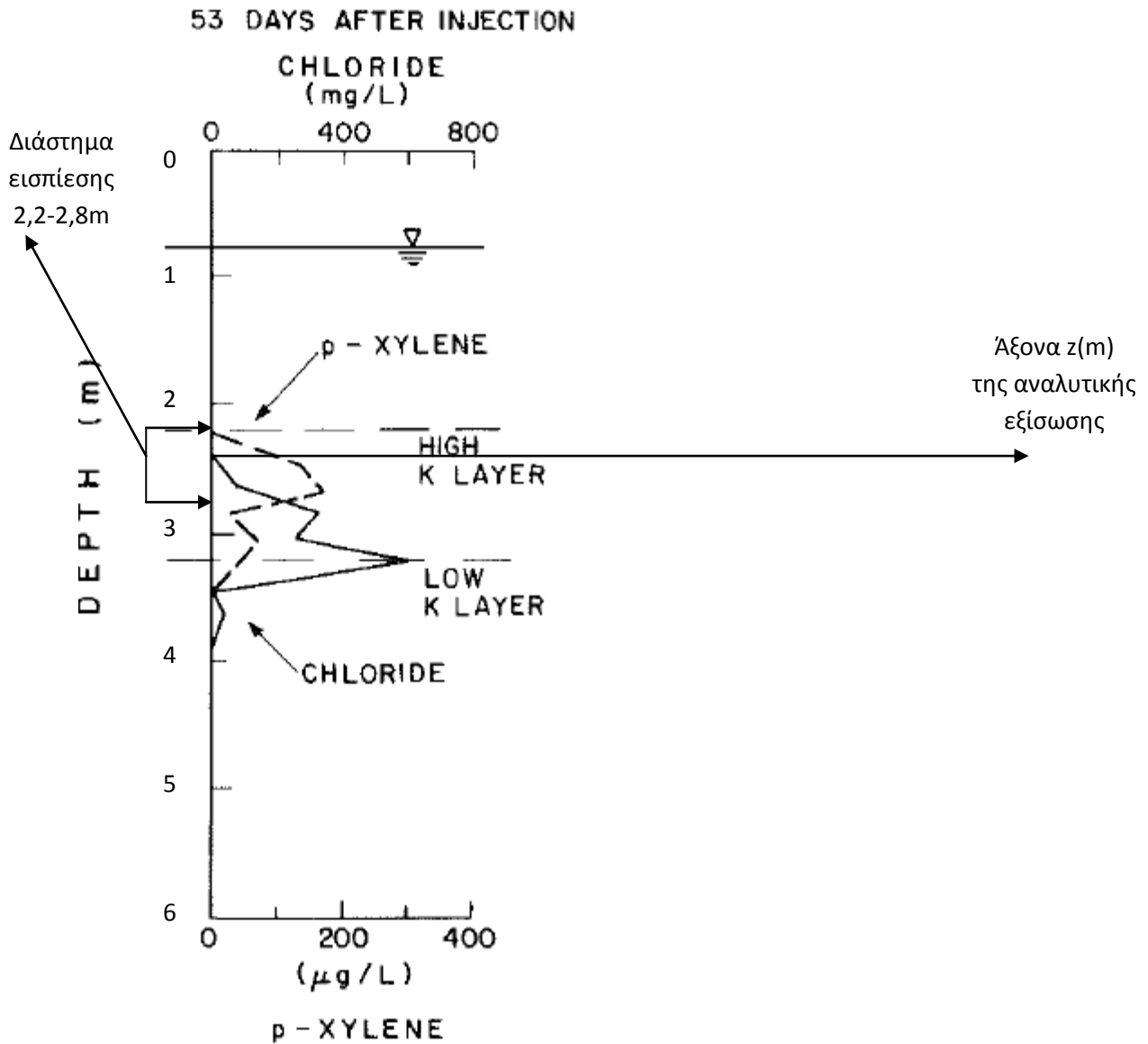
Σχήμα Β.1 Τύποι πηγαδιών δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (multilevel sampling-MLS) του δικτύου δειγματοληψίας στο Μπόρντεν (Patrick και Barker 1985)

### Γ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν

Οι τομές A-A και C-C στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου και βενζολίου τη χρονική στιγμή 108 ημέρες μετά την εισπίεση, πραγματοποιούνται κατά μήκος του άξονα x. Παράλληλα οι τομές B-B και D-D στις ίδιες καμπύλες του χλωριόντος και βενζολίου, τη χρονική στιγμή 108 ημέρες μετά την εισπίεση, βρίσκονται σε απόσταση από την πηγή ίση με 7,4 και 7,6m αντίστοιχα. Τέλος, στο Σχήμα Γ.2 παρουσιάζεται η κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος, σε πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται σε απόσταση  $x=3\text{m}$  από τη σημείο εισπίεσης, τη χρονική στιγμή  $t=53$  ημέρες μετά την εισπίεση.



Σχήμα Γ.1 Κατανομές των συγκεντρώσεων που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση του ιόντος χλωρίου, βενζολίου και τολουολίου. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος ξεκινούν από τα  $100 \text{ (mg/l)m}$  και αυξάνονται κατά  $100 \text{ (mg/l)m}$ . Αντίστοιχα, του βενζολίου ξεκινούν από τα  $200 \text{ (mg/l)m}$  και αυξάνονται κατά  $200 \text{ (mg/l)m}$ . Τέλος, για το τολουόλιο, 53 ημέρες μετά την εισπίεση, οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων ξεκινούν από τα  $100 \text{ (mg/l)m}$  και αυξάνονται κατά  $100 \text{ (mg/l)m}$  ενώ 108 ημέρες μετά την εισπίεση, η καμπύλη αντιστοιχεί σε  $50 \text{ (mg/l)m}$  (Barker, Patrick και Major 1987)

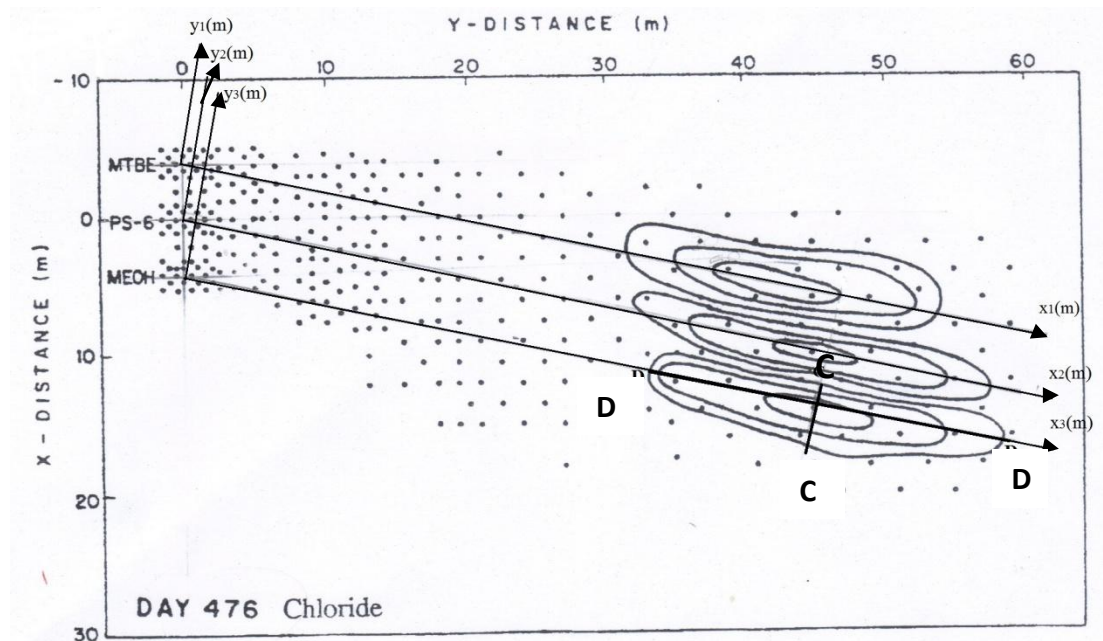


Σχήμα Γ.2 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος και του p-ξυλολίου, 53 ημέρες μετά την εισπίεση, σε πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται 3m από το σημείο εισπίεσης (Patrick και Barker 1985)

Δ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν

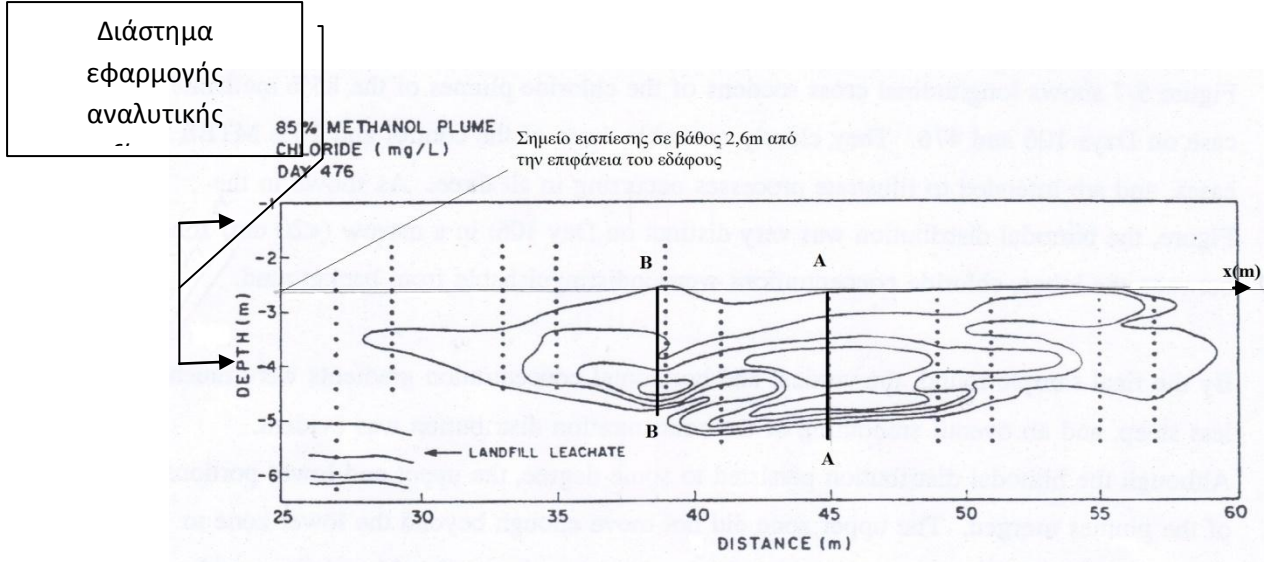
### A) Ιχνηθέτης

Η τομή D-D (Σχήμα Δ.1) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου που προκύπτουν από το διάλυμα εισπίεσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, πραγματοποιείται κατά μήκος του άξονα x. Παράλληλα η τομή C-C (Σχήμα Δ.1) στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου, τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, βρίσκεται σε απόσταση από την πηγή ίση με 45m. Τέλος πραγματοποιούνται τομές παράλληλες στον άξονα z (τομές B-B και A-A, Σχήμα Δ.2) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση, στα σημεία του άξονα  $x=38,5$  και  $x=45m$  αντίστοιχα.

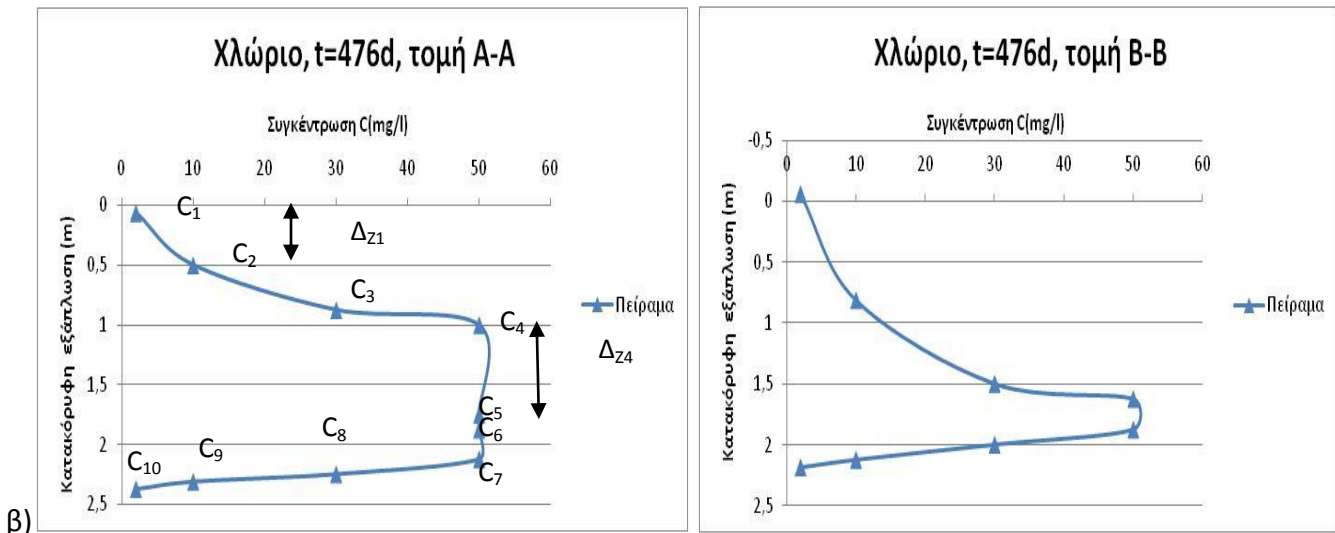


Σχήμα Δ.1 Κατανομές των συγκεντρώσεων του χλωριόντος που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος έχουν τιμές 10, 20 και 50 (mg/l)m και για τα τρία διαλύματα εισπίεσης και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ



α)



β)

Σχήμα Δ.2 Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος που προκύπτει από το διάλυμα εισπίεσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε τιμές συγκεντρώσεων ίσες με 2, 10, 30 και 50 mg/l, για τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994)

Για την επίλυση του προβλήματος με τις μονάδες των συγκεντρώσεων του πειράματος, πραγματοποιήθηκαν οι Τομές A-A και B-B κατά τη διεύθυνση του άξονα z, στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος χλωρίου του Σχήματος Δ.2. Από τις παραπάνω τομές προέκυψαν οι κατανομές συγκεντρώσεων του πειράματος του Σχήματος Δ.2β. Εφαρμόζεται τραπεζοειδής ολοκλήρωση στις δύο κατανομές του Σχήματος Δ.2β με βάση την παρακάτω εξίσωση:

$$C_{int} = \left[ \frac{(C_1+C_2)}{2} * \Delta_{z1} + \frac{(C_2+C_3)}{2} * \Delta_{z2} \dots + \frac{(C_9+C_{10})}{2} * \Delta_{z9} \right] \quad (\Delta.3)$$

Όπου  $C_i$  είναι η συγκέντρωση σε κάθε σημείο που η τομή κόβει τις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων και  $\Delta_{z_i}$  είναι η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων τομής με τις καμπύλες. Οι συγκεντρώσεις που προκύπτουν από την κατακόρυφη ολοκλήρωση με βάση την εξίσωση (Δ.3) είναι  $C_{int}=78$  και  $C_{int}=44,4$

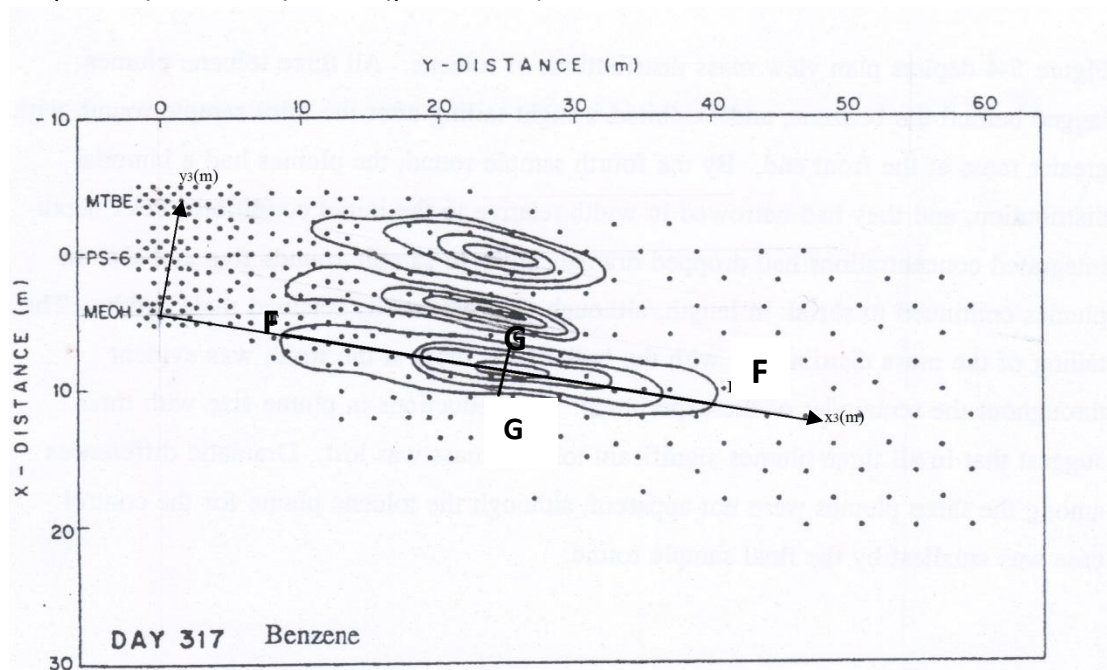


(mg/l)m για την τομή A-A και B-B αντίστοιχα. Στη συνέχεια, συγκρίνονται οι παραπάνω συγκεντρώσεις με τις συγκεντρώσεις του Σχήματος Δ.1 στα αντίστοιχα σημεία του άξονα x που έγιναν οι τομές. Συμπεραίνεται ότι οι συγκεντρώσεις που προκύπτουν από την εξίσωση (Δ.3) για τα σημεία του άξονα x όπου έγιναν οι τομές βρίσκονται εντός των ορίων που θέτουν οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Δ.1. Επομένως, τέθηκε μονάδα μέτρησης των καμπύλων ίσων συγκεντρώσεων του Σχήματος Δ.1 το (mg/l)m.

## B) Οργανικοί ρύποι

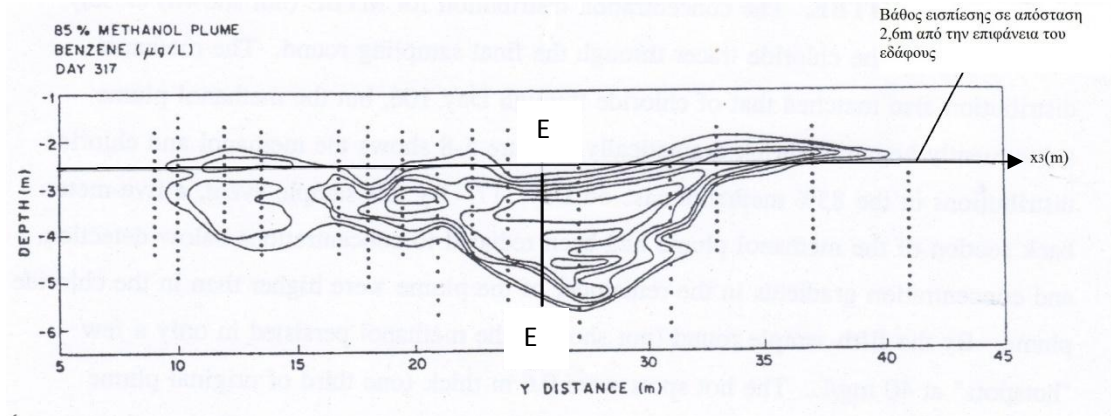
### 1) Βενζόλιο

Η τομή F-F (Σχήμα Δ.3) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βενζολίου που προκύπτουν από το διάλυμα εισπίεσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, τη χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση, πραγματοποιείται κατά μήκος του άξονα x. Παράλληλα η τομή G-G (Σχήμα Δ.3) στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βενζολίου, τη χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση, βρίσκεται σε απόσταση από την πηγή ίση με 25,3m. Τέλος πραγματοποιείται τομή παράλληλη στον άξονα z (τομή E-E, Σχήμα Δ.4) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βενζολίου, τη χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση, στο σημείο του άξονα x=25,3m.



Σχήμα Δ.3 Κατανομές των συγκεντρώσεων του βενζολίου που προκύπτουν από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βενζολίου έχουν τιμές 1, 100, 500 και 1000 (μg/l)m και για τα τρία διαλύματα εισπίεσης και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίεση (American Petroleum Institute 1994)

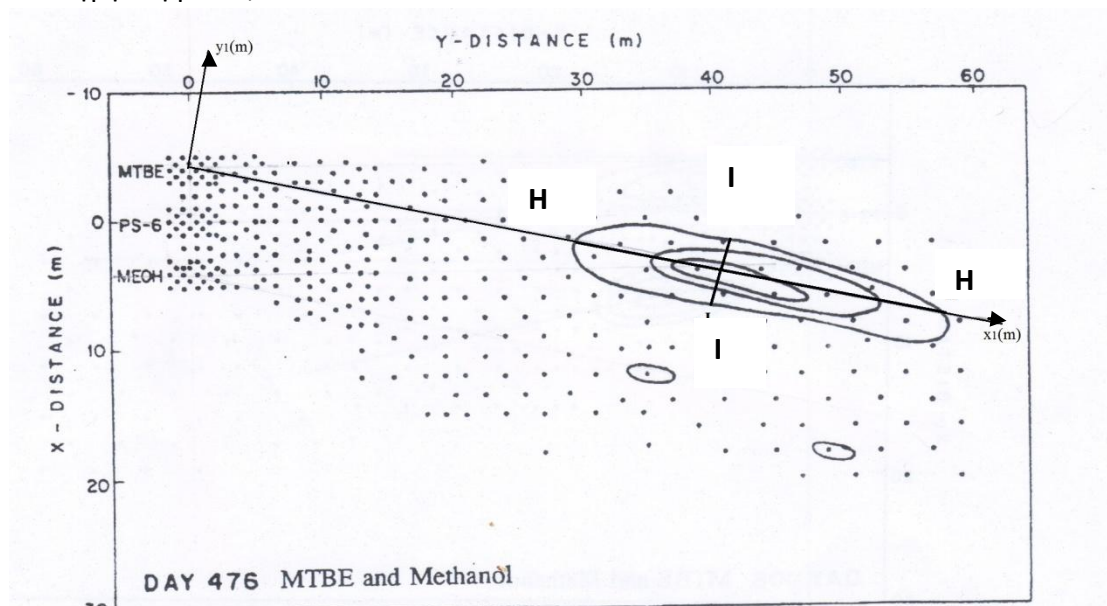
## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ



Σχήμα Δ.4 Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου που προκύπτει από το διάλυμα εισπίσης με 15% βενζίνη και 85% μεθανόλη, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε τιμές συγκεντρώσεων ίσες με 1, 10, 50, 100, 500 και 1000  $\mu\text{g/l}$ , για τη χρονική στιγμή 317 ημέρες μετά την εισπίση (American Petroleum Institute 1994)

### 2) MTBE

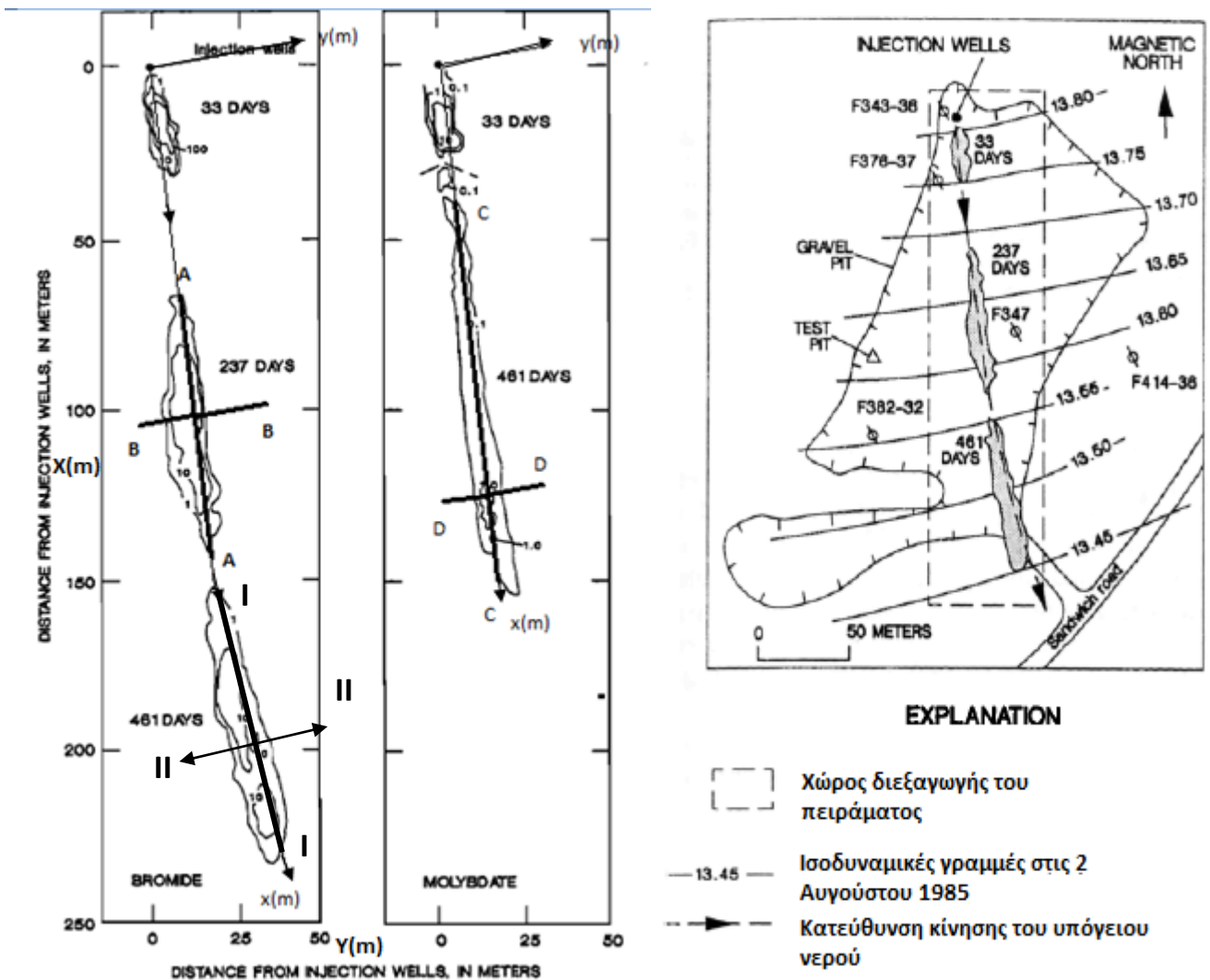
Η τομή Η-Η (Σχήμα Δ.5) στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του MTBE τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίση, πραγματοποιείται κατά μήκος του άξονα x. Παράλληλα η τομή Ι-Ι (Σχήμα Δ.5) στις ίδιες καμπύλες του MTBE, τη χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίση, βρίσκεται σε απόσταση από την πηγή ίση με 40,5m.



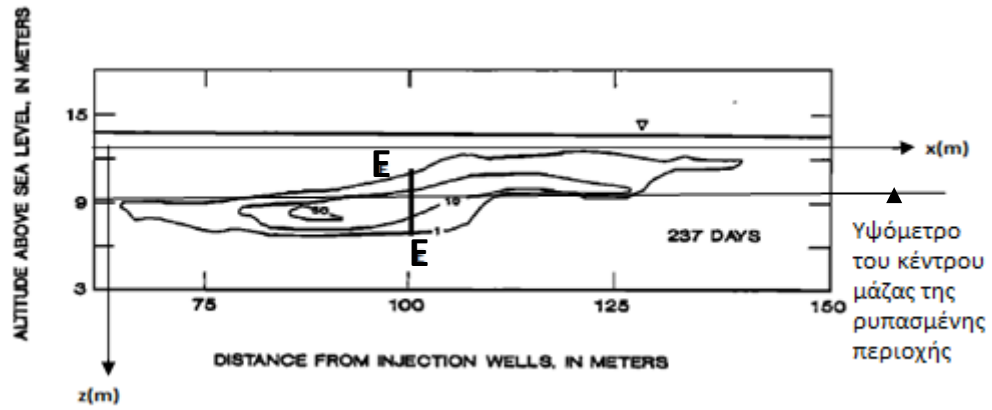
Σχήμα Δ.5 Κατανομή των συγκεντρώσεων του MTBE που προκύπτει από κατακόρυφη ολοκλήρωση σε κάθε πηγάδι δειγματοληψίας. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του MTBE έχουν τιμές 1, 20 και 50 ( $\text{mg/l}$ )m και αντιστοιχούν σε χρονική στιγμή 476 ημέρες μετά την εισπίση (American Petroleum Institute 1994)

Ε. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης ανόργανων ρύπων στο Κέιπ Κοντ

Οι τομές A-A και C-C στις καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου και διοξίδο(διοξο)μολυβδαινίου ( $\text{MoO}_4^{2-}$ ), τις χρονικές στιγμές 237 και 461 ημέρες μετά την εισπίεση αντίστοιχα, έχουν μηδενική εγκάρσια απόσταση από την πηγή ( $y=0$ ). Παράλληλα οι τομές B-B και D-D στις ίδιες καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων, τις χρονικές στιγμές 237 και 461 ημέρες μετά την εισπίεση, βρίσκονται σε απόσταση από την πηγή 102 και 127m αντίστοιχα. Τέλος πραγματοποιείται τομή παράλληλη στον άξονα z (τομή E-E, Σχήμα Ε.2), στο σημείο του άξονα  $x=102\text{m}$ .



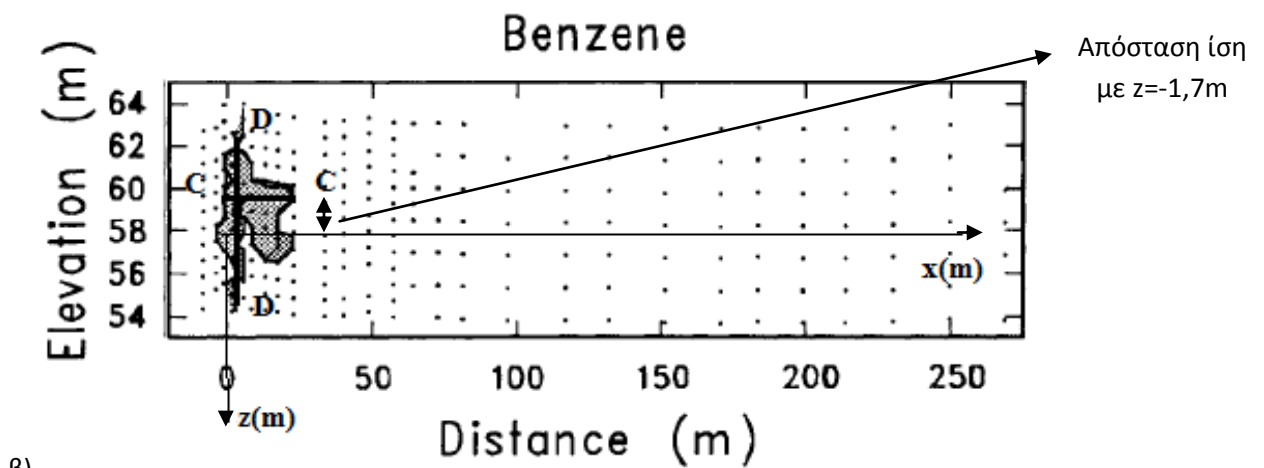
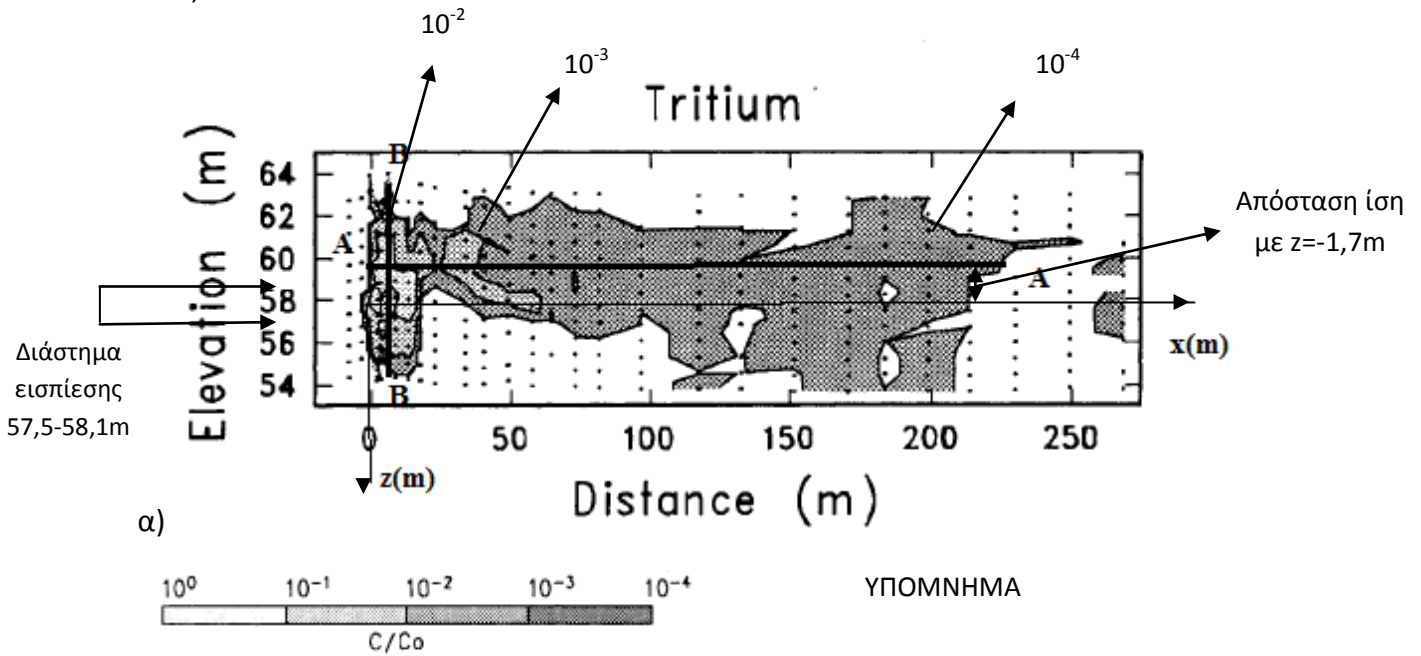
Σχήμα Ε.1 Κατανομές των μεγίστων συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου και διοξίδο(διοξο)μολυβδαινίου και η κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού όπως προκύπτει από τις ισοδυναμικές γραμμές στις 2 Αυγούστου 1985. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων του βρωμιόντος αντιστοιχούν σε 1 και 10 mg/l και του μολυβδαινικού ιόντος σε 0,1 και 1 mg/l (LeBlanc et al. 1991)



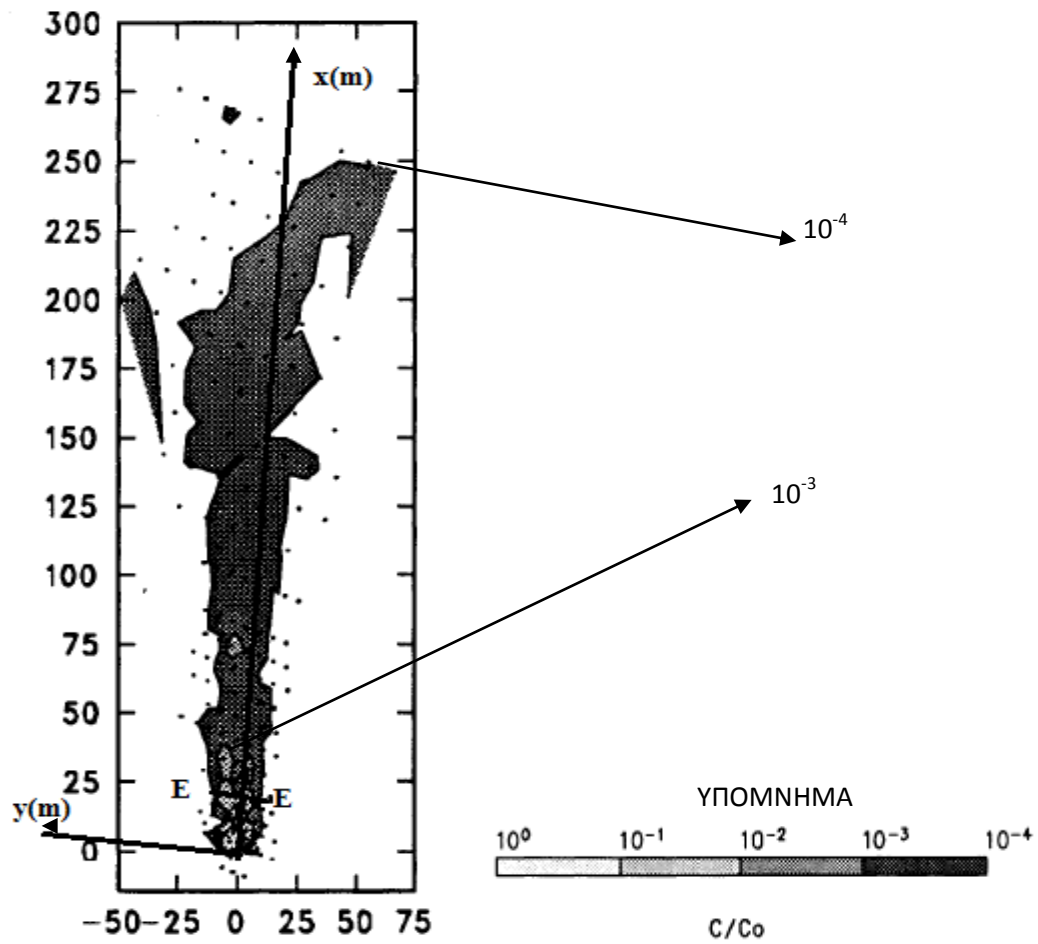
Σχήμα E.2 Κατακόρυφη κατανομή των συγκεντρώσεων του ιόντος βρωμίου, τη χρονική στιγμή 237 ημέρες μετά την εισπίεση, κατά μήκος της κατεύθυνσης κίνησης του υπόγειου νερού. Οι καμπύλες ίσων συγκεντρώσεων αντιστοιχούν σε 1, 10 και 50mg/l (LeBlanc et al. 1991)

**Z. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του δεύτερου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-2) στο Κολόμπους**

Οι τομές A-A (Σχήμα Z.1α) και C-C (Σχήμα Z.1β) του τριτίου και βενζολίου βρίσκονται σε υψόμετρο 59,5m (απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,7m$ ) και έχουν μηδενική εγκάρσια απόσταση από την πηγή ( $y=0$ ). Παράλληλα οι τομές B-B και D-D (Σχήμα Z.1) βρίσκονται σε απόσταση από την πηγή ίση με 6,7 και 3,3m αντίστοιχα. Τέλος η κατανομή του Σχήματος Z.2 αντιστοιχεί σε οριζόντια τομή σε υψόμετρο 59,5m (απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,7m$ ). Σε αυτήν την κατανομή πραγματοποιήθηκε τομή κάθετη στον άξονα x (τομή E-E, Σχήμα Z.2), στο σημείο  $x=21,8m$ .



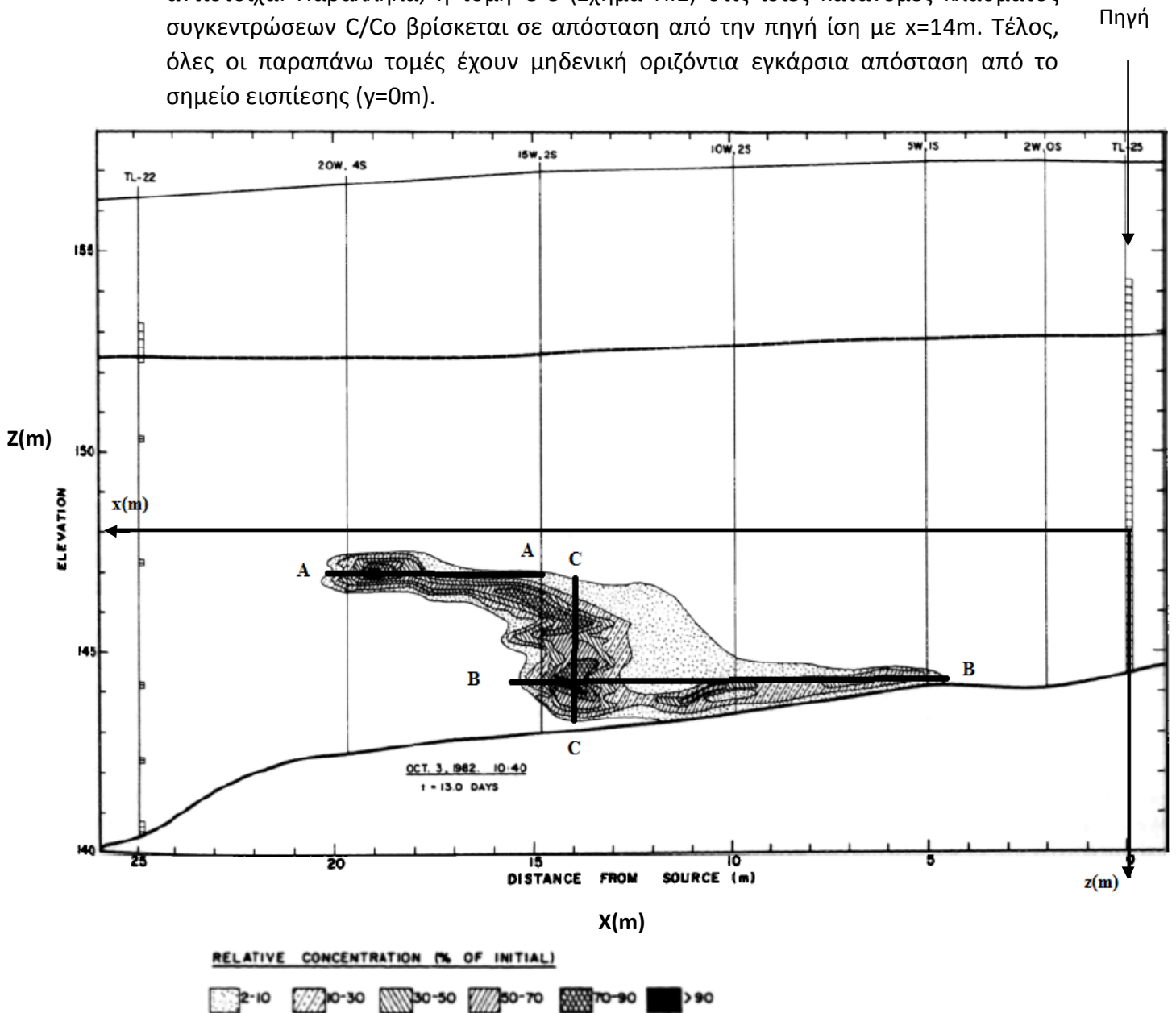
Σχήμα Z.1 Κατακόρυφη κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του τριτίου (α) και βενζολίου (β), κατά τη κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (άξονας x), 328 ημέρες μετά την εισπίεση (Boggs et al. 1993)



Σχήμα Z.2 Κατανομή των συγκεντρώσεων του τριτίου σε οριζόντια τομή σε υψόμετρο 59,5m, τη χρονική στιγμή  $t=328$  ημέρες μετά την εισπίεση (Boggs et al. 1993)

Η. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του πρώτου πειράματος εισπίεσης ραδιοϊσοτόπου στο Τουίν Λέικ

Οι τομές A-A και B-B (Σχήμα Η.1) στις κατανομές του κλάσματος συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του ιωδίου-131, τη χρονική στιγμή  $t=13$  ημέρες μετά την εισπίεση, βρίσκονται σε κατακόρυφη απόσταση από το κέντρο μάζας της πηγής ίση με  $z=1$  και  $z=3,8\text{m}$  αντίστοιχα. Παράλληλα, η τομή C-C (Σχήμα Η.1) στις ίδιες κατανομές κλάσματος συγκεντρώσεων  $C/C_0$  βρίσκεται σε απόσταση από την πηγή ίση με  $x=14\text{m}$ . Τέλος, όλες οι παραπάνω τομές έχουν μηδενική οριζόντια εγκάρσια απόσταση από το σημείο εισπίεσης ( $y=0\text{m}$ ).

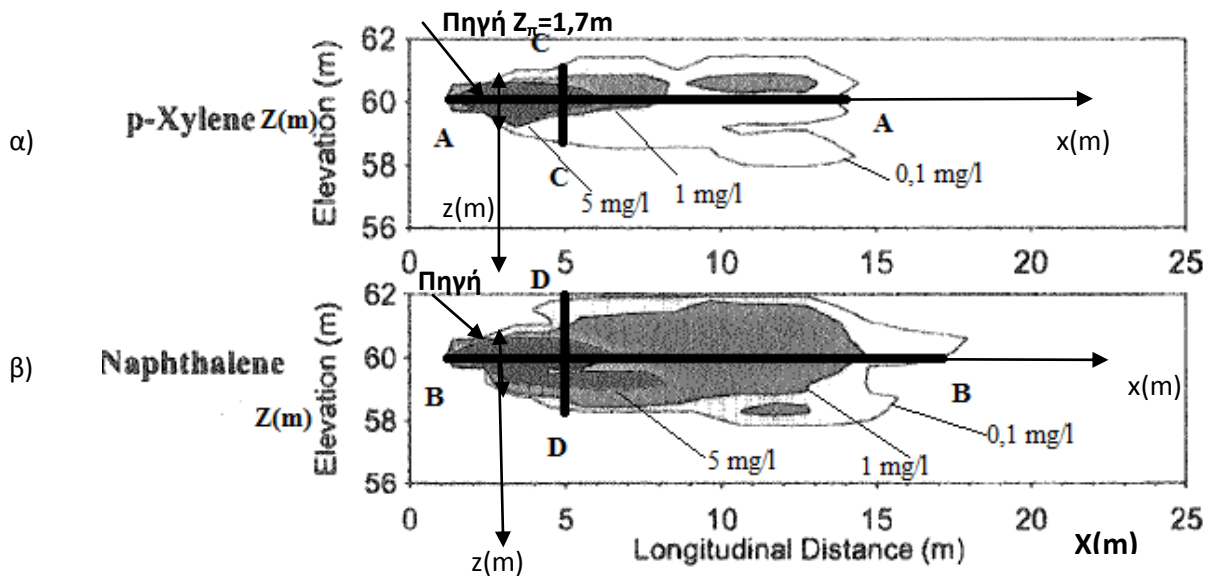


ΥΠΟΜΝΗΜΑ

Σχήμα Η.1 Κατακόρυφη κατανομή του κλάσματος των συγκεντρώσεων  $C/C_0$  του ιωδίου-131, κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (άξονας  $x$ ), 13 ημέρες μετά την εισπίεση (Killey και Molyaner 1988)

Θ. Οι κατανομές των συγκεντρώσεων του τρίτου πειράματος μακροδιασποράς (MADE-3) στο Κολόμπους

Οι τομές A-A και B-B (Σχήμα Θ.1) του ρ-ξυλολίου και της ναφθαλίνης βρίσκονται σε υψόμετρο 60m (απόσταση από το κέντρο μάζας της πηγής ίση με  $z=0,7m$ ) και έχουν εγκάρσια απόσταση από την πηγή ( $y=4m$ ). Παράλληλα οι τομές C-C και D-D (Σχήμα Θ.1) βρίσκονται σε απόσταση από την πηγή ίση με  $x=5m$ .



Σχήμα Θ.1 Κατακόρυφες κατανομές των συγκεντρώσεων του ρ-ξυλολίου (α) και της ναφθαλίνης (β) κατά τη κατεύθυνση της τομής (I-I) που απέχει 4m από τον άξονα x, 278 ημέρες μετά την έναρξη του πειράματος (Brauner και Widdowson 2001)



## I. Παραδείγματα υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν

### I.1 Ιόν χλωρίου

#### 1<sup>ο</sup> παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης του χλωριόντος

Αυτή η ενότητα και οι επόμενες που ακολουθούν στο παράρτημα εξηγούν με λεπτομέρειες τους υπολογισμούς και τις παραδοχές οι οποίες απαιτούνται για να γίνει δυνατή η σύγκριση (α) των δεδομένων που αντλήθηκαν από τα σχήματα των δημοσιεύσεων που προέκυψαν από τις επί τόπου δοκιμές με (β) τα αποτελέσματα της εκάστοτε αναλυτικής λύσης.

Υπενθυμίζεται ότι η σύγκριση γίνεται σε τομές (που αντιστοιχούν σε κατακόρυφα επίπεδα) στα σχήματα των δημοσιεύσεων. Οι τομές γίνονται είτε σε κατόψεις της κατανομής των συγκεντρώσεων (π.χ. Σχήμα A.1): (α) κατά την κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού (δηλαδή κατά τον άξονα x) (π.χ. Σχήμα 3.2α) και (β) κάθετα στην κατεύθυνση κίνησης του υπόγειου νερού, σε συγκεκριμένες αποστάσεις x από την πηγή (δηλαδή κατά τον άξονα y) (π.χ. Σχήμα 3.2β), είτε (γ) σε διαμήκεις τομές της κατανομής των συγκεντρώσεων (π.χ. Σχήμα A.2), σε συγκεκριμένες αποστάσεις x από την πηγή (δηλαδή κατά τον άξονα z) (π.χ. Σχήμα 3.2γ).

#### Συγκεντρώσεις από μετρήσεις πεδίου

Για να δοθεί ένα λεπτομερές παράδειγμα της σύγκρισης, επιλέγεται η κάτοψη της κατανομής του χλωριόντος στο πρώτο πείραμα στο Μπόρντεν την χρονική στιγμή 462 μέρες (Σχήμα A.1, σελ 134) και συγκεκριμένα η τομή της I-I στον διαμήκη άξονα x, που έδωσε την διαμήκη κατανομή του Σχήματος 3.5α (σελ. 32). Τα πειραματικά δεδομένα στο Σχήμα 3.5α, και το οποίο αναπαράγεται εδώ ως Σχήμα I.1, είναι τα 14 σημεία όπου η ευθεία I-I τέμνει τις καμπύλες ίσης συγκέντρωσης. Έστω ότι ένα από αυτά τα σημεία συμπίπτει με τιμή μετρημένη από πηγάδι δειγματοληψίας στην ίδια θέση: έστω το σημείο M που ενδεικνύεται με κύκλο στο Σχήμα I.1, στο οποίο η μέση συγκέντρωση στο πεδίο είναι  $C_{av, πεδίο}=60\text{mg/l}$ . Σημειώνεται ότι σε αυτήν την απόσταση από την πηγή, τα πηγάδια δειγματοληψίας λαμβάνουν δείγματα από 18 διακριτά σημεία (βλέπε πηγάδι P19, Σχήμα I.2). Στο Σχήμα I.2, βλέπουμε ότι τα σημεία δειγματοληψίας σε απόσταση 40-125m από την πηγή ευρίσκονται σε ένα διάστημα 6m, το οποίο λαμβάνεται ως διάστημα υπολογισμού d της μέσης συγκέντρωσης. Σημειώνεται ότι για οργανικούς ρύπους το μήκος ολοκλήρωσης είναι 4,5m.

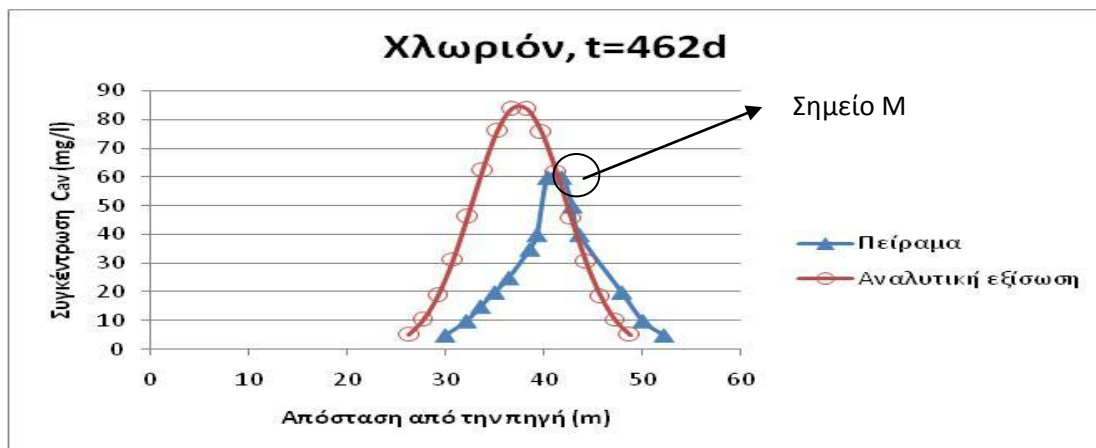
Υποθέτουμε ότι αυτή η μέση συγκέντρωση που χαρακτηρίζει τις μετρήσεις πεδίου έχει προέλθει, με βάση την εξίσωση υπολογισμού των μέσων συγκεντρώσεων που διατυπώθηκε από τους Freyberg et al. (1986), ως εξής:

$$C_{av} = \frac{1}{b_2 - b_1} \int_{b_1}^{b_2} C(x, y, z, t) dz,$$

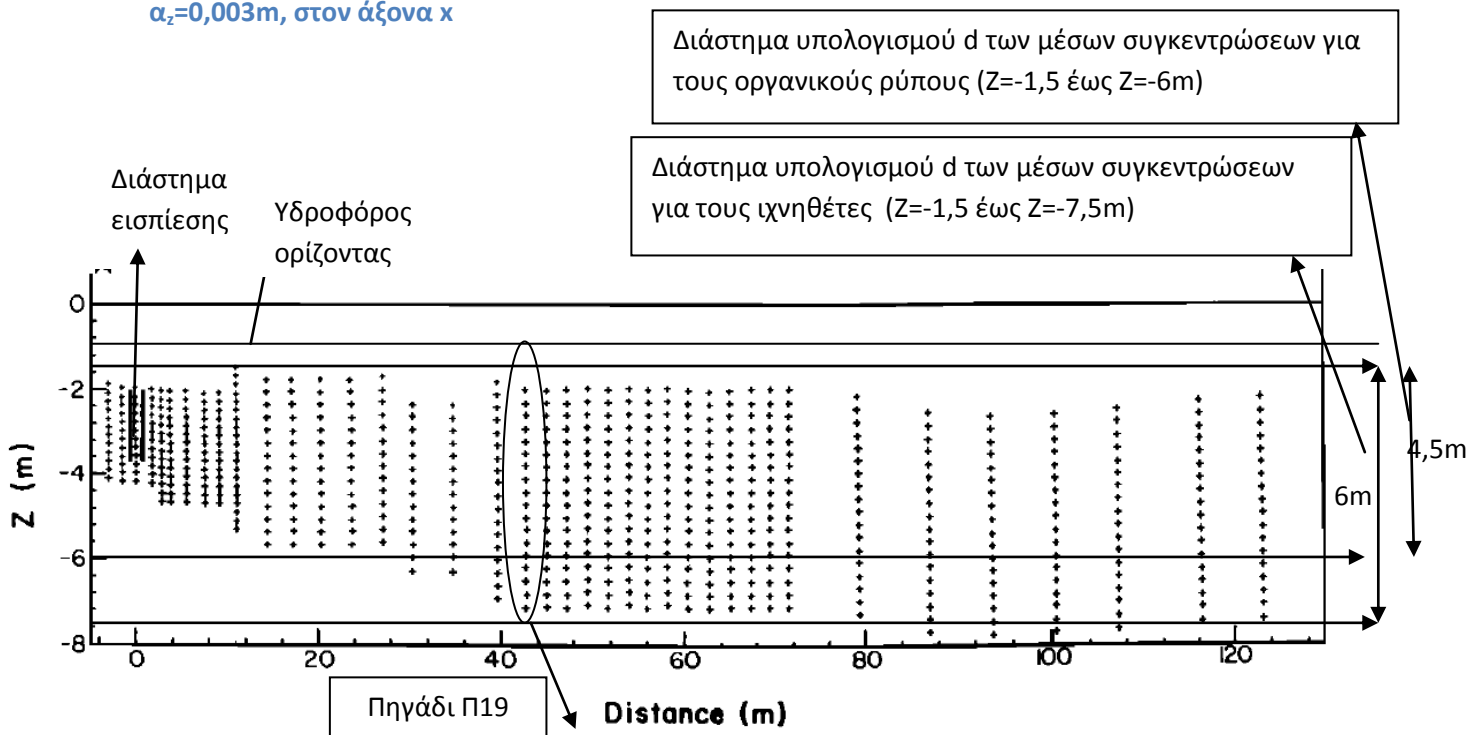
όπου  $b_1$  και  $b_2$  είναι το ανώτερο και κατώτερο σημείο αντίστοιχα του διαστήματος υπολογισμού  $d$  των μέσων συγκεντρώσεων.

Επομένως, για το πηγάδι Π19 του Σχήματος 1.2, η μέση συγκέντρωση κατά την κατακόρυφη έννοια για το χλωριόν προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{av} = \frac{\Delta_z \frac{(C_1 + C_{18} + 2 \sum_{i=2}^{17} C_i)}{2}}{d} = \frac{\Delta_z \frac{(C_1 + C_{18} + 2 \sum_{i=2}^{17} C_i)}{2}}{6} = 60 \text{mg/l}$$



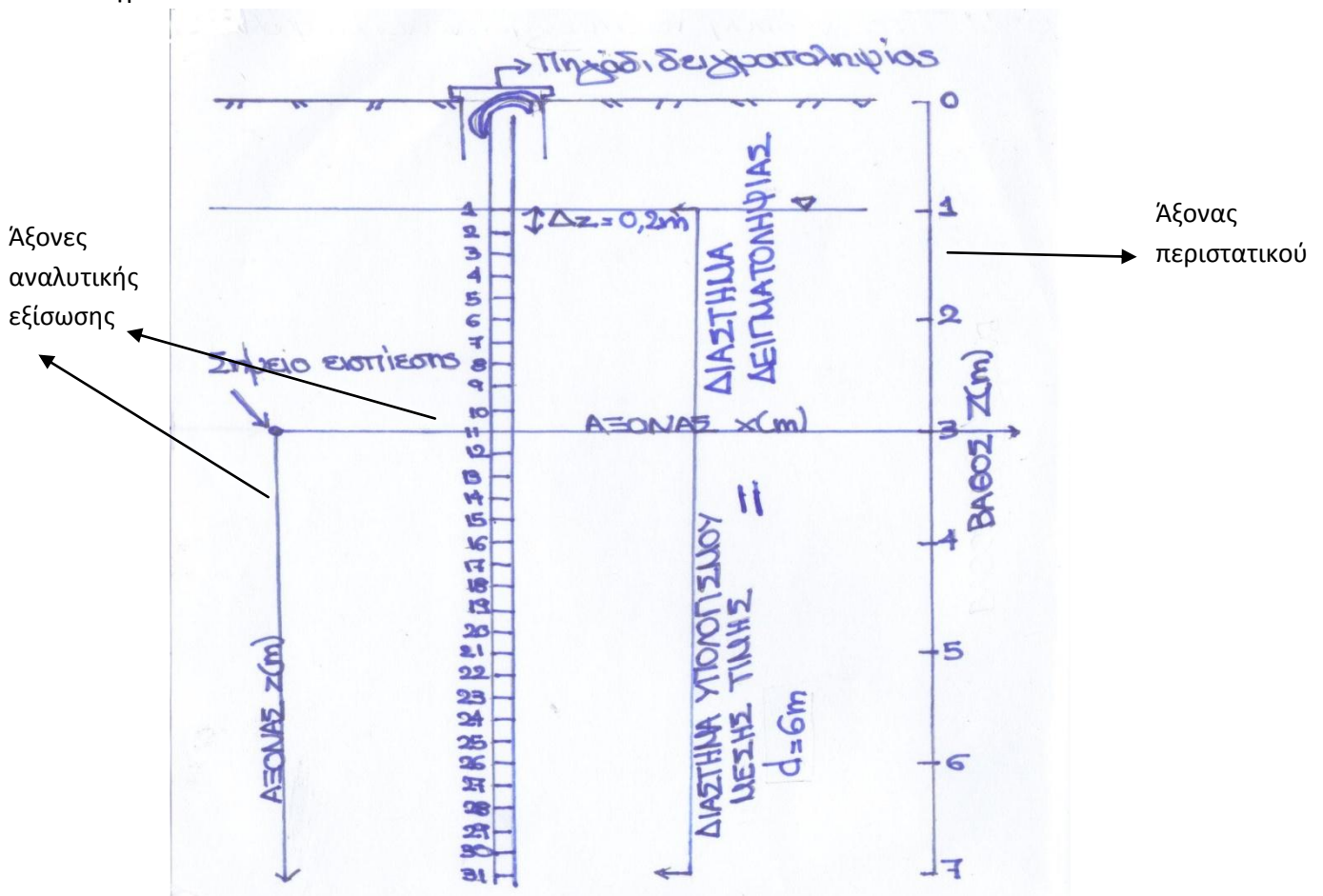
Σχήμα 1.1 Κατανομή των μέσων συγκεντρώσεων του χλωριόντος, από το πείραμα και την αναλυτική εξίσωση, για συντελεστές μηχανικής διασποράς  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$ , στον άξονα  $x$



Σχήμα 1.2 Πηγάδια δειγματοληψίας από διαφορετικά βάθη (MLS) του πειράματος εισπίεσης χλωριωμένων οργανικών ρύπων στο Μπόρντεν (Mackay et al. 1986)

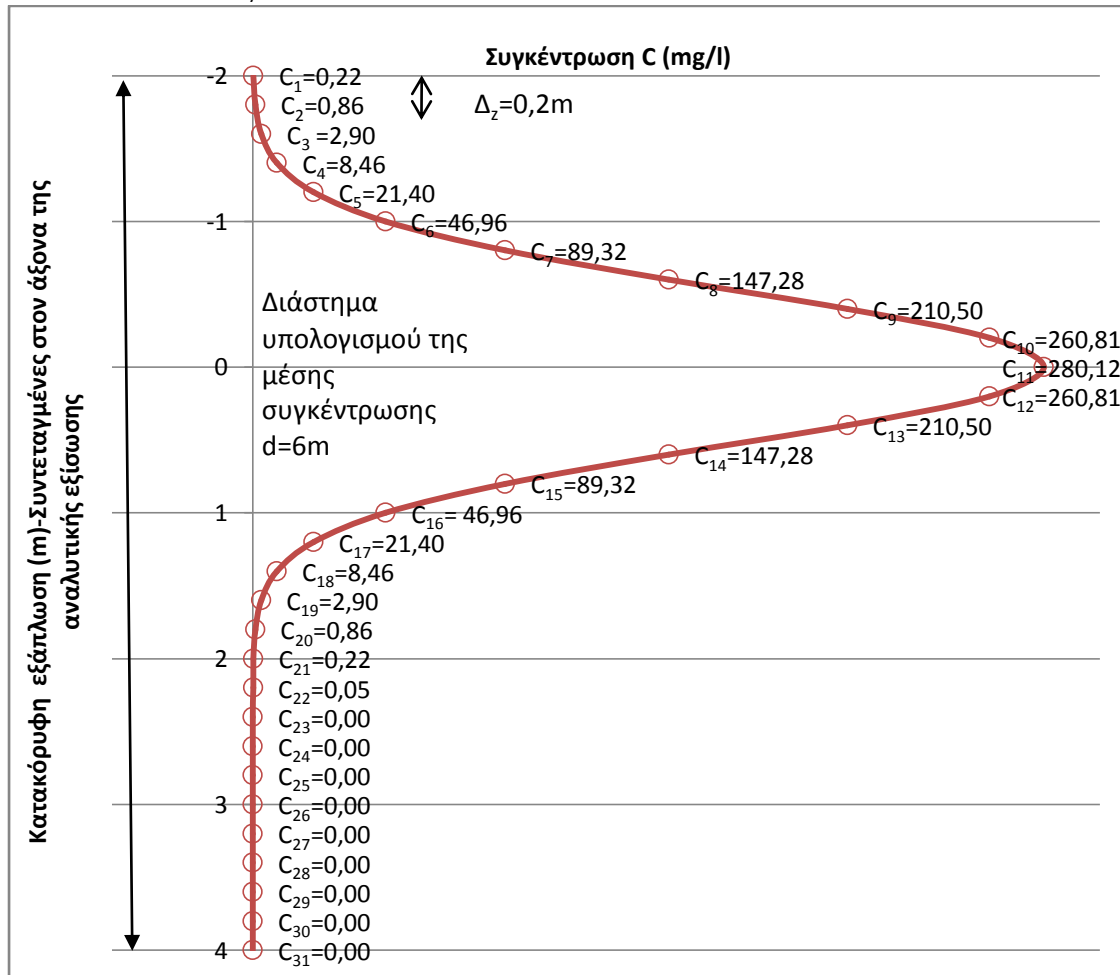
### Συγκεντρώσεις από την αναλυτική εξίσωση

Με αντίστοιχο μαθηματικό τρόπο υπολογίζονται και τα σημεία της καμπύλης μέσω των συγκεντρώσεων που προκύπτουν από την αναλυτική εξίσωση. Όμως, τα σημεία στα οποία γίνεται ο υπολογισμός είναι περισσότερα, καθώς απέχουν μεταξύ τους όσο απείχαν τα πραγματικά σημεία δειγματοληψίας στο πεδίο (απόσταση μεταξύ 1 και 4m). Έτσι, η καμπύλη των αναλυτικών συγκεντρώσεων υπολογίζεται ανά  $\Delta_x=1,5\text{m}$ , όση η οριζόντια πυκνότητα των σημείων δειγματοληψίας, και ανά  $\Delta_z=0,2\text{m}$ , όση η κατακόρυφη πυκνότητα των σημείων δειγματοληψίας, και στη συνέχεια ολοκληρώνεται σε διάστημα  $z=6\text{m}$ , δηλαδή σε 31 σημεία δειγματοληψίας, όπου  $z_1=-2\text{m}$  και  $z_{31}=4\text{m}$ , με βάση τους άξονες της αναλυτικής εξίσωσης (Σχήμα 1.3). Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.2, το ανώτερο σημείο δειγματοληψίας των πηγαδιών του πειράματος βρίσκεται περίπου 1m κάτω από τον υδροφόρο ορίζοντα. Ωστόσο, για την καλύτερη προσομοίωση των ρυπασμένων περιοχών, ορίστηκε το ανώτερο σημείο δειγματοληψίας στα πηγάδια να βρίσκεται στον υδροφόρο ορίζοντα, καθώς με την αναλυτική εξίσωση δεν προσομοιώνεται η κατακόρυφη κίνηση των ρυπασμένων περιοχών του πειράματος. Τέλος, το διάστημα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης είναι ίσο με  $d=6\text{m}$ , που είναι ίσο με το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού.



Σχήμα 1.3 Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν

Επομένως, η μέση συγκέντρωση που προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης, στο σημείο του άξονα  $x=41,2\text{m}$  (Σημείο Μ, Σχήμα Ι.1), τη χρονική στιγμή  $t=462$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$ , προκύπτει ως εξής:



Σχήμα Ι.4 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=41,2\text{m}$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$

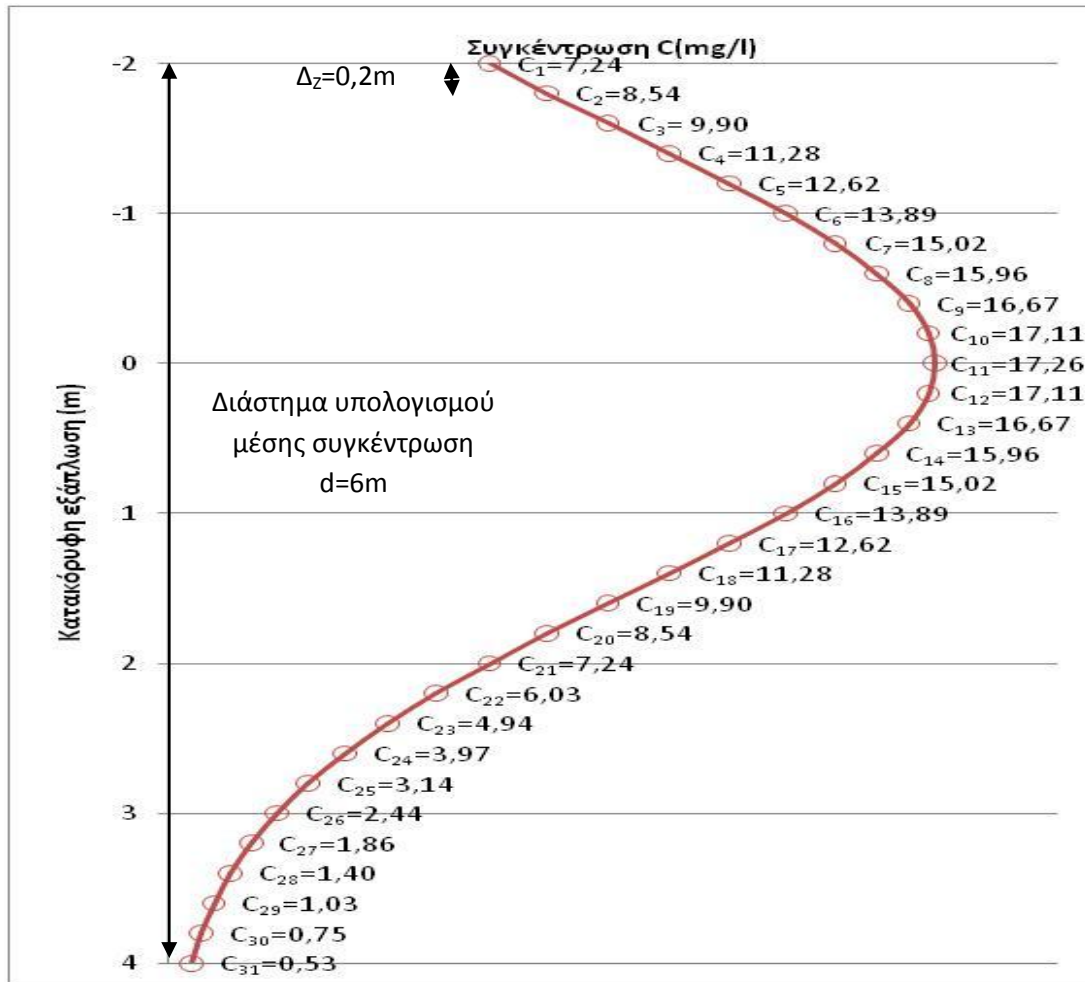
Με βάση τις συγκεντρώσεις  $C_i$  σε κάθε σημείο δειγματοληψίας του Σχήματος Ι.4, η μέση συγκέντρωση κατά την κατακόρυφη έννοια προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{av,αναλ} = \frac{\Delta_z \frac{(C_1 + C_{31} + 2 \sum_{i=2}^{30} C_i)}{2}}{d} = \frac{0,2 \frac{(0,22 + 0 + 2 \cdot 1857,39)}{2}}{6} = 61,9 \text{mg/l}$$

Σημειώνεται ότι ως μηδενικές τιμές συγκέντρωσης στο Σχήμα Ι.4 ορίστηκαν οι τιμές που ήταν μικρότερες από  $0,02\text{mg/l}$ , που είναι το όριο ανίχνευσης των ιόντων χλωρίου στην ανάλυση δειγμάτων με τη μέθοδο της χρωματογραφίας ιόντων (US. EPA 1993).

## 2<sup>ο</sup> παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης του χλωριόντος

Στη συνέχεια παρατίθεται και δεύτερο παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης  $C_{av}$  κατά την κατακόρυφη έννοια για το χλωρίον, που προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=30,7m$ , τη χρονική στιγμή  $t=462$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=3m$ ,  $\alpha_y=0,3m$  και  $\alpha_z=0,03m$ . Στο Σχήμα 1.5 παρουσιάζεται η κατανομή των συγκεντρώσεων σε κάθε σημείο δειγματοληψίας  $i$  του πηγαδιού



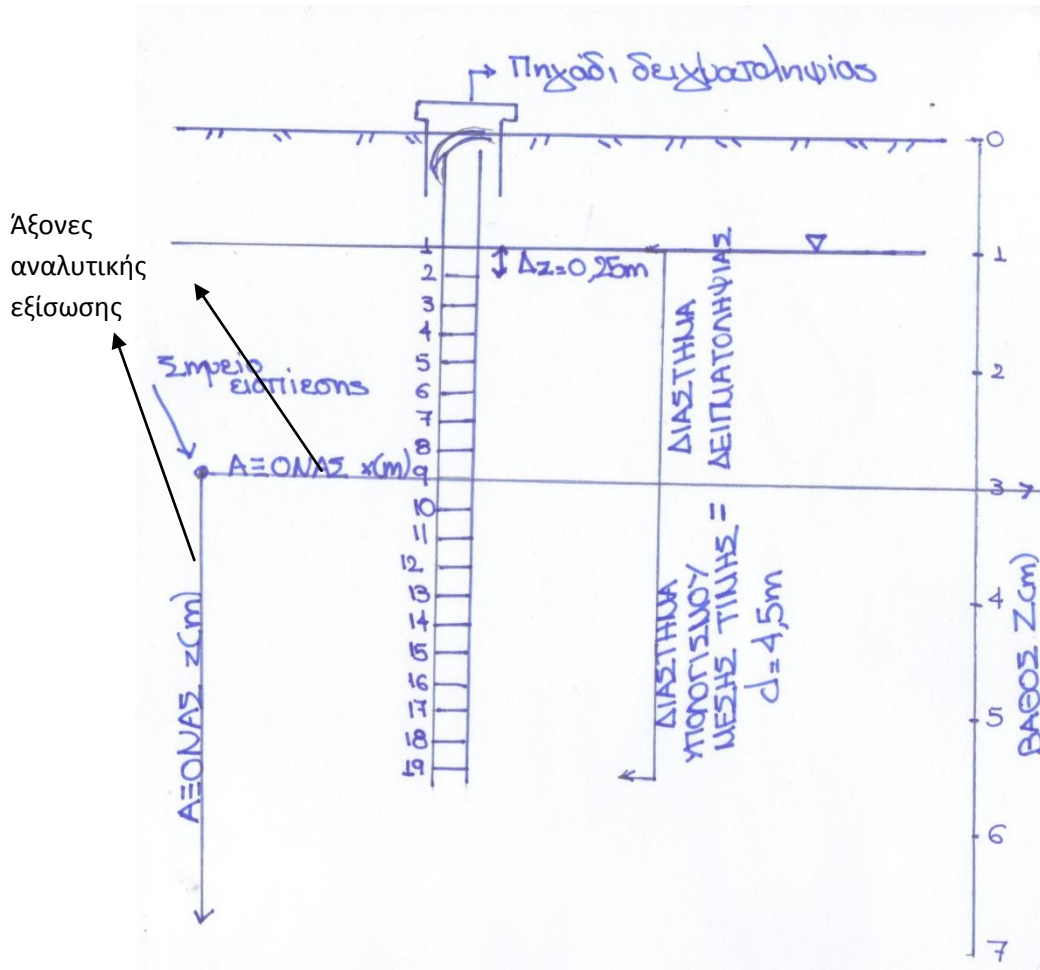
Σχήμα 1.5 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=30,7m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=3m$ ,  $\alpha_y=0,3m$  και  $\alpha_z=0,03m$

Η μέση συγκέντρωση κατά την κατακόρυφη έννοια προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{av} = \frac{\Delta_z (C_1 + C_{31} + 2 \sum_{i=2}^{30} C_i)}{d} = \frac{0,2 (7,24 + 0,53 + 2 \cdot 292)}{6} = 9,86 \text{ mg/l}$$

## 1.2 Τετραχλωρομεθάνιο (CTET)

Για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET), θεωρήθηκε το πηγάδι δειγματοληψίας που παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.6. Το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού θεωρήθηκε ίσο με το διάστημα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης  $d$ , δηλαδή ίσο με 4,5m.

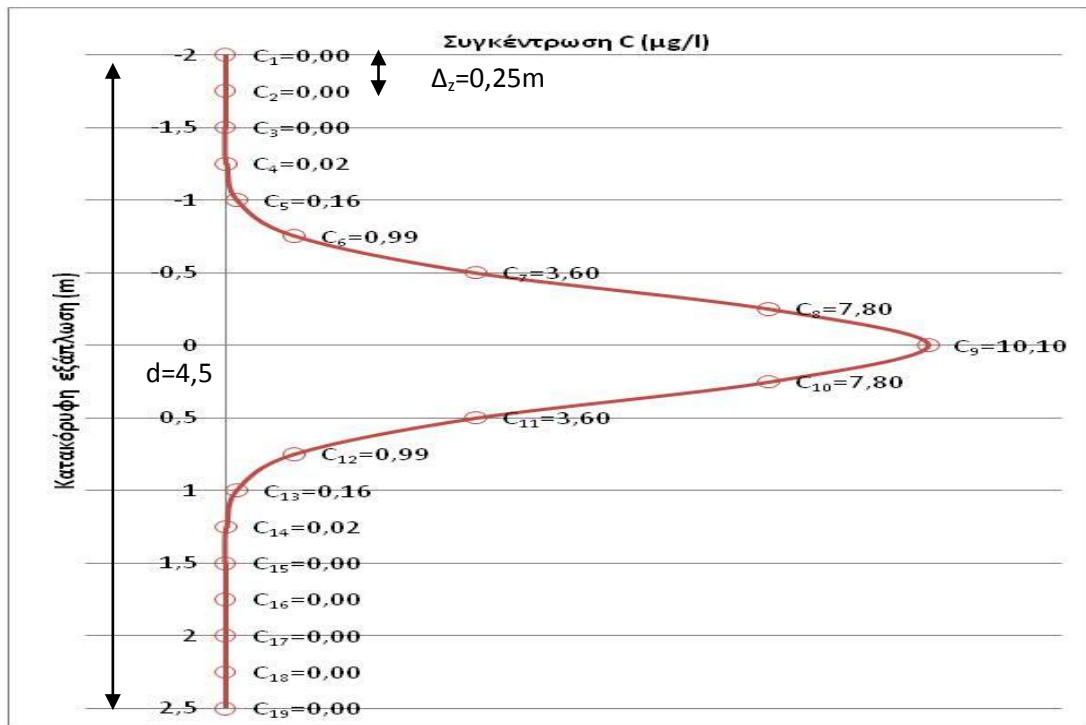


Σχήμα 1.6 Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το τετραχλωρομεθάνιο (CTET)

### Παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης του τετραχλωρομεθανίου (CTET)

Το παράδειγμα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης  $C_{av}$  του τετραχλωρομεθανίου (CTET), προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=16,7m$ , τη χρονική στιγμή  $t=380$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,3m$ ,  $\alpha_y=0,06m$  και  $\alpha_z=0,003m$ . Η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι λαμβάνεται ίση με  $\Delta z=0,25m$  και το διάστημα υπολογισμού της μέσης συγκέντρωσης λαμβάνεται ίσο με  $d=4,5m$ , όσο το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού. Στο Σχήμα 1.7 παρουσιάζεται η

κατανομή των συγκεντρώσεων σε κάθε σημείο δειγματοληψίας  $i$  του πηγαιδιού. Επομένως το πηγάδι αποτελείται από 19 διακριτά σημεία δειγματοληψίας, όπου  $z_1=-2\text{m}$  και  $z_{19}=2,5\text{m}$ , με βάση τους άξονες τις αναλυτικής εξίσωσης (Σχήμα 1.6)



Σχήμα 1.7 Κατανομή των συγκεντρώσεων του τετραχλωρομεθανίου (CTET) στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=16,7\text{m}$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,3\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,06\text{m}$  και  $\alpha_z=0,003\text{m}$

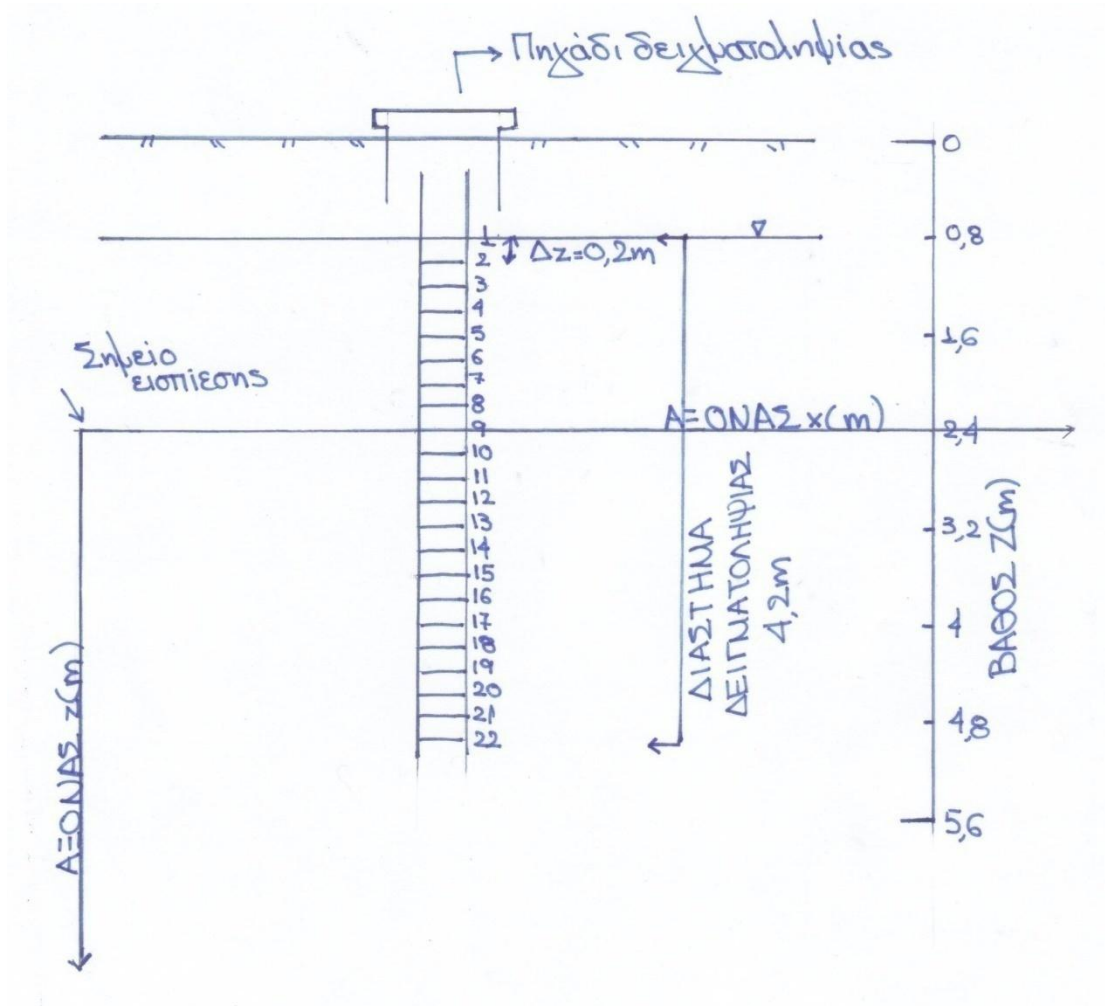
Η μέση συγκεντρωμένη κατά την κατακόρυφη έννοια προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{\text{av}} = \frac{\Delta_z \frac{(C_1 + C_{31} + 2 \sum_{i=2}^{18} C_i)}{2}}{d} = \frac{0,25 \frac{(0 + 0 + 2 * 35,25)}{2}}{4,5} = 1,96 \mu\text{g/l}$$

Σημειώνεται ότι ως μηδενικές τιμές συγκεντρωσης στο Σχήμα 1.7, ορίστηκαν οι τιμές που ήταν μικρότερες από  $0,02\mu\text{g/l}$ .

Κ. Παραδείγματα υπολογισμού των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (ΒΤΕΧ) στο Μπόρντεν

Για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν και το βενζόλιο, θεωρήθηκε το πηγάδι δειγματοληψίας που παρουσιάζεται στο Σχήμα Κ.1. Το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού είναι ίσο με 4,2m και η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας  $\Delta z$  είναι ίση με 0,2m. Στη συνέχεια, παρουσιάζονται αναλυτικά παραδείγματα υπολογισμού των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων  $C_{int}$  του χλωριόντος και του βενζολίου.



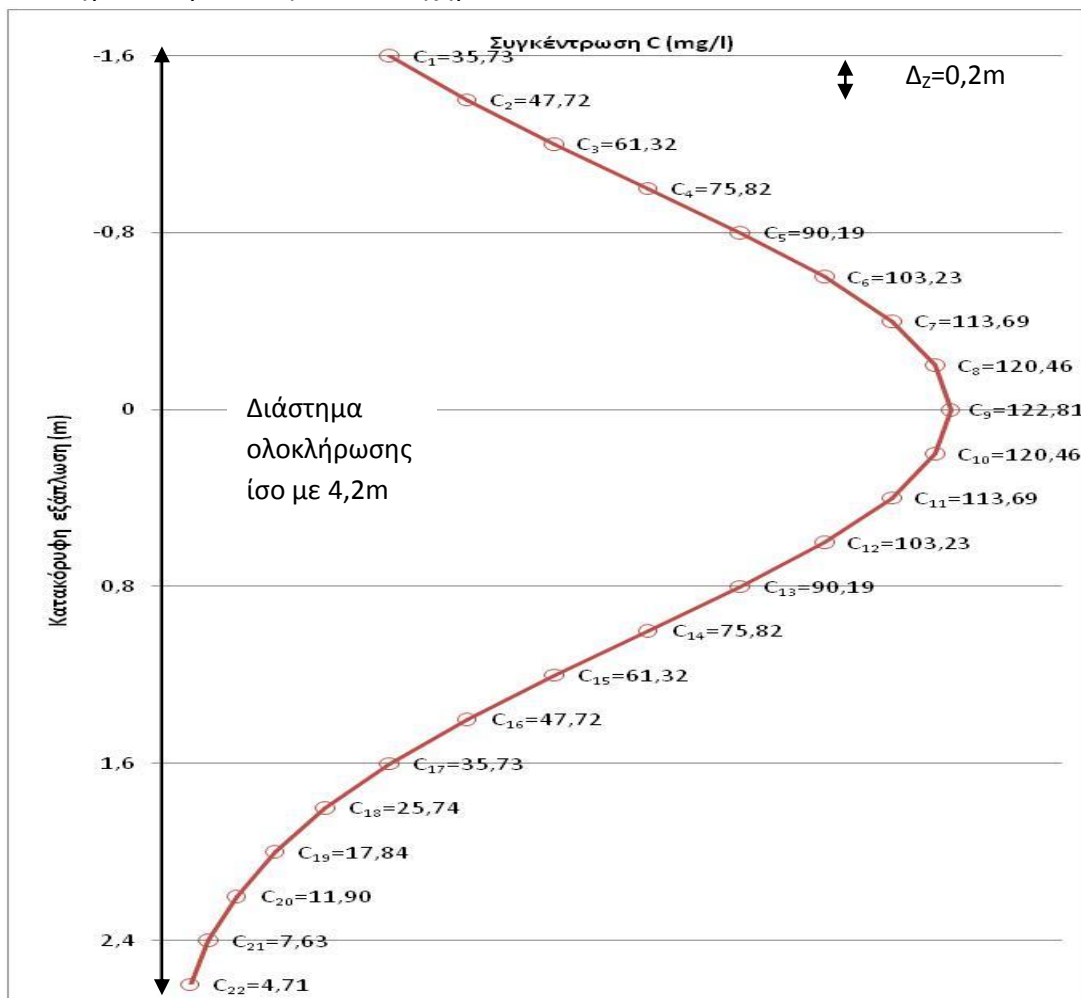
Σχήμα Κ.1 Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν και το βενζόλιο



## Κ.1 Ιόν χλωρίου

1<sup>ο</sup> παράδειγμα υπολογισμού της ολοκληρωμένης ως προς το βάθος συγκέντρωσης του χλωριόντος

Στο πρώτο παράδειγμα υπολογισμού της συγκέντρωσης  $C_{int}$ , που προκύπτει από ολοκλήρωση στην κατακόρυφη διεύθυνση, γίνεται εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=3m$ , τη χρονική στιγμή  $t=53$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=1,2m$ ,  $\alpha_y=0,12m$  και  $\alpha_z=0,12m$ . Από το Σχήμα Κ.1, διαπιστώνεται ότι η συγκέντρωση στο ανώτερο σημείο δειγματοληψίας  $C_1$  προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για κατακόρυφη απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,6m$ . Αντίστοιχα, η συγκέντρωση στο κατώτερο σημείο δειγματοληψίας  $C_{22}$  προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για  $z=2,6m$ . Παράλληλα, η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι είναι ίση με  $\Delta z=0,2m$  και το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού είναι ίσο με  $4,2m$ . Η κατανομή των συγκεντρώσεων στο πηγάδι παρουσιάζεται στο Σχήμα Κ.2.



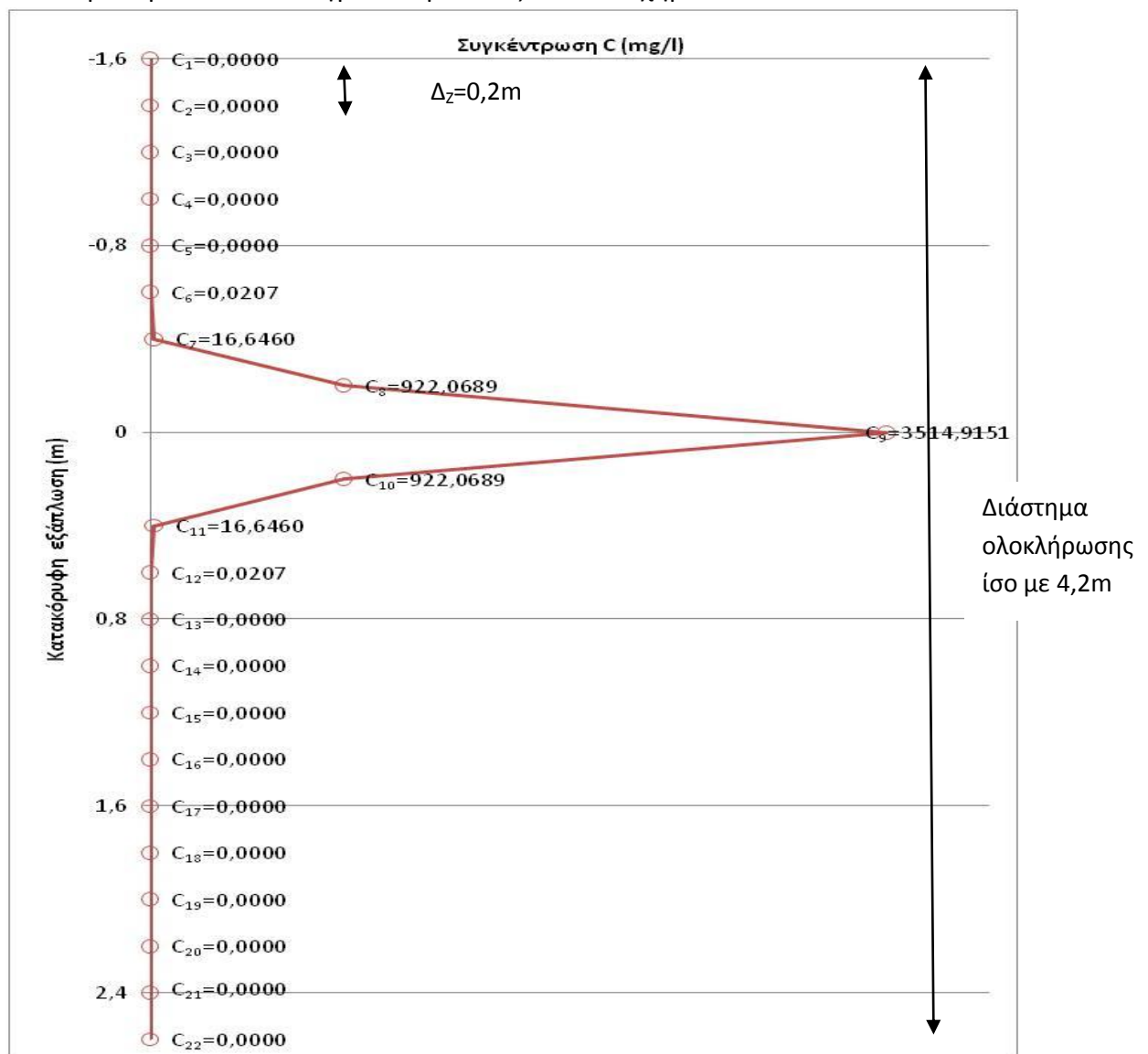
Σχήμα Κ.2 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=3m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=1,2m$  και  $\alpha_y=\alpha_z=0,12m$

Η ολοκληρωμένη ως προς το βάθος συγκέντρωση προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{int} = \frac{\Delta_z}{2} (C_1 + C_{22} + 2 \sum_{i=2}^{21} C_i) = \frac{0,2}{2} * (35,73 + 4,71 + 2 * 1446,48) = 293,34 \left(\frac{mg}{l}\right) m$$

2<sup>ο</sup> παράδειγμα υπολογισμού της ολοκληρωμένης ως προς το βάθος συγκέντρωσης του χλωριόντος

Στο δεύτερο παράδειγμα υπολογισμού της συγκέντρωσης  $C_{int}$ , γίνεται εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=3m$ , τη χρονική στιγμή  $t=53$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$ . Όπως και στο πρώτο παράδειγμα, η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι λαμβάνεται ίση με  $\Delta_z=0,2m$ . Η κατανομή των συγκεντρώσεων στο πηγάδι παρουσιάζεται στο Σχήμα Κ.3.



Σχήμα Κ.3 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=3m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$

Η ολοκληρωμένη ως προς το βάθος συγκέντρωση προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{\text{int}} = \frac{\Delta_z}{2} (C_1 + C_{22} + 2 \sum_{i=2}^{21} C_i) = \frac{0,2}{2} * (0 + 0 + 2 * 5392,39) = 1078,48 \left( \frac{\text{mg}}{\text{l}} \right) \text{m}$$

Σημειώνεται ότι ως μηδενικές ορίστηκαν οι τιμές συγκέντρωσης που ήταν μικρότερες από 0,001mg/l, που είναι το όριο ανίχνευσης στο υπόγειο νερό των εισπιασθέντων ρύπων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) στο Μπόρντεν (Patrick και Barker 1985). Τέλος, παρατηρείται ότι η τιμή της συγκέντρωσης που προέκυψε είναι μεγαλύτερη από την τιμή που προέκυψε από το πρώτο παράδειγμα υπολογισμού της  $C_{\text{int}}$  στο ίδιο σημείο του άξονα x. Η εξήγηση αυτού είναι ότι στο πρώτο παράδειγμα έμειναν εκτός του διαστήματος ολοκλήρωσης, τιμές συγκέντρωσης της τάξεως των 35mg/l.

## Κ.2 Βενζόλιο

### Παράδειγμα υπολογισμού της ολοκληρωμένης ως προς το βάθος συγκέντρωσης του βενζολίου

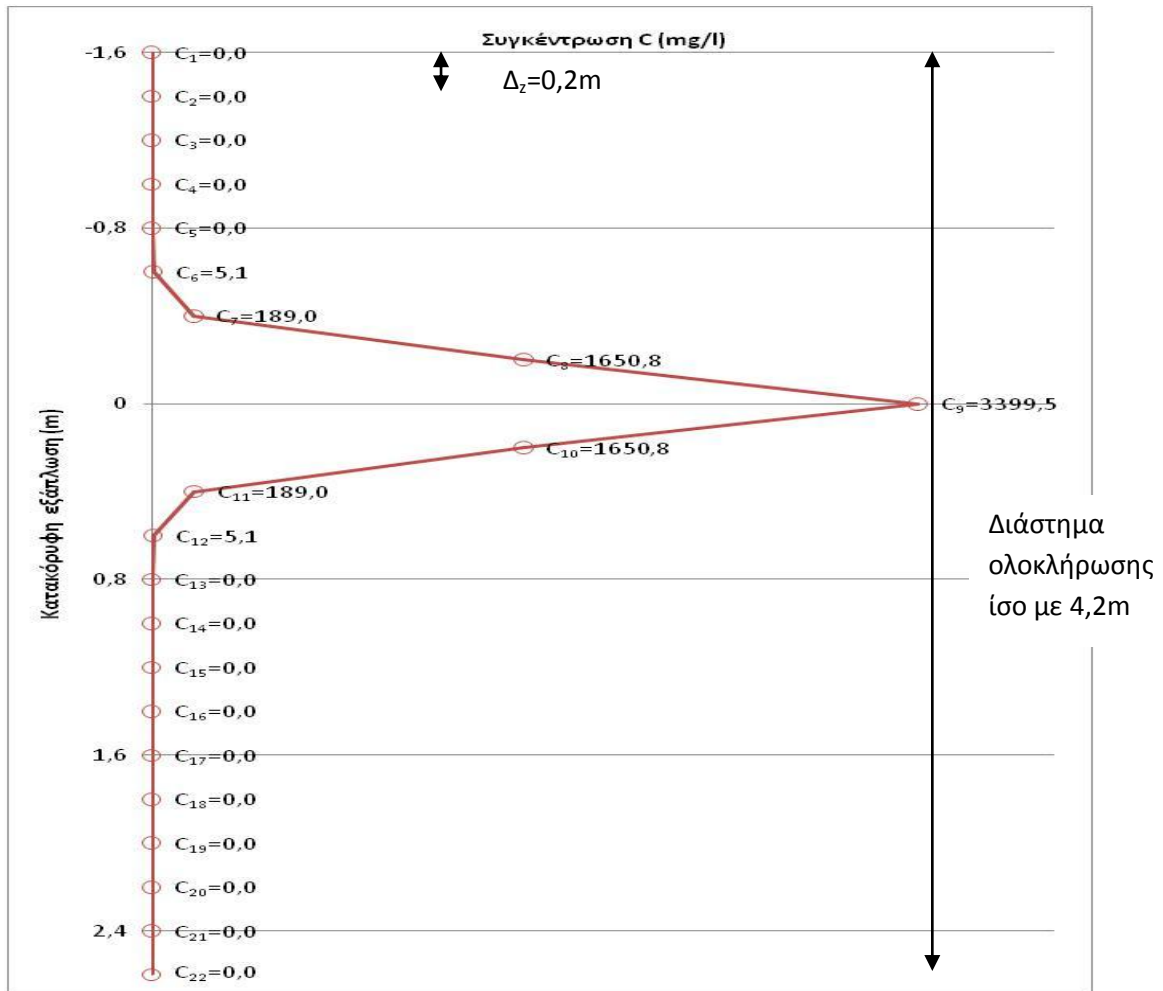
Το παράδειγμα υπολογισμού για το βενζόλιο, προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=7,6\text{m}$ , τη χρονική στιγμή  $t=108$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,1\text{m}$ ,  $\alpha_y=0,02\text{m}$  και  $\alpha_z=0,001\text{m}$ . Η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι λαμβάνεται ίση με  $\Delta_z=0,2\text{m}$  και το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού ίσο με 4,2m. Στο Σχήμα Κ.4 παρουσιάζεται η κατανομή των συγκεντρώσεων σε κάθε σημείο δειγματοληψίας  $i$  του πηγαδιού.

Η ολοκληρωμένη ως προς το βάθος συγκέντρωση προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{\text{int}} = \frac{\Delta_z}{2} (C_1 + C_{22} + 2 \sum_{i=2}^{21} C_i) = \frac{0,2}{2} * (0 + 0 + 2 * 7089,46) = 1417,9 \left( \frac{\mu\text{g}}{\text{l}} \right) \text{m}$$

Σημειώνεται ότι ως μηδενικές ορίστηκαν οι τιμές συγκέντρωσης που ήταν μικρότερες από 1μg/l (Patrick και Barker 1985).

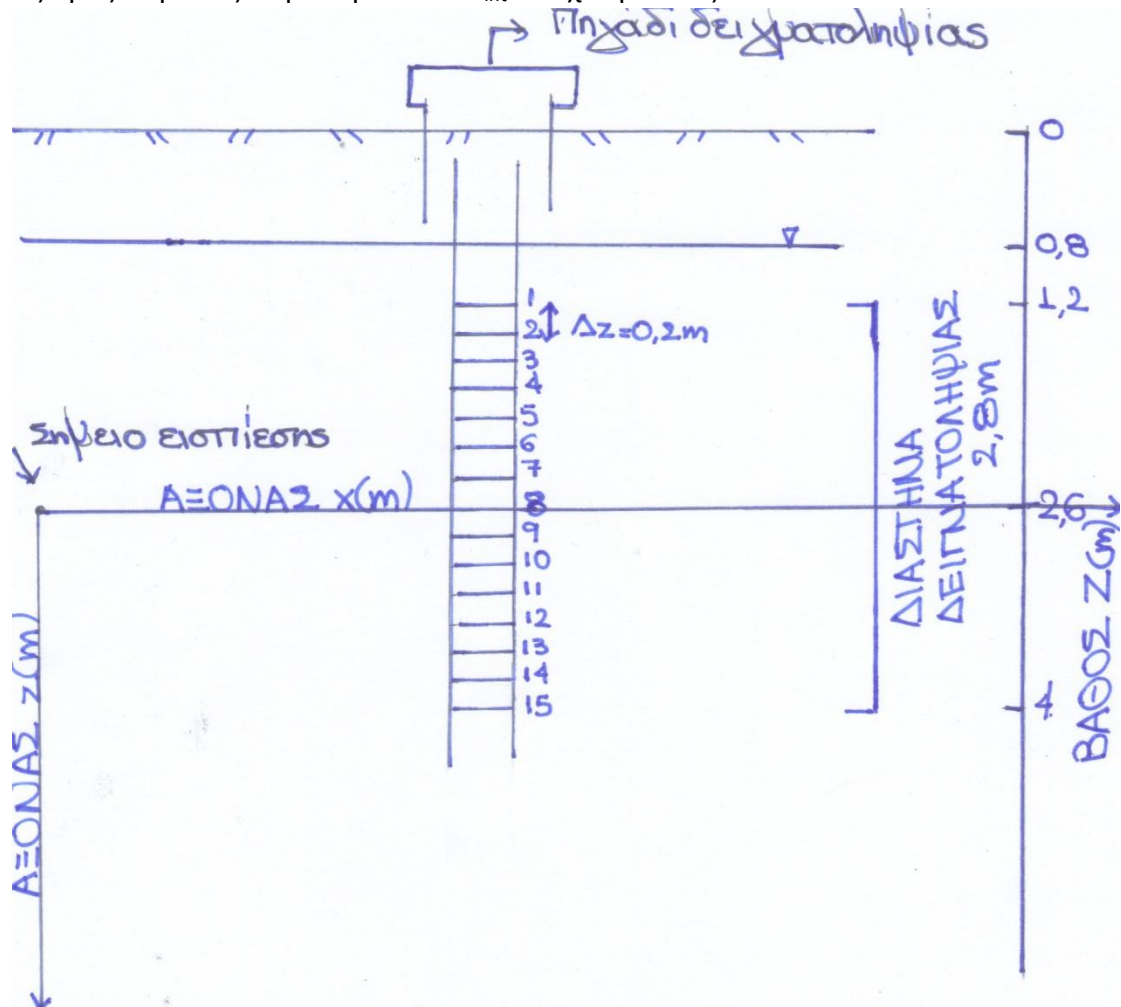
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ



Σχήμα Κ.4 Κατανομή των συγκεντρώσεων του βενζολίου στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=7,6m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,1m$ ,  $\alpha_y=0,02m$  και  $\alpha_z=0,001m$

Λ. Παραδείγματα υπολογισμού των ολοκληρωμένων ως προς το βάθος συγκεντρώσεων του πειράματος εισπίεσης αρωματικών ενώσεων πετρελαίου (BTEX) και προσθέτων βενζίνης στο Μπόρντεν

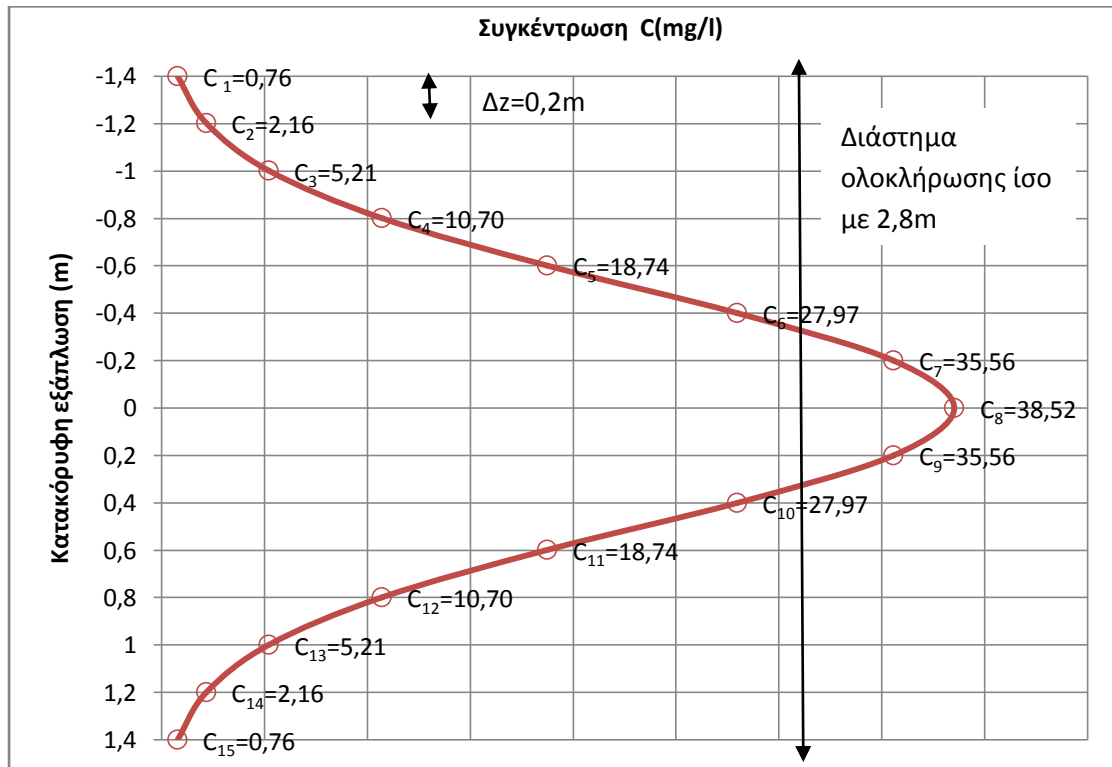
Για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν, το βενζόλιο και το MTBE, θεωρήθηκε το πηγάδι δειγματοληψίας που παρουσιάζεται στο Σχήμα Λ.1. Το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού είναι ίσο με 2,8m και η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας  $\Delta z$  είναι ίση με 0,2m. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται αναλυτικό παράδειγμα υπολογισμού της ολοκληρωμένης ως προς το βάθος συγκεντρώσεων  $C_{int}$  του χλωριόντος.



Σχήμα Λ.1 Το πηγάδι δειγματοληψίας που θεωρήθηκε για την προσομοίωση των κατανομών συγκέντρωσης του πειράματος για το χλωριόν , το βενζόλιο και το MTBE

Παράδειγμα υπολογισμού της ολοκληρωμένης ως προς το βάθος συγκέντρωσης του χλωριόντος

Στο παράδειγμα υπολογισμού της συγκέντρωσης  $C_{int}$ , γίνεται εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης στο σημείο του άξονα  $x=45m$ , τη χρονική στιγμή  $t=476$  ημέρες μετά την εισπίεση, για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$ . Από το Σχήμα Λ.1, διαπιστώνεται ότι η συγκέντρωση στο ανώτερο σημείο δειγματοληψίας  $C_1$  προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για κατακόρυφη απόσταση από το σημείο εισπίεσης ίση με  $z=-1,4m$ . Αντίστοιχα, η συγκέντρωση στο κατώτερο σημείο δειγματοληψίας  $C_{15}$  προκύπτει από την εφαρμογή της αναλυτικής εξίσωσης για  $z=1,4m$ . Παράλληλα, η απόσταση των σημείων δειγματοληψίας στο πηγάδι είναι ίση με  $\Delta z=0,2m$  και το διάστημα δειγματοληψίας του πηγαδιού είναι ίσο με  $2,8m$ . Η κατανομή των συγκεντρώσεων στο πηγάδι παρουσιάζεται στο Σχήμα Λ.2.



Σχήμα Λ.2 Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωριόντος στο πηγάδι δειγματοληψίας που βρίσκεται στο σημείο του άξονα  $x=45m$ , για τιμές των συντελεστών μηχανικής διασποράς ίσες με  $\alpha_x=0,5m$ ,  $\alpha_y=0,025m$  και  $\alpha_z=0,0025m$

Η ολοκληρωμένη ως προς το βάθος συγκέντρωση προκύπτει από την εξίσωση:

$$C_{int} = \frac{\Delta z}{2} (C_1 + C_{15} + 2 \sum_{i=2}^{14} C_i) = \frac{0,2}{2} * (0,76 + 0,76 + 2 * 239,19) = 48 \left( \frac{mg}{l} \right) m$$