



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Σχολή Πολιτικών Μηχανικών  
Τομέας Γεωτεχνικής

Διπλωματική Εργασία:  
**Συγκριτική διερεύνηση της επίδρασης των εδαφικών  
χαρακτηριστικών στην επίδοση των μεθόδων εισπίεσης  
ατμού και άντλησης νερού**

Φοιτητής: Καραντινός Εμμανουήλ  
Επιβλέπων: Πανταζίδου Μαρίνα  
Αναπληρώτρια Καθηγήτρια

Αθήνα, Ιούλιος 2013



**Συγκριτική διερεύνηση της επίδρασης των εδαφικών  
χαρακτηριστικών στην επίδοση των μεθόδων εισπίεσης  
ατμού και άντλησης νερού**

Διπλωματική Εργασία

Εμμανουήλ Α. Καραντινός

Επιβλέπων: Πανταζίδου Μαρίνα

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Πολιτικών Μηχανικών

Τομέας Γεωτεχνικής

*Το περιεχόμενο της ανά χείρας Διπλωματικής Εργασίας αποτελεί προϊόν της δικής μου πνευματικής προσπάθειας. Η ενσωμάτωση σε αυτήν υλικού τρίτων δημοσιευμένου ή μη, γίνεται με δόκιμη αναφορά στις πηγές, που δεν επιτρέπει ασάφειες ή παρερμηνείες.*

Αθήνα, Ιούλιος 2013



## Ευχαριστίες

Η ενασχόληση με θέματα πολυφασικής ροής αποτέλεσε μία προσωπική επιθυμία την οποία η επιβλέπουσα κ. Πανταζίδου δεν δίστασε να ικανοποιήσει. Για τον λόγο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερω την καθηγήτρια κ. Πανταζίδου Μαρίνα για την επίβλεψη αλλά και τον χρόνο που αφιέρωσε από τα πρώτα κιόλας στάδια μέχρι και τη συγγραφή της εργασίας. Πέρα από τις γνώσεις που αποκόμισα, οι διαπιστώσεις μου σε θέματα ακαδημαϊκής και επαγγελματικής συνεργασίας θα είναι, κατά πάσα πιθανότητα, το πολυτιμότερο εφόδιο από την παρούσα διπλωματική.

Θα ήθελα ακόμα να ευχαριστήσω τους φίλους και συμφοιτητές Σοφοκλή Μελισσόβα και Μανώλη Ζέρβα για τη συμπαράστασή τους και τις συμβουλές τους σε τεχνικά κυρίως θέματα.

Μανώλης Καραντινός  
em.karantinos@hotmail.com  
Αθήνα, Ιούλιος 2013



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η απορρύπανση των υπόγειων υδροφορέων από χλωριωμένους υδρογονάνθρακες, και συγκεκριμένα της πηγής, όπου αυτοί απαντώνται ως ξεχωριστή, μη υδατική φάση, συναντά σημαντικές δυσκολίες, ιδιαίτερα στην περίπτωση ετερογενών εδαφών. Από τις τεχνολογίες απορρύπανσης της πηγής, οι θερμικές μέθοδοι έχουν πλεονεκτήματα έναντι των υπολοίπων, τόσο σε ότι αφορά το μέγιστο ποσοστό απομάκρυνσης μάζας των ρύπων, όσο και τον απαιτούμενο χρόνο αποκατάστασης.

Στην εργασία αυτή μελετάται η επίδραση των εδαφικών χαρακτηριστικών στην επίδοση των μεθόδων εισπίεσης ατμού και άντλησης νερού. Για τον σκοπό αυτό, αναζητήθηκαν περιστατικά στα οποία έχει εφαρμοσθεί επιτυχώς η μέθοδος εισπίεσης ατμού και καταγράφηκαν τα βασικά τους χαρακτηριστικά. Εν συνεχεία, εξετάζεται η απορρύπανση εδαφικής στήλης, αρχικώς κορεσμένης με τριχλωροαιθέριο, με εφαρμογή των μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού, για τρία διαφορετικά εδάφη. Για την περίπτωση της πρώτης μεθόδου, εφαρμόζεται η αναλυτική λύση Buckley-Leverett, τα αποτελέσματα της οποίας συγκρίνονται με αυτά της αριθμητικής προσομοίωσης, με χρήση λογισμικού πολυφασικής ροής (T2VOC). Η ακρίβεια της λύσης Buckley-Leverett είναι ικανοποιητική για κλίση εισπίεσης νερού ίση με 4.5%, ενώ ακόμα διαπιστώθηκε ότι για την επίτευξη σημαντικού βαθμού απομάκρυνσης μάζας τριχλωροαιθέριου (>75%) απαιτείται περισσότερος χρόνος στην περίπτωση των καλώς διαβαθμισμένων εδαφών. Για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού, παρουσιάζεται ένα αναλυτικό μοντέλο για τον υπολογισμό της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου αλλά και του μέσου βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης στα ανάντη αυτού. Η απόκλιση του μοντέλου από τα αποτελέσματα του λογισμικού δεν ξεπερνά το 6.5% σε κάθε ένα από τα εξεταζόμενα εδάφη. Για σταθερή παροχή ατμού, η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου - ταχύτητα απορρύπανσης είναι πρακτικώς ανεξάρτητη από τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης και περατότητας του εδάφους, αλλά αντίθετα εξαρτάται από το πορώδες και τη θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων. Πραγματοποιήθηκε ακόμα σύγκριση μεταξύ των δύο μεθόδων αφενός ως προς τον απαιτούμενο χρόνο απορρύπανσης και αφετέρου ως προς την απαιτούμενη ενέργεια για την επίτευξη ποσοστού απομάκρυνσης μάζας τριχλωροαιθέριου ίσου με 75%. Η σύγκριση έδειξε αφενός την αδυναμία της εισπίεσης νερού να επιτύχει σημαντική απομάκρυνση τριχλωροαιθέριου >75% εντός εύλογου χρονικού διαστήματος και αφετέρου τη μεγάλη διαφορά στις απαιτήσεις ενέργειας των δύο μεθόδων.

Στο δεύτερο μέρος της εργασίας, συγκρίνεται η επίδοση των μεθόδων άντλησης νερού/εισπίεσης ατμού, για την απομάκρυνση τριχλωροαιθενίου από τρεις υδροφορείς, δύο ομογενών και ενός ετερογενούς. Οι ομογενείς υδροφορείς διαφοροποιούνται ως προς την περατότητα και τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού, που επηρεάζει σημαντικά το βάθος διείσδυσης του τριχλωροαιθενίου. Για την άντληση νερού θεωρήθηκε τεχνητώς εφαρμοζόμενη υδραυλική κλίση ίση με 3% ενώ, για την εισπίεση ατμού ομοιόμορφη καθ' ύψος παροχή ατμού. Η άντληση νερού δύναται να απορρυπάνει – σε αντίστοιχο χρόνο με την εισπίεση ατμού – ομογενή και περατά εδάφη ( $K > 10^{-4}$  m/s) που χαρακτηρίζονται από μικρό παραμένοντα βαθμό κορεσμού, και άρα σημαντικό βάθος ρυπασμένης ζώνης. Όμως, η ύπαρξη έστω και μικρού βαθμού ετερογένειας αναμένεται να έχει αρνητική επίδραση στην επίδοση της μεθόδου. Βάσει των περιστατικών που μελετήθηκαν, σε συνδυασμό με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, η εισπίεση ατμού δύναται να εφαρμοσθεί αυτόνομα για την απορρύπανη υδροφορέων, ομογενών ή ετερογενών, με βάθος ρυπασμένης ζώνης περί τα 7m (στάθμη υδροφόρου -2m). Όμως, για την περίπτωση όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι μεγαλύτερο των 10m από τη στάθμη του εδάφους (στάθμη υδροφόρου περίπου -2m), η εισπίεση ατμού θα πρέπει να εφαρμόζεται σε συνδυασμό με άλλες, κατά προτίμηση θερμικές, τεχνολογίες αποκατάστασης. Σε αντίθεση με την άντληση νερού, η υδραυλική αγωγιμότητα δεν φάνηκε να επηρεάζει σημαντικά την επίδοση της μεθόδου εισπίεσης ατμού, ενώ ο έλεγχος των τάσεων του εδάφους εν γένει ικανοποιείται και δεν αποτελεί περιοριστικό παράγοντα για την εφαρμογή της μεθόδου.

Λέξεις κλειδιά: απορρύπανση πηγής, εισπίεση ατμού, άντληση νερού, τριχλωροαιθένιο, προσομοίωση πολυφασικής ροής







# **Evaluating the effect of soil characteristics on the performance of steam injection and pump and treat**

## **ABSTRACT**

Remediation of sites contaminated with Dense Non-Aqueous Phase Liquids poses significant technical and economical challenges, especially in cases where the distribution of the contaminant in the source zone is characterized by complex architecture. As far as chlorinated solvents are concerned, thermal treatment technologies demonstrate significant advantages compared to other source depletion technologies both in terms of performance and clean up time.

The scope of this diploma thesis is to evaluate the effect of soil properties on the performance of steam injection and pump and treat, specifically for the removal of trichloroethylene from the saturated zone. For this reason, we compile information relevant to subsurface characterization, chemicals treated, operating conditions, and mass removal rate achieved in both pilot and full-scale steam injection projects. In order to assess the effect of soil properties on the aforementioned source depletion technologies, we first consider the case of a soil column, which is initially saturated with trichloroethylene. Water or steam injection are applied for the removal of trichloroethylene for three different sandy soils. We apply the Buckley-Leverett analysis, the results of which are compared with those produced by the numerical simulator T2VOC, developed by the Lawrence Berkeley Laboratory. The Buckley-Leverett analysis demonstrates satisfactory precision in cases where the water injection gradient is 4.5% or greater. It was also observed that for a given water injection rate, the removal of trichloroethylene is less effective in the case of well-sorted sands. Regarding steam injection, we present an analytical solution for the calculation of the thermal front velocity as well as the average water saturation upstream of the thermal front. The results of the proposed analytical solution demonstrate insignificant divergence (<6.5%) from those produced by T2VOC. It was also observed that for a given steam injection rate, the thermal front velocity is primarily dependent on porosity and thermal capacity of solids. Permeability and capillarity characteristics seem to have a minimal effect on the thermal front velocity, thus not affecting the performance of steam injection. For the technologies considered, we also compare the remedial time and the energy demand needed to remove 75% of the initially emplaced trichloroethylene. This comparison demonstrated

the inability of water injection to achieve mass removal rates  $>75\%$  within a short time frame, as opposed to steam injection. The energy calculation revealed, as expected, that steam injection is by far more energy consuming compared to water injection.

In the second part of the thesis, water pumping and steam injection technologies are considered for the removal of trichloroethylene from the saturated zone of three aquifers, two homogenous and one heterogeneous. The homogenous aquifers are differentiated in terms of permeability and residual trichloroethylene saturation, which greatly affects the depth of the contaminated region. In order to simulate the technologies under study, a hydraulic gradient of 3% and a vertically uniform distribution of steam injection rate are considered for the cases of water pumping and steam injection, respectively. The results show that water pumping competes favorably with steam injection in cases of homogenous and generally permeable aquifers ( $K > 10^{-4}$  m/s) that are characterized by small residual trichloroethylene saturation, which in turn implies a significant depth of infiltration. Taking into consideration the steam injection projects under study and the numerical simulations, we infer that steam injection can be a stand-alone technology to either homogenous or heterogeneous aquifers the contaminated region of which extends down to 7 meters from the surface, with the groundwater surface located approximately at -2m. On the other hand, in cases where the contaminated region extends to approximately 10m or more, steam injection should be used in combination with other, preferably thermal, source depletion technologies in order to achieve considerable mass removal rates. Finally, in comparison to water pumping, permeability does not seem to significantly affect the performance of steam injection, while the effective stress criterion is generally satisfied and does not pose a constraint for the successful implementation of steam injection.

**Keywords:** source zone treatment; steam injection; pump and treat; trichloroethylene; simulation of multiphase flow





## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>1</b>	<b>ΕΙΣΑΓΩΓΗ</b> .....	<b>1</b>
1.1	Γενικά .....	1
1.2	Σκοπός & Μέθοδος .....	3
1.3	Δομή εργασίας .....	4
<b>2</b>	<b>ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ</b> .....	<b>5</b>
2.1	Στοιχεία μηχανικής πετρελαίων .....	5
2.1.1	Τριχοειδής πίεση .....	5
2.1.2	Σχετική διαπερατότητα .....	12
2.1.3	Παραμένων βαθμός κορεσμού .....	14
2.1.4	Η αναλυτική λύση Buckley- Leverett .....	15
2.2	Στοιχεία θερμοδυναμικής .....	19
2.2.1	Βασικές Έννοιες .....	19
2.2.2	Μεταφορά θερμότητας στο έδαφος .....	21
2.2.3	Θερμικά χαρακτηριστικά εδαφών .....	23
2.2.4	Ποιότητα και χαρακτηριστικά υδρατμού .....	25
2.3	Προσομοίωση Πολυφασική Ροής .....	27
2.3.1	Διαθέσιμα αριθμητικά μοντέλα προσομοίωσης .....	27
2.3.2	Το λογισμικό πολυφασικής ροής T2VOC .....	28
2.4	Τα χαρακτηριστικά του TCE – η επίδραση της θερμοκρασίας .....	31
2.4.1	Φυσικο-χημικές ιδιότητες .....	31
2.4.2	Η επίδραση της θερμοκρασίας .....	31
2.5	Επισκόπηση περιστατικών εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού .....	34
<b>3</b>	<b>ΑΠΟΡΡΥΠΑΝΣΗ ΕΔΑΦΙΚΗΣ ΣΤΗΛΗΣ</b> .....	<b>37</b>
3.1	Εδαφικά Χαρακτηριστικά .....	37
3.2	Απορρύπανση στήλης με εισπίεση νερού .....	42
3.2.1	Περιγραφή αρχικών και συνοριακών συνθηκών .....	42
3.2.2	Μεθοδολογία.....	45
3.2.3	Σύγκριση αποτελεσμάτων λύσης Buckley-Leverett και αριθμητικής προσομοίωσης .....	47
3.3	Απορρύπανση στήλης με εισπίεση ατμού .....	51
3.3.1	Περιγραφή αρχικών και συνοριακών συνθηκών .....	52
3.3.2	Παρουσίαση αναλυτικής λύσης .....	54
3.3.3	Μεθοδολογία.....	58
3.3.4	Σύγκριση αποτελεσμάτων αναλυτικής μεθόδου και αριθμητικής προσομοίωσης .....	62
3.4	Σύγκριση μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού .....	64
3.4.1	Σύγκριση του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης στήλης μεταξύ των μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού .....	64
3.4.2	Σύγκριση των μεθόδων σε όρους απαιτούμενου έργου .....	69
3.5	Διαπιστώσεις και κύρια σημεία κεφαλαίου .....	71

<b>4</b>	<b>ΑΠΟΡΡΥΠΑΝΣΗ ΔΙΔΙΑΣΤΑΤΟΥ ΠΕΔΙΟΥ .....</b>	<b>73</b>
<b>4.1</b>	<b>Περιγραφή προβλήματος διαρροής σε διδιάστατο πεδίο .....</b>	<b>73</b>
4.1.1	Σενάριο διαρροής .....	73
4.1.2	Διαστάσεις πεδίου .....	73
4.1.3	Χαρακτηριστικά υδροφορέων .....	74
4.1.4	Στοιχεία προσομοίωσης .....	77
<b>4.2</b>	<b>Προσομοίωση διαρροής .....</b>	<b>79</b>
4.2.1	Στάδιο Α: Ισορροπία Υδατικής – Αέριας φάσης .....	79
4.2.2	Στάδιο Β: Διήθηση TCE .....	80
4.2.3	Στάδιο Γ: Ανακατανομή TCE .....	83
<b>4.3</b>	<b>Προσομοίωση Απορρύπανσης .....</b>	<b>86</b>
4.3.1	Απορρύπανση με άντληση νερού.....	86
4.3.2	Απορρύπανση με εισπίεση ατμού .....	95
4.3.3	Έλεγχος τάσεων εδάφους .....	106
4.3.4	Σύγκριση της επίδοσης των δύο μεθόδων .....	109
<b>4.4</b>	<b>Κύρια σημεία κεφαλαίου .....</b>	<b>112</b>
<b>5</b>	<b>ΓΕΝΙΚΑ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....</b>	<b>115</b>
	<b>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....</b>	<b>117</b>
	<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ΣΧΕΤΙΚΑ ΜΕ ΤΗΝ ΑΚΡΙΒΕΙΑ ΤΗΣ ΛΥΣΗΣ BUCKLEY-LEVERETT .....</b>	<b>125</b>
	<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β1 : ΠΗΓΑΙΟΙ ΚΩΔΙΚΕΣ ΣΕ FORTRAN .....</b>	<b>130</b>
	PROGRAM CONVERT .....	130
	PROGRAM STRATIGRAPHY .....	135
	PROGRAM UB_FORMULATION.....	137
	<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β2 : ΠΗΓΑΙΟΙ ΚΩΔΙΚΕΣ ΣΕ MATLAB .....</b>	<b>138</b>
	ITOUGH2-MATLAB LINK .....	138
	VG_Parameter_estimation .....	140
	water_front.....	141
	steam_front.....	142
	2D Graphics.....	146



## ΛΙΣΤΑ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 2-1 Μοντέλα Τριχοειδούς Πίεσης-Βαθμού κορεσμού διαβρέχουσας φάσης και παράμετροι αυτών.....	9
Πίνακας 2-2 Ενδεικτικές τιμές παραμένουτος βαθμού κορεσμού υδατικής και μη υδατικής φάσης (TCE) για αμμώδη εδάφη (Mercer & Cohen ,1990), (Adamsky et al., 2005).....	14
Πίνακας 2-3 Ιδιότητες κορεσμένου νερού/κορεσμένου ατμού για πίεση αέριας φάσης ίσης με 1 και 1.5 atm. Πηγή: Schmidt (1982).....	26
Πίνακας 2-4 Υπάρχοντα λογισμικά για τη προσομοίωση μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής και βασικά χαρακτηριστικά/δυνατότητες αυτών. Πηγή: (USACE, 2009) .....	28
Πίνακας 2-5 Φυσικο-Χημικές Ιδιότητες TCE για Θερμοκρασία 25°C .....	31
Πίνακας 2-6 Πηγές αναζήτησης περιστατικών εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού. 35	
Πίνακας 2-7 Χαρακτηριστικά των περιστατικών εφαρμογής της εισπίεσης ατμού.....	36
Πίνακας 3-1 Χαρακτηρισμός των προς εξέταση εδαφών.....	37
Πίνακας 3-2 Εδαφικά χαρακτηριστικά για τα εξεταζόμενα εδάφη .....	41
Πίνακας 3-3 Δεδομένα για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett .....	43
Πίνακας 3-4 Αρχικές/Συνοριακές συνθήκες και δεδομένα εισόδου (T2VOC) για τη προσομοίωση απορρύπανσης στήλης εδάφους με εισπίεση νερού .....	45
Πίνακας 3-5 Αποτελέσματα ανάλυσης κατά Buckley-Leverett .....	46
Πίνακας 3-6 Εισπίεση νερού σε εδαφική στήλη: Αποτελέσματα αναλυτικής λύσης (Buckley –Leverett) και αριθμητικής προσομοίωσης (T2VOC) για τα Σενάρια A1 και A2.....	47
Πίνακας 3-7 Εισπίεση ατμού: Σενάρια σύγκρισης αναλυτική λύσης και αριθμητικής προσομοίωσης.....	58
Πίνακας 3-8 Απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού: Δεδομένα για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης. ....	59
Πίνακας 3-9 Παράμετροι εισόδου (T2VOC) για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού.....	59
Πίνακας 3-10 Εισπίεση ατμού σε εδαφική στήλη. Αποτελέσματα αναλυτικής λύσης και αριθμητικής προσομοίωσης για τα σενάρια σύγκρισης B1, B2 και B3. ....	62

Πίνακας 3-11 Παράμετροι εισόδου (T2VOC) για τον υπολογισμό του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης εδαφικής στήλης με τη μέθοδο εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού.....	65
Πίνακας 3-12 Απαιτούμενος χρόνος εφαρμογής των μεθόδων εισπίεσης νερού/ατμού για την απομάκρυνση 75 και 80% της μάζας του DNAPL από την εδαφική στήλη.....	66
Πίνακας 4-1 Ενδεικτικά χαρακτηριστικά φακών χαμηλής περατότητας από μελέτες/περιστατικά.....	75
Πίνακας 4-2 Εδαφικά Χαρακτηριστικά Υδροφορέων.....	76
Πίνακας 4-3 Στάδια για την προσομοίωση διαρροής και απορρύπανσης του διδιάστατου πεδίου.....	78
Πίνακας 4-4 Στάδιο Α: Ισορροπία Υδατικής-Αέριας Φάσης. Αρχικές Συνθήκες.....	79
Πίνακας 4-5 Στάδιο Α: Ισορροπία Υδατικής-Αέριας Φάσης. Αποτελέσματα Προσομοίωσης.....	79
Πίνακας 4-6α Στάδιο Β: Διαρροή TCE. Συνοριακές Συνθήκες .....	81
Πίνακας 4-7 Βάθος Ρυπασμένης Ζώνης και Μάζα μη υδατικής φάσης TCE κατά την έναρξη της απορρύπανσης .....	85
Πίνακας 4-8 Στάδιο Δ2: Απορρύπανση με εισπίεση ατμού. Συνοριακές Συνθήκες. ....	96
Πίνακας Β-1 Αρχεία Εξόδου από το Πρόγραμμα CONVERT και περιεχόμενο αυτών ...	130

## ΛΙΣΤΑ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 2-1 Απεικόνιση των παραμέτρων της εξίσωσης του Laplace Πηγή: Corey (1994)...	6
Σχήμα 2-2 Αύξηση τριχοειδούς πίεσης για μείωση του βαθμού κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης σε πορώδες μέσο. Προσαρμογή από Pinder & Gray (2008) .....	6
Σχήμα 2-3 Τυπική μορφή καμπύλης τριχοειδούς πίεσης – Βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης. Πηγή: Corey (1994).....	7
Σχήμα 2-4 Επίδραση Κοκκομετρικής διαβάθμισης εδάφους στα χαρακτηριστικά της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης. Προσαρμογή από Pinder (2008).....	8
Σχήμα 2-5 Διαβρεξιμότητα φάσεων και σχηματική απεικόνιση της παραδοχής των Lenhard & Parker για τη γενική περίπτωση τριφασικής ροής.....	10
Σχήμα 2-6 Απεικόνιση της εδαφικής στήλης και των συνοριακών συνθηκών της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett.....	15
Σχήμα 2-7 Αναλυτική Λύση Buckley-Leverett: Κατανομή βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης, προτού της άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης.....	16
Σχήμα 2-8 Τυπική μορφή καμπύλης κλασματικής ροής – βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης.....	17
Σχήμα 2-9 Υπολογισμός βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου ( $S_{wf}$ ) και μέσου βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου ( $S_w^{up}$ )- βλέπε Σχήμα 2-7 .....	18
Σχήμα 2-10 Θερμική αγωγιμότητα άμμου συναρτήσει του βαθμού κορεσμού για διάφορες τιμές πορώδους, n. Προσαρμογή από Chen (2008).....	24
Σχήμα 2-11 Φυσικο-Χημικές ιδιότητες TCE & PCE συναρτήσει της θερμοκρασίας.....	33
Σχήμα 3-1 Καμπύλες Κοκκομετρικής διαβάθμισης των προς εξέταση άμμων.....	38
Σχήμα 3-2 Καμπύλες Τριχοειδούς Πίεσης – Βαθμού Κορεσμού Υδατικής Φάσης σε σύστημα νερού-αέρα για τα εξεταζόμενα εδάφη. Μοντέλο Van-Genuchten, Πίνακας 2-1 & Πίνακας 3-2.....	40
Σχήμα 3-3 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες αναλυτικής μεθόδου Buckley-Leverett.....	42

Σχήμα 3-4 Διακριτοποίηση εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες για τη προσομοίωση της εισπίεσης νερού με χρήση του λογισμικού T2VOC.....	43
Σχήμα 3-5 Εισπίεση νερού σε εδαφική στήλη: Διάγραμμα χρόνου – θέσης μετώπου (T2VOC) για την καλώς διαβαθμισμένη άμμο. Σενάρια A1 και A2.....	46
Σχήμα 3-6 Κατανομή βαθμών κορεσμού υδατικής φάσης (T2VOC) και αναλυτικής λύσης (Buckley-Leverett) για τα εξεταζόμενα εδάφη. $t=12.5h$ , $q_{inj}^w=20L/day$ . ....	50
Σχήμα 3-7 Κατανομή βαθμών κορεσμού υδατικής φάσης (T2VOC) και αναλυτικής λύσης (Buckley-Leverett) για τα εξεταζόμενα εδάφη. $t=5h$ , $q_{inj}^w=50L/day$ .....	50
Σχήμα 3-8 Διακριτοποίηση εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες για την προσομοίωση εισπίεσης ατμού με χρήση του λογισμικού T2VOC. ....	53
Σχήμα 3-9 Σχηματική απεικόνιση των Θερμοκρασιακών Ζωνών I & II για τυχούσα θέση $x_f$ του θερμικού μετώπου .....	55
Σχήμα 3-10 Στοιχειώδης μεταβολή $dx_f$ της θέσης του θερμικού μετώπου σε χρονικό διάστημα $dt$ . ....	55
Σχήμα 3-11 Εισπίεση ατμού σε εδαφική στήλη: Διάγραμμα χρόνου – θέσης μετώπου (T2VOC) για τη λεπτόκοκκη άμμο. Σενάρια αρχικών συνθηκών B1, B2 και B3. ....	60
Σχήμα 3-12 Συγκριτικό Διάγραμμα χρόνου-ποσοστού απομάκρυνσης DNAPL για την απορρύπανση της καλώς διαβαθμισμένης άμμου με εισπίεση νερού και εισπίεση ατμού. ....	68
Σχήμα 4-1 Διαστάσεις και κατανομή στρώσεων/φακών χαμηλής περατότητας για τους εξεταζόμενους υδροφορείς .....	76
Σχήμα 4-2 Διακριτοποίηση διδιάστατου πεδίου.....	78
Σχήμα 4-3 Στάδιο Β: Διαρροή TCE. Απεικόνιση Συνοριακών Συνθηκών. Π1, Π2: Εστίες Διαρροής TCE.....	80
Σχήμα 4-4 Κατανομή Βαθμού Κορεσμού TCE για $t=1, 2$ και $3$ χρόνια από την έναρξη της διαρροής. α) Υδροφορέας O1 β) Υδροφορέας O2 γ) Ετερογενής Υδροφορέας .....	82
Σχήμα 4-5 Στάδιο Γ: Ανακατανομή TCE. Απεικόνιση Συνοριακών Συνθηκών. ....	83
Σχήμα 4-6 Κατανομή Βαθμού Κορεσμού TCE για $2, 4$ και $6$ χρόνια από το πέρας της διαρροής. α) Υδροφορέας O1 β) Υδροφορέας O2 γ) Ετερογενής Υδροφορέας .....	84

Σχήμα 4-7 Στάδιο Δ1: Απορρύπανση με εισπίεση/άντληση νερού. Απεικόνιση συνοριακών συνθηκών.....	87
Σχήμα 4-8 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα O1 με άντληση νερού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 10 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.....	89
Σχήμα 4-9 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα O2 με άντληση νερού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 100 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.....	90
Σχήμα 4-10 Απορρύπανση ετερογενούς υδροφορέα με άντληση νερού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 20 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.....	91
Σχήμα 4-11 Επίδοση της άντλησης νερού για το σύνολο των τριών υδροφορέων. J=3% ..	93
Σχήμα 4-12 Στάδιο Δ2: Απορρύπανση με εισπίεση ατμού. Συνοριακές Συνθήκες .....	96
Σχήμα 4-13 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα O1 με εισπίεση ατμού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης. ....	98
Σχήμα 4-14 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα O2 με εισπίεση ατμού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.....	99
Σχήμα 4-15 Απορρύπανση ετερογενούς πεδίου με εισπίεση ατμού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.....	100
Σχήμα 4-16 Διάγραμμα Χρόνου-Ποσοστού απομάκρυνσης μάζας DNAPL για την περίπτωση εισπίεσης ατμού στον ομογενή (O1) και ετερογενή υδροφορέα.....	101
Σχήμα 4-17 Καμπύλες ίσου βαθμού κορεσμού αέριας φάσης (----) για t=15,20 και 25 ημέρες από την έναρξη εισπίεσης ατμού στον ομογενή υδροφορέα O1.....	102
Σχήμα 4-18 Καμπύλες ίσου βαθμού κορεσμού αέριας φάσης (---) 15, 20 και 25 ημέρες από την έναρξη εισπίεσης ατμού στο ετερογενές πεδίο. ....	104
Σχήμα 4-19 Έλεγχος τάσεων εδάφους για την περίπτωση εισπίεσης ατμού στον ετερογενή υδροφορέα, t=75days. Παρατηρούμε ότι $P_g < \sigma$ και συνεπώς ο έλεγχος ικανοποιείται.....	108
Σχήμα 4-20 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O1. ....	109
Σχήμα 4-21 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O2. ....	110

Σχήμα 4-22 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ετερογενή υδροφορέα. ....	111
Σχήμα A-1 α) Κατανομή βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης και β) Πίεση μη υδατικής φάσης σε όρους ύψους στήλης H <sub>2</sub> O για το καλώς διαβαθμισμένο έδαφος. Παροχή εισπίεσης 50L/day, t=5.5h.....	126

# 1 Εισαγωγή

## 1.1 Γενικά

Η ολοένα και αυξανόμενη χρήση των υπόγειων νερών για την κάλυψη τόσο των υδρευτικών αναγκών όσο και των γεωργικών/βιομηχανικών δραστηριοτήτων καθιστούν τη ρύπανση των υπόγειων υδροφορέων ένα μείζον περιβαλλοντικό πρόβλημα. Ενώ η ρύπανση του υπεδάφους προέρχεται συνήθως από διαρροή ή απόθεση σε αυτό χημικών ουσιών με αρνητικές για την ανθρώπινη υγεία επιπτώσεις, δεν οφείλεται πάντα στην ανθρωπογενή δραστηριότητα: χαρακτηριστική είναι η περίπτωση όπου λόγω φυσικών διεργασιών στο υπέδαφος παρατηρείται αύξηση της συγκέντρωσης των βαρέων μετάλλων.

Οι ρύποι κατηγοριοποιούνται εν γένει σε δύο μεγάλες κατηγορίες: τους οργανικούς και τους ανόργανους, με τους πρώτους εξ αυτών να διαχωρίζονται σε υδατοδιαλυτούς και μη υδατοδιαλυτούς (Non Aqueous Phase Liquids – NAPL). Στην παρούσα εργασία θα μας απασχολήσει η περίπτωση των μη υδατοδιαλυτών ρύπων και συγκεκριμένα αυτών των οποίων η πυκνότητα είναι μεγαλύτερη από αυτήν του νερού οπότε και αναφέρονται ως βαρείς μη υδατοδιαλυτοί ρύποι (Dense-NAPL: DNAPL). Χαρακτηριστικά παραδείγματα βαρέων μη υδατοδιαλυτών οργανικών ρύπων αποτελούν τα κρεοζοτέλαια, τα πολυχλωριωμένα διφαινύλια (Polychlorinated biphenyls: PCBs), τα ζιζανιοκτόνα καθώς επίσης και οι οργανικοί διαλύτες, όπως για παράδειγμα το τετραχλωροαιθυλένιο (Perchloroethylene: PCE) και το τριχλωροαιθυλένιο (Trichloroethylene: TCE). Το τελευταίο μάλιστα αποτελεί τον πιο συχνά ανιχνευόμενο οργανικό ρύπο στο υπόγειο νερό των ΗΠΑ (Καββαδάς 2007).

Οι προσπάθειες για την απορρύπανση των υπόγειων υδροφορέων ξεκίνησαν με την εφαρμογή συστημάτων άντλησης και επεξεργασίας (pump & treat) που αποσκοπούν στην απομάκρυνση της μάζας των διαλυμένων ρύπων. Η αρχικώς επικρατούσα αντίληψη (~1970) ήταν ότι η εν λόγω τεχνολογία δύναται να απορρυπάνει τους υδροφορείς και να μειώσει τη συγκέντρωση των ρύπων σε επίπεδα μικρότερα της μέγιστης επιτρεπτής συγκέντρωσης (Kavanaugh & Rao, 2003). Προς τα τέλη της δεκαετίας του 1980 η άποψη αυτή ανετράπη καθώς διαπιστώθηκε, αφενός η απαιτούμενη επί μακρά χρονικά διαστήματα εφαρμογή της μεθόδου και αφετέρου η αδυναμία των συστημάτων άντλησης και επεξεργασίας να απορρυπάνουν ετερογενείς υδροφορείς, ιδιαίτερα στην περίπτωση όπου ο ρύπος απαντάται σε μη υδατική φάση, οπότε και συνιστά μια επίμονη πηγή ρύπανσης για το

υπόγειο νερό (Sale et al., 2008). Για τους λόγους αυτούς, προς τα τέλη της δεκαετίας του 1980 κατέστη επιτακτική η ανάγκη ανεύρεσης νέων τεχνολογιών και τροποποίησης των ήδη υπαρχουσών, προκειμένου η προσπάθεια απορρύπανσης να προσανατολιστεί πλέον στην απορρύπανση της πηγής, δηλαδή της περιοχής όπου ο ρύπος απαντάται ως μη υδατική φάση (Stroo et al., 2012).

Στην περίπτωση που οι χλωριωμένοι υδρογονάνθρακες, στους οποίους εστιάζει η παρούσα διπλωματική, συναντώνται σε μη υδατική φάση, οι επιλογές ως προς τις διαθέσιμες τεχνολογίες αποκατάστασης περιορίζονται σημαντικά. Οι τεχνολογίες που δύναται να εφαρμοσθούν για την απορρύπανση της πηγής (source zone treatment) είναι:

- a) η ενισχυμένη βιοαποδόμηση (enhanced bioremediation),
- b) η εισαγωγή οξειδωτικών στο πεδίο που διασπούν τον εκάστοτε ρύπο (chemical oxidation),
- c) η εισπίεση τασιενεργών ουσιών ή συνδιαλυτών που αποσκοπούν στην αύξηση της κινητικότητας της μη υδατικής φάσης αλλά και στην αύξηση της διαλυτότητας του ρύπου (surfactant/cosolvent flushing),
- d) οι θερμικές μέθοδοι όπως για παράδειγμα η εισπίεση ατμού (steam injection), η θέρμανση του εδάφους με χρήση ηλεκτρικών αντιστάσεων (thermal conductive heating), η επιβολή διαφοράς δυναμικού με χρήση ηλεκτροδίων (electrical resistance heating).

Οι παραπάνω μέθοδοι αποκατάστασης έχουν εφαρμοσθεί σε πιλοτική αλλά και πλήρη κλίμακα εφαρμογής και έχουν επιτύχει, σε κάθε περίπτωση, ποσοστό απομάκρυνσης μάζας μη υδατικής φάσης μεγαλύτερο από 70%. Έχει ακόμα παρατηρηθεί ότι μετά την ολοκλήρωση της εφαρμογής των μεθόδων αυτών, η συγκέντρωση των ρύπων στο υπόγειο νερό υπερβαίνει τη μέγιστη επιτρεπτή συγκέντρωση και συνεπώς απαιτείται η παρακολούθηση της φυσικής εξασθένησης του ρύπου, που συνεπάγεται πρόσθετο, στο ήδη επιβαρυνμένο, κόστος των μεθόδων αυτών (McGuire et al. 2006). Επειδή ακόμα οι τεχνολογίες αυτές εφαρμόστηκαν σχετικά πρόσφατα, η επίδοσή τους δεν έχει επαρκώς ποσοτικοποιηθεί με αποτέλεσμα τα ενδιαφερόμενα μέρη (stakeholders) να έχουν αβεβαιότητα ως προς την επιλογή ή όχι κάποιας από τις εν λόγω μεθόδους (Kavanaugh & Rao, 2003). Την αβεβαιότητα αυτή έρχεται να ενισχύσει η μειωμένη αντίληψη σχετικά με την καταλληλότητα των τεχνολογιών αυτών σε σχέση με την αρχιτεκτονική της πηγής, δηλαδή την αρχική κατανομή του DNAPL που είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με τη στρωματοποίηση του υδροφορέα, την ύπαρξη φακών χαμηλής περατότητας, το βάθος της



ρυπασμένης ζώνης κ.α. Στην περίπτωση των ετερογενών υδροφορέων, οι θερμικές μέθοδοι επιτυγχάνουν μεγαλύτερα ποσοστά απομάκρυνσης μάζας DNAPL σε σχέση με τις υπόλοιπες τεχνολογίες που παρουσιάστηκαν προηγουμένως και αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι οι χημικές ουσίες που χρησιμοποιούνται σε αυτές (π.χ. οξειδωτικά, τασιενεργά) αδυνατούν να διεισδύσουν στις ζώνες χαμηλής περατότητας, με αποτέλεσμα τη μείωση της επίδοσης των αντίστοιχων μεθόδων (Stroo et al., 2012). Για τους παραπάνω λόγους, τα ενδιαφερόμενα μέρη επιλέγουν συχνά ως λύση του προβλήματος τον περιορισμό της ρύπανσης με τη κατασκευή κατακόρυφων περιμετρικών διαφραγμάτων ή/και τη λειτουργία συμβατικών συστημάτων άντλησης και επεξεργασίας (Kavanaugh & Rao, 2003).

## 1.2 Σκοπός & Μέθοδος

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η διερεύνηση της επίδρασης των εδαφικών χαρακτηριστικών στην επίδοση της μεθόδου εισπίεσης ατμού, σε σύγκριση με τη συμβατική μέθοδο άντλησης νερού, για την απομάκρυνση μη υδατικής φάσης TCE από υπόγειους υδροφόρους. Για τον σκοπό αυτό, μελετήθηκαν περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού και κατεγράφησαν τα χαρακτηριστικά εκείνα που κρίθηκαν απαραίτητα για την εξυπηρέτηση του ανωτέρω σκοπού (π.χ. βάθος ρυπασμένης ζώνης, απόσταση φρεάτων, χρόνος αποκατάστασης, ποσοστό απομάκρυνσης μάζας TCE). Για τη διερεύνηση της επίδρασης των εδαφικών χαρακτηριστικών, εξετάστηκε η επίδοση των δύο μεθόδων για την απορρύπανση διαφορετικών εδαφών σε μία αλλά και δύο διαστάσεις.

Στο κύριο μέρος της διπλωματικής προσομοιώθηκαν παραδείγματα εισπίεσης νερού και ατμού, με αναλυτικές μεθόδους και με χρήση του λογισμικού προσομοίωσης μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής T2VOC, το οποίο αναπτύχθηκε στο εργαστήριο Berkeley Lawrence. Πιο συγκεκριμένα, εξετάστηκε η απορρύπανση εδαφικής στήλης για τρία διαφορετικά εδάφη καθώς επίσης και η απορρύπανση διδιάστατου πεδίου, όπου εξετάστηκαν τρεις στο σύνολο υδροφορείς. Για την περίπτωση εισπίεσης ατμού σε διδιάστατο πεδίο, πραγματοποιήθηκε ακόμα έλεγχος ως προς τις αναπτυσσόμενες ενεργές τάσεις του εδάφους.

### 1.3 Δομή εργασίας

Η παρούσα διπλωματική εργασία διαρθρώνεται σε πέντε κεφάλαια, το περιεχόμενο των οποίων παρουσιάζεται συνοπτικώς στις παραγράφους που ακολουθούν.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΔΕΥΤΕΡΟ: Παρατίθενται τα θεωρητικά στοιχεία που είναι απαραίτητα προκειμένου ο αναγνώστης να κατανοήσει το περιεχόμενο της εργασίας. Συγκεκριμένα παρουσιάζονται οι βασικές αρχές που αφορούν την τριχοειδή πίεση, τη σχετική διαπερατότητα και τα θερμικά χαρακτηριστικά των εδαφών. Παρατίθενται οι φυσικοχημικές ιδιότητες του TCE, οι παραδοχές του λογισμικού T2VOC, καθώς επίσης και τα βασικά χαρακτηριστικά των περιστατικών απορρύπανσης που μελετήθηκαν.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΡΙΤΟ: Μελετάται η απορρύπανση εδαφικής στήλης αρχικά ρυπασμένης με μη υδατική φάση TCE. Παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά των εξεταζόμενων εδαφών, εφαρμόζεται η αναλυτική λύση Buckley-Leverett, παρουσιάζεται ενδελεχώς το αναλυτικό μοντέλο υπολογισμού της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου και ελέγχεται η απόκλιση των αναλυτικών αυτών λύσεων από τα αποτελέσματα του λογισμικού T2VOC. Πραγματοποιείται σύγκριση της επίδοσης μεταξύ των μεθόδων εισπίεσης νερού/ατμού και υπολογίζεται το απαιτούμενο έργο (ενέργεια) για την επίτευξη δεδομένου ποσοστού απομάκρυνσης μάζας TCE.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΕΤΑΡΤΟ: Μελετάται η απορρύπανση διδιάστατου πεδίου με τη μέθοδο άντλησης νερού και εισπίεσης ατμού. Παρουσιάζονται τα επιλεχθέντα εδαφικά χαρακτηριστικά καθενός εκ των τριών υπό εξέταση υδροφορέων, περιγράφονται τα στάδια προσομοίωσης, και συγκρίνεται η επίδοση των δύο μεθόδων για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς. Στο κεφάλαιο αυτό πραγματοποιείται ακόμα, για την περίπτωση της εισπίεσης ατμού, έλεγχος των τάσεων του εδάφους.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΕΜΠΤΟ: Παρουσιάζονται συνοπτικώς τα συμπεράσματα, όπως αυτά προέκυψαν από τα κεφάλαια που προηγήθηκαν.

Τέλος, μετά τις βιβλιογραφικές αναφορές, ακολουθεί παράρτημα με τους πηγαίους κώδικες, σε προγραμματιστικό περιβάλλον *FORTRAN* και *MATLAB*, που χρησιμοποιήθηκαν για την περαίωση της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

## 2 Θεωρητικό Υπόβαθρο

Στο παρόν κεφάλαιο, παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο που είναι απαραίτητο προκειμένου ο αναγνώστης της εργασίας να κατανοήσει το περιεχόμενο των επόμενων κεφαλαίων. Δίδεται έμφαση στα εδαφικά χαρακτηριστικά που θα μας απασχολήσουν, στις αναλυτικές λύσεις που θα χρησιμοποιηθούν, στη μεταφορά θερμότητας στο έδαφος, στα χαρακτηριστικά του TCE, στο λογισμικό πολυφασικής ροής T2VOC και τέλος παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά των περιστατικών που μελετήθηκαν.

### 2.1 Στοιχεία μηχανικής πετρελαίων

#### 2.1.1 Τριχοειδής πίεση

Η τριχοειδής πίεση ορίζεται ως η διαφορά της πίεσης μεταξύ της διεπιφάνειας δύο μη-αναμιζόμενων, ηρεμούντων υγρών. Η διαφορά αυτή της πίεσης οφείλεται στην επίδραση της επιφανειακής τάσης των υγρών (Σταματάκη, 2006). Αν συμβολίσουμε με  $P_w$  και  $P_n$  την πίεση της διαβρέχουσας και μη διαβρέχουσας φάσης, αντίστοιχα, τότε η τριχοειδής πίεση ισούται με:

$$P_{cnw} = P_n - P_w \quad (1.1)$$

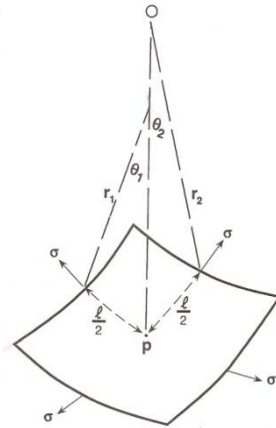
Η συσχέτιση της τριχοειδούς πίεσης με την επιφανειακή τάση σε κάποιο σημείο  $p$  (βλέπε Σχήμα 2-1) της διεπιφάνειας των δύο ρευστών δίδεται μέσω της εξίσωσης του Laplace (Corey, 1994):

$$P_{cnw} = \sigma \left[ \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right] \quad (1.2)$$

όπου:  $\sigma$ : επιφανειακή τάση μεταξύ των ρευστών

$r_1, r_2$ : Οι δύο κύριες ακτίνες καμπυλότητας της διεπιφάνειας μεταξύ των δύο ρευστών

Αξίζει ακόμα να σημειωθεί ότι οι δύο ακτίνες καμπυλότητας  $r_1$  και  $r_2$  κινούνται σε κάθετα μεταξύ τους επίπεδα. Στο Σχήμα 2-1 απεικονίζονται οι ακτίνες καμπυλότητας για τυχόν σημείο  $p$  της διεπιφάνειας των δύο υγρών.

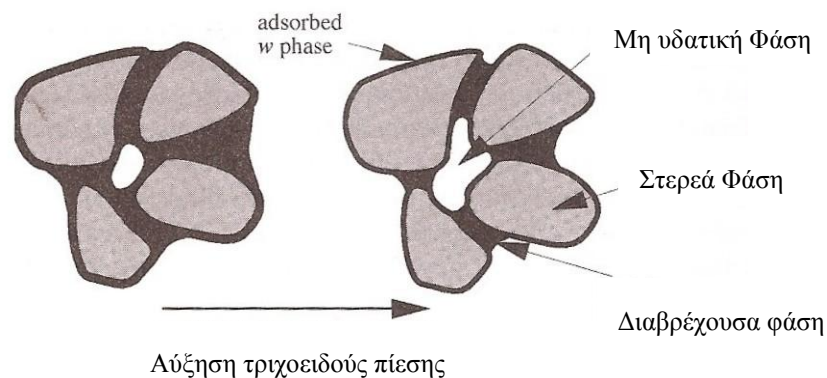


Σχήμα 2-1 Απεικόνιση των παραμέτρων της εξίσωσης του Laplace  
 Πηγή: Corey (1994)

Σύμφωνα με τους Pinder & Gray (2008), η εξίσωση του Laplace αποτελεί τη μικροσκοπική θεώρηση της τριχοειδούς πίεσης. Καθώς σε ένα δείγμα εδάφους ο βαθμός κορεσμού της διαβρέχουσας (υδατικής) φάσης μειώνεται, τότε αυτή τείνει να καταλάβει τους πόρους μικρής διαμέτρου του πορώδους μέσου, με αποτέλεσμα τη σημαντική μείωση της ακτίνας καμπυλότητας της διεπιφάνειας και, άρα, της τριχοειδούς πίεσης. Η μείωση της ακτίνας καμπυλότητας σε συνδυασμό με τη μείωση του βαθμού κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης απεικονίζεται

στο

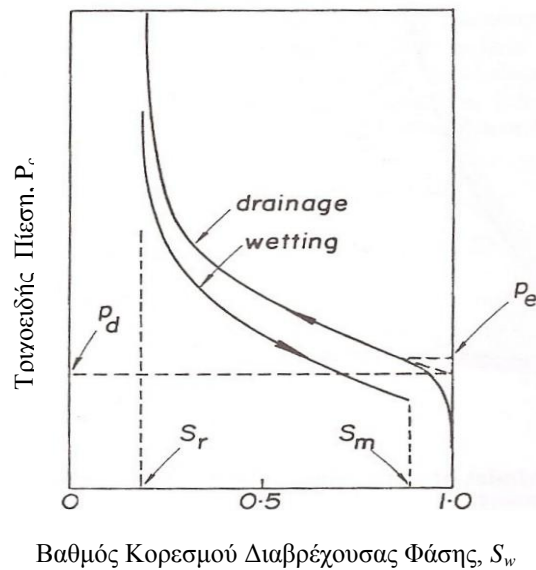
Σχήμα 2-2.



Σχήμα 2-2 Αύξηση τριχοειδούς πίεσης για μείωση του βαθμού κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης σε πορώδες μέσο. Προσαρμογή από Pinder & Gray (2008)

Για δεδομένο έδαφος, οι καμπύλες τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού προκύπτουν πειραματικά (Ahmed, 2006). Πιο συγκεκριμένα, δείγμα κορεσμένου εδάφους ( $S_w=1$ ) τοποθετείται σε πειραματική συσκευή στο κάτω μέρος της οποίας υπάρχει ημιπερατό διάφραγμα το οποίο επιτρέπει τη διέλευση μόνο του νερού. Το δοκίμιο περιβάλλεται από

αέρα, η πίεση του οποίου αυξάνεται σταδιακά. Με κάθε αύξηση της πίεσης του αέρα επιτυγχάνεται σταδιακή εισχώρηση της αέριας φάσης εντός του δοκιμίου (καμπύλη αποστράγγισης, drainage). Μετά από κάθε βήμα αύξησης της πίεσης, το σύστημα αφήνεται να φτάσει σε ισορροπία οπότε και καταγράφεται αφενός ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης και αφετέρου η τριχοειδής πίεση. Προκύπτει έτσι η καμπύλη τριχοειδούς πίεσης-βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης για την περίπτωση της αποστράγγισης. Τυπική μορφή καμπύλης τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού απεικονίζεται στο Σχήμα 2-3.



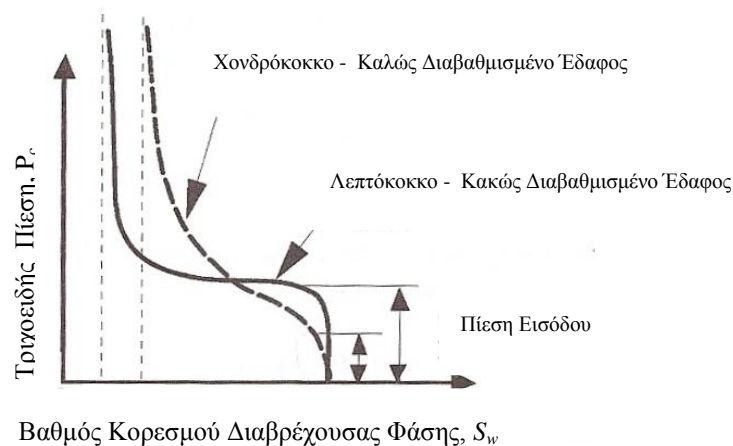
Σχήμα 2-3 Τυπική μορφή καμπύλης τριχοειδούς πίεσης – Βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης. Πηγή: Corey (1994)

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, το ενδιαφέρον επικεντρώνεται σε μερικά από τα χαρακτηριστικά που παρουσιάζουν οι καμπύλες τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού. Πιο συγκεκριμένα τα χαρακτηριστικά που θα μας απασχολήσουν είναι η πίεση εισόδου ( $p_e$ ) και η κλίση της εν λόγω καμπύλης.

Σύμφωνα με τον Corey (1994), ως πίεση εισόδου ( $p_e$ ) θεωρείται εκείνη η κρίσιμη τιμή της τριχοειδούς πίεσης, η υπέρβαση της οποίας έχει ως αποτέλεσμα την έναρξη του πρώτου κύκλου αποστράγγισης (Σχήμα 2-3, καμπύλη drainage). Σύμφωνα με τον ίδιο ερευνητή, η πίεση εισόδου αντιστοιχεί συνήθως σε τιμές  $S_w$  της τάξης του 80-90%. Η πίεση εισόδου εξαρτάται από τους πόρους μεγίστης διαμέτρου του πορώδους μέσου και μειώνεται αυξανόμενης της μέγιστης διαμέτρου των πόρων (Pinder & Gray, 2008). Κατά συνέπεια, τα χονδρόκοκκα εδάφη παρουσιάζουν εν γένει μικρές τιμές πίεσης εισόδου.

Σε ότι αφορά την κλίση της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης, αυτή είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση των καλώς διαβαθμισμένων εδαφών (Pinder & Gray, 2008). Αντίθετα, τα κακώς διαβαθμισμένα εδάφη χαρακτηρίζονται από καμπύλες τριχοειδούς πίεσης οι οποίες στο μεγαλύτερο εύρος των τιμών του βαθμού κορεσμού,  $S_w$  είναι παράλληλες στον άξονα του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης. Αξίζει ακόμα να αναφερθεί ότι η κλίση της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης αυξάνεται εν γένει με μείωση της υδραυλικής αγωγιμότητας του εδάφους (Ahmed, 2006).

Η επίδραση της κοκκομετρικής διαβάθμισης καθώς επίσης και της μέγιστης διαμέτρου των κόκκων στη καμπύλη τριχοειδούς πίεσης παρουσιάζεται συνοπτικά στο σχήμα Σχήμα 2-4.



Σχήμα 2-4 Επίδραση Κοκκομετρικής διαβάθμισης εδάφους στα χαρακτηριστικά της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης. Προσαρμογή από Pinder (2008)

Από τα μοντέλα που έχουν προταθεί και συσχετίζουν την τριχοειδή πίεση με τον βαθμό κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης, το μοντέλο των Brooks & Corey καθώς επίσης και το μοντέλο του Van Genuchten είναι αυτά που χρησιμοποιούνται ευρέως τόσο στην επιστήμη των εδαφών, στην υδρολογία των υπόγειων νερών αλλά και στη μηχανική ταμιευτήρων πετρελαίου (Ahmed, 2006). Τα μοντέλα αυτά, τα οποία – στην πρωτογενή τους μορφή – συσχετίζουν τον ενεργό βαθμό κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης με την τριχοειδή πίεση σε όρους ύψους στήλης νερού, παρουσιάζονται στο Πίνακα 2-1. Επιπρόσθετα, ο ενεργός βαθμός κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης ορίζεται ως:

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}}, \quad (1.3)$$

όπου  $S_{wr}$  ο παραμένον βαθμός κορεσμού της διαβρέχουσας φάσης.

**Πίνακας 2-1 Μοντέλα Τριχοειδούς Πίεσης-Βαθμού κορεσμού διαβρέχουσας φάσης και παράμετροι αυτών.**

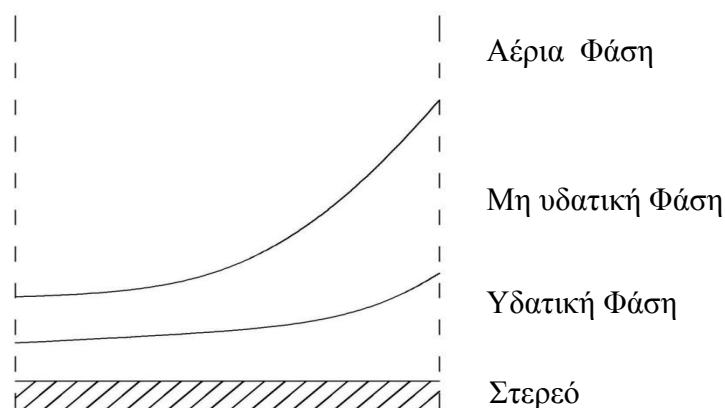
Brooks & Corey		Van Genuchten	
$\bar{S}_w = (ah_{gw})^{-\lambda}, ah_{gw} > 1 \quad (1.4)$ $\bar{S}_w = 1, ah_{gw} \leq 1 \quad (1.5)$		$\bar{S}_w = [1 + (a_{gw}h_{gw})^N]^{-M} \quad (1.6)$	
Παράμετρος	Μονάδες	Παράμετρος	Μονάδες
$\alpha$	$[L]^{-1}$	$\alpha_{gw}$	$[L]^{-1}$
$\lambda$	Αδιάστατο	$N$	Αδιάστατο
$S_{wr}$	Αδιάστατο	$M$	Αδιάστατο
		$S_{wr}$	Αδιάστατο

Το μοντέλο των Brooks & Corey υπολογίζει με ικανοποιητική ακρίβεια την τριχοειδή πίεση για την περίπτωση χονδρόκοκκων και κακώς διαβατισμένων εδαφών (Pinder & Gray, 2008). Αυτά τα χαρακτηριστικά εδάφους αντιστοιχούν σε μεγάλες τιμές της παραμέτρου  $\lambda$  και σε σαφώς ορισμένη πίεση εισόδου. Η παράμετρος  $\lambda$  ονομάζεται δείκτης κατανομής του μεγέθους των πόρων και για τη συγκεκριμένη παράμετρο, ο Corey (1994) συνιστά τη τιμή 2 για τυπικά πορώδη μέσα και τιμές από 4 έως 5 για φυσικές αποθέσεις άμμων.

Αντίθετα, στην περίπτωση του μοντέλου Van Genuchten απαιτείται ο προσδιορισμός μιας επιπλέον παραμέτρου, πράγμα που αυξάνει την ακρίβεια του μοντέλου σε σχέση με το μοντέλο των Brooks & Corey (Pinder & Gray, 2008). Επιπρόσθετα, το μοντέλο Van Genuchten είναι παραγωγίσιμο σε όλο το εύρος των βαθμών κορεσμού της υδατικής φάσης.

Στην περίπτωση τριφασικής ροής, όπου οι συνυπάρχουσες φάσεις είναι η υδατική, η μη υδατική και η αέρια, απαιτείται να προσδιοριστούν οι καμπύλες τριχοειδούς πίεσης για κάθε ένα από τα παρακάτω ζεύγη φάσεων : υδατική – μη υδατική, υδατική – αέρια, μη υδατική – αέρια. Οι Lenhard & Parker (1987) αναφέρουν ότι οι πειραματικές διατάξεις για τη μέτρηση τριχοειδών πιέσεων σε τριφασικά συστήματα είναι αφενός πολύπλοκες και αφετέρου οι αντίστοιχες μετρήσεις ιδιαίτερα χρονοβόρες και δαπανηρές. Για τον λόγο αυτό, οι ερευνητές χρησιμοποιούν μετρήσεις τριχοειδούς πίεσης από διφασικά συστήματα προκειμένου να εξάγουν συμπεράσματα για τις τριχοειδείς πιέσεις που αναπτύσσονται στην περίπτωση τριφασικής ροής (Ahmed, 2006).

Οι Parker & Lenhard (Parker et al., 1987) πρότειναν το 1987 μια μέθοδο υπολογισμού των καμπυλών τριχοειδούς πίεσης για οποιοδήποτε ζεύγος φάσεων σε δεδομένο έδαφος όταν είναι γνωστή η καμπύλη τριχοειδούς πίεσης για τυχόν ζεύγος φάσεων στο έδαφος αυτό. Η θεωρία τους βασίστηκε στην παραδοχή ότι στην περίπτωση τριφασικής ροής, δεν αναπτύσσεται κοινό σημείο επαφής μεταξύ των φάσεων. Η θεώρηση αυτή απεικονίζεται στο Σχήμα 2-5.



Σχήμα 2-5 Διαβρεξιμότητα φάσεων και σχηματική απεικόνιση της παραδοχής των Lenhard & Parker για τη γενική περίπτωση τριφασικής ροής.

Προκειμένου να ικανοποιείται η παραδοχή των Lenhard & Parker, θα πρέπει, σύμφωνα με τον Oren (Oren & Pinczewski, 1995) να ικανοποιείται η παρακάτω σχέση για τον συντελεστή εξάπλωσης  $S$ .

$$S = \sigma_{wg} - \sigma_{wn} - \sigma_{gn} \geq 0 \quad (1.7)$$

Ο συντελεστής εξάπλωσης  $S$  εκφράζει την προτίμηση διαβροχής της υδατικής φάσης και για  $S \geq 0$  η υδατική φάση διαβρέχεται πλήρως από τη μη υδατική φάση. Για την περίπτωση που η μη υδατική φάση είναι το TCE η σχέση (1.7) ικανοποιείται και συνεπώς έχει νόημα η εφαρμογή της μεθόδου των Parker & Lenhard.

Σύμφωνα με τους τελευταίους (Parker et al., 1987), και βάσει της προαναφερθείσας παραδοχής, η τριχοειδής πίεση μεταξύ της αέριας και μη υδατικής φάσης θα είναι συνάρτηση του βαθμού κορεσμού της υγρής φάσης  $S_l$ . Ως υγρή φάση ορίζεται το άθροισμα του βαθμού κορεσμού της υδατικής και μη υδατικής φάσης. Επιπρόσθετα, η τριχοειδής πίεση μεταξύ της μη υδατικής και υδατικής φάσης είναι συνάρτηση του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης. Ακόμα, στην περίπτωση της τριφασικής ροής, σύμφωνα με την



προαναφερθείσα θεωρία, η τριχοειδής πίεση μεταξύ υγρής και αέριας φάσης δεν έχει φυσική σημασία καθώς δεν σχηματίζεται διεπιφάνεια μεταξύ των φάσεων αυτών.

Οι Lenhard & Parker εφήρμοσαν τη θεωρία τους στη σχέση τριχοειδούς πίεσης του Van Genuchten και κατέληξαν στις παρακάτω σχέσεις για την περιγραφή των τριχοειδών πιέσεων στην περίπτωση τριφασικής ροής:

$$M = 1 - 1/N \quad (1.8)$$

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_m}{1 - S_m} \quad (1.9)$$

$$\bar{S}_l = \frac{S_w + S_n - S_m}{1 - S_m} \quad (1.10)$$

$$P_{cgn} = P_g - P_n = \frac{\rho_w g}{a_{gn}} \left[ (\bar{S}_l)^{-1/M} - 1 \right]^{1/N} \quad (1.11)$$

$$P_{cnw} = P_n - P_w = \frac{\rho_w g}{a_{nw}} \left[ (\bar{S}_w)^{-1/M} - 1 \right]^{1/N} \quad (1.12)$$

$$P_{cgw} = P_{cgn} + P_{cnw} \quad (1.13)$$

$$\beta_{gn} = \frac{\sigma_{gw}}{\sigma_{gn}} \quad (1.14)$$

$$\beta_{nw} = \frac{\sigma_{gw}}{\sigma_{nw}} \quad (1.15)$$

$$a_{gn} = a_{gw} \beta_{gn} \quad (1.16)$$

$$a_{nw} = \alpha_{gw} \beta_{nw} \quad (1.17)$$

Για τον καθορισμό των παραπάνω σχέσεων απαιτείται ο προσδιορισμός της παραμέτρου  $N$  που σχετίζεται με την κατανομή των πόρων του μέσου, ο προσδιορισμός της παραμέτρου  $S_m$  που λαμβάνεται συνήθως ίση με τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης στο διβάθμιο σύστημα υδατικής-αέριας φάσης και τέλος ο καθορισμός της παραμέτρου  $a_{gw}$  της σχέσης Van Genuchten για την περίπτωση τριχοειδούς πίεσης μεταξύ υδατικής και αέριας φάσης. Οι επιφανειακές τάσεις  $\sigma$  λαμβάνονται από τη βιβλιογραφία. (Parker & Lenhard, 1990).

Αξίζει ακόμα να αναφερθεί ότι οι παράμετροι  $\alpha_{gw}$ ,  $N$  και  $S_m$  εξαρτώνται από τα χαρακτηριστικά του πορώδους μέσου, ενώ οι συντελεστές  $\beta_{gn}$  και  $\beta_{nw}$  εξαρτώνται από τα χαρακτηριστικά της μη υδατικής φάσης (Parker & Lenhard, 1990).

### 2.1.2 Σχετική διαπερατότητα

Στην περίπτωση πολυφασικής ροής, ως σχετική διαπερατότητα της φάσης  $\beta$ , ορίζεται ο λόγος της ενεργού διαπερατότητας της φάσης  $\beta$  προς την απόλυτη διαπερατότητα του πορώδους μέσου (Σταματάκη, 2006). Η σχετική διαπερατότητα της φάσης  $\beta$  είναι συνάρτηση του βαθμού κορεσμού της φάσης  $\beta$ . Ισχύει δηλαδή:

$$k_{r\beta}(S_\beta) = \frac{k_\beta(S_\beta)}{k_s} \quad (1.18)$$

Η τιμή της σχετικής διαπερατότητας, για κάθε μία από τις φάσεις λαμβάνει τιμή από μηδέν μέχρι ένα, ενώ το άθροισμα της σχετικής διαπερατότητας για το σύνολο των φάσεων δεν μπορεί να υπερβαίνει τη μονάδα. Ο περιορισμός αυτός αποδίδεται στην αλληλεπίδραση των φάσεων κατά την ταυτόχρονη ροή τους στο πορώδες μέσο (Ahmed, 2006).

Για την περίπτωση διφασικής ροής νερού-μη υδατικής φάσης, ο Corey (1994) προτείνει την ακόλουθη σχέση για τον υπολογισμό της σχετικής διαπερατότητας της υδατικής φάσης:

$$k_{rw} = (\bar{S}_w)^\varepsilon, \quad (1.19)$$

όπου  $\varepsilon$  θετική παράμετρος. Η τιμή του  $\varepsilon$  κυμαίνεται συνήθως από 3 μέχρι 4, ενώ για φυσικές αποθέσεις αμμών οι Brooks & Corey (Corey, 1994) συνιστούν τη τιμή 3.50. Ομοίως, την ίδια τιμή προτείνουν, σύμφωνα με τον Ahmed (2006), οι Wyllie και Gardner (1958) για την περίπτωση των μη συμπυκνωμένων άμμων. Τιμές μεγαλύτερες από 4 μπορούν να χρησιμοποιηθούν για εδάφη με καλώς αναπτυγμένο δίκτυο πόρων.

Η σχετική διαπερατότητα της μη υδατικής φάσης δίδεται από την ακόλουθη σχέση:

$$k_m = (1 - \bar{S}_w)^2 (1 - \bar{S}_w)^\gamma, \quad (1.20)$$

όπου  $\gamma$  θετική παράμετρος η οποία εξαρτάται από τον δείκτη κατανομής των πόρων  $\lambda$ .

Για την περίπτωση τριφασικής ροής, όπου οι συνυπάρχουσες φάσεις είναι η υδατική, η μη-υδατική και η αέρια, η σχετική διαπερατότητα της υδατικής φάσης εξαρτάται αποκλειστικά από τον βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης (Ahmed, 2006). Το ίδιο κατ' αντιστοιχία ισχύει και για την αέρια φάση, ενώ σε ότι αφορά τη μη υδατική φάση, η σχετική

διαπερατότητα αυτής είναι συνάρτηση τόσο της υδατικής όσο και της αέριας φάσης. Τα παραπάνω συνοψίζονται στις ακόλουθες σχέσεις:

$$\begin{aligned} k_{rw} &= f(S_w) \\ k_{rg} &= f(S_g) \\ k_m &= f(S_w, S_g) \end{aligned} \quad (1.21)$$

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο του Stone II (Falta et al., 1992), (Ahmed, 2006) για τον υπολογισμό της σχετικής διαπερατότητας των τριών φάσεων. Το εν λόγω μοντέλο ικανοποιεί τις παραπάνω σχέσεις και παρουσιάζεται στη συνέχεια:

$$k_{rw} = \left[ \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^\varepsilon \quad (1.22)$$

$$k_{rg} = \left[ \frac{S_g - S_{gr}}{1 - S_{wr}} \right]^\varepsilon \quad (1.23)$$

$$k_m = \left[ \frac{1 - S_g - S_w - S_{nr}}{1 - S_g - S_{wr} - S_{nr}} \right] \left[ \frac{1 - S_{wr} - S_{nr}}{1 - S_w - S_{nr}} \right] \left[ \frac{(1 - S_g - S_{wr} - S_{nr})(1 - S_w)}{1 - S_{wr}} \right]^\varepsilon, \quad (1.24)$$

όπου με  $S_g$ ,  $S_n$ ,  $S_{gr}$ ,  $S_{nr}$  συμβολίζουμε τους βαθμούς κορεσμού και τους παραμένοντες βαθμούς κορεσμού της αέριας και μη υδατικής φάσης, αντίστοιχα.

Παρατηρούμε ότι η σχέση (1.22) ταυτίζεται με την σχέση (1.19) και συνεπώς για τη τιμή του συντελεστή  $\varepsilon$  μπορούν να ληφθούν οι τιμές οι οποίες συνιστώνται για την περίπτωση της διφασικής ροής από τους Brooks & Corey.

Ένα άλλο μοντέλο υπολογισμού της σχετικής διαπερατότητας για την περίπτωση της τριφασικής ροής είναι το μοντέλο του Parker (Parker et al., 1987). Ωστόσο, το μοντέλο αυτό, όπως προτάθηκε από τον Parker, δεν λαμβάνει υπόψη τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της μη υδατικής φάσης με αποτέλεσμα να υπερεκτιμά την κινητικότητά της (Class et al., 2002). Αυτός είναι και ο λόγος που το συγκεκριμένο μοντέλο δεν χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα διπλωματική εργασία.

### 2.1.3 Παραμένων βαθμός κορεσμού

Ο παραμένων βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης, τόσο στη κορεσμένη όσο και στην ακόρεστη ζώνη, εξαρτάται από τις παραμέτρους του εδάφους αλλά και από τα χαρακτηριστικά του ρύπου. Οι Mercer και Cohen (1990) αναφέρουν ότι ο παραμένων βαθμός κορεσμού εξαρτάται από την κατανομή των πόρων του εδάφους, τον λόγο της συνεκτικότητας μεταξύ της υδατικής και της μη υδατικής φάσης, την επιφανειακή τάση καθώς επίσης και από τις παρατηρούμενες υδραυλικές κλίσεις. Σύμφωνα με τους ίδιους ερευνητές, ο παραμένων βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης στην κορεσμένη ζώνη είναι εν γένει μεγαλύτερος από αυτόν στην ακόρεστη ζώνη.

Τόσο οι Mercer και Cohen (1990) όσο και ο Adamsky et al. (2005) συγκέντρωσαν δεδομένα που αφορούν μετρήσεις του παραμένοντος βαθμού κορεσμού στην κορεσμένη αλλά και στην ακόρεστη ζώνη. Τα αποτελέσματά της έρευνάς τους, που σχετίζονται αφενός με αμμώδη εδάφη και αφετέρου με μετρήσεις νερού/TCE, παρουσιάζονται στον Πίνακα 2-2.

**Πίνακας 2-2 Ενδεικτικές τιμές παραμένοντος βαθμού κορεσμού υδατικής και μη υδατικής φάσης (TCE) για αμμώδη εδάφη (Mercer & Cohen, 1990), (Adamsky et al., 2005).**

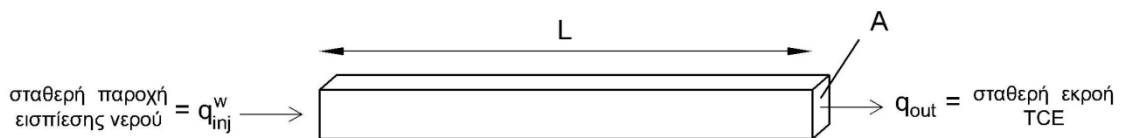
Υγρό	Ζώνη Ενδιαφέροντος	Έδαφος	Παραμένων Βαθμός Κορεσμού	Ερευνητής
Νερό	Ακόρεστη	Αμμώδες	0.10	Carsel και Parrish (1988)
TCE	Ακόρεστη	Μέση άμμος	0.20	Lin et al. (1982)
TCE	Ακόρεστη	Λεπτόκοκκη άμμος	0.15-0.20	Lin et al. (1982)
TCE	Κορεσμένη	Αμμώδες	0.02-0.15	Schwille (1988)

Αξίζει να σημειωθεί ότι σύμφωνα με τον Adamsky et al. (2005), οι μετρήσεις του Schwille αφορούν άμμους με υδραυλικές αγωγιμότητες που κυμαίνονται από  $10^{-6}$  έως  $10^{-4}$  m/s. Οι Dane και Oostrom (1994) πραγματοποίησαν μετρήσεις τριχοειδούς πίεσης σε χονδρόκοκκη άμμο και μέτρησαν τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού του TCE ίσο με 0.05 σε σύστημα νερού-TCE.

Συστηματικές μετρήσεις τριχοειδούς πίεσης έχουν δείξει ότι ο παραμένων βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης επηρεάζεται σημαντικά από το φαινόμενο της υστέρησης και συγκεκριμένα αυξάνεται όταν λαμβάνει χώρα το εν λόγω φαινόμενο (Pinder & Gray, 2008). Ωστόσο, η επίδραση του φαινομένου της υστέρησης εξαιρείται στη παρούσα εργασία λόγω της πολυπλοκότητάς του.

### 2.1.4 Η αναλυτική λύση Buckley- Leverett

Η αναλυτική λύση Buckley-Leverett συνιστά την πλέον γνωστή αναλυτική λύση για την περίπτωση της μονοδιάστατης εκτόπισης μη υδατικής φάσης από νερό (Pinder & Gray, 2008). Στην αναλυτική αυτή λύση αμελείται η συμπιεστότητα των φάσεων, θεωρείται ομοιόμορφη κατανομή του βαθμού κορεσμού των ρευστών τη χρονική στιγμή  $t=0$  και σταθερός ρυθμός εισπίεσης νερού (Σταματάκη, 2006). Η γενικευμένη μορφή της αναλυτικής λύσης των Buckley-Leverett αφορά την περίπτωση όπου η στήλη του πορώδους μέσου σχηματίζει γωνία  $\theta$  με την οριζόντιο. Στην παρούσα εργασία, θα μας απασχολήσει η περίπτωση όπου  $\theta=0$ . Στο Σχήμα 2-6 απεικονίζεται η μορφή της εδαφικής στήλης.



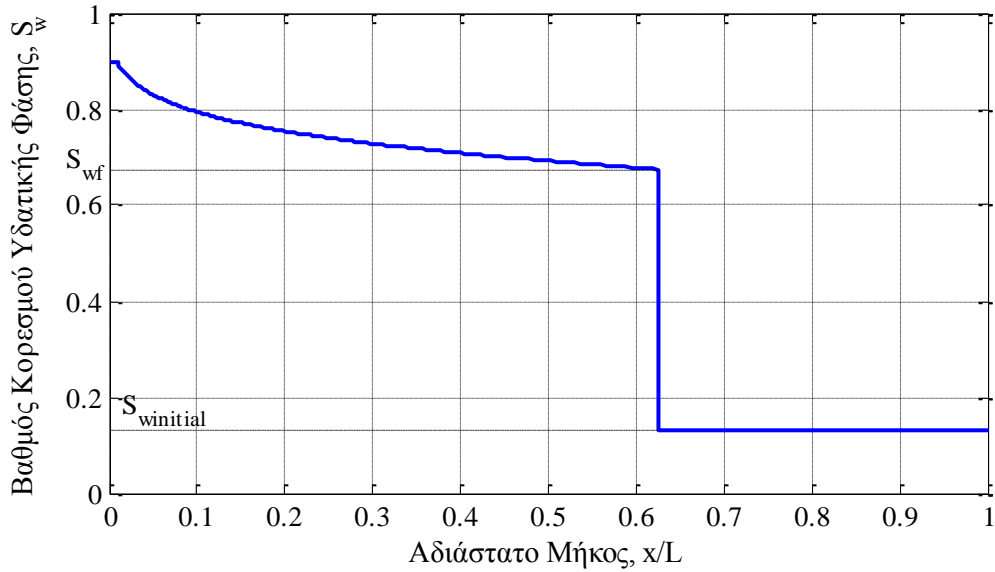
Σχήμα 2-6 Απεικόνιση της εδαφικής στήλης και των συνοριακών συνθηκών της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett.

Τη χρονική στιγμή  $t=0$ , η κατανομή κατά μήκος της στήλης των βαθμών κορεσμού της υδατικής και μη υδατικής φάσης αντίστοιχα είναι:

$$S_w(x, t = 0) = S_{winitial}, \quad (1.25)$$

$$S_n(x, t = 0) = 1 - S_{winitial} \quad (1.26)$$

Τη χρονική στιγμή  $t=0$ , οπότε και ξεκινά η εισπίεση νερού στην εδαφική στήλη, δημιουργείται ένα μέτωπο νερού (front) το οποίο εκτοπίζει σταδιακά τη μη υδατική φάση. Καθώς η εισπίεση νερού συνεχίζεται, κάποια στιγμή το μέτωπο θα φτάσει στο πέρας της εδαφικής στήλης (water-breakthrough). Μετά την άφιξη του μετώπου στο πέρας της στήλης, η εκτόπιση της μη υδατικής φάσης συνεχίζεται έως ότου ο βαθμός κορεσμού αυτής, κατά μήκος της στήλης, γίνει ίσος με τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού  $S_{nr}$ . Η κατανομή του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης για τυχούσα χρονική στιγμή, πριν την άφιξη του μετώπου στο πέρας της στήλης απεικονίζεται στο Σχήμα 2-7.



Σχήμα 2-7 Αναλυτική Λύση Buckley-Leverett: Κατανομή βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης, προτού της άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης.

Σύμφωνα με την Σταματάκη (2006), τα ζητούμενα της ανάλυσης Buckley-Leverett είναι ο υπολογισμός του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου, ο χρόνος άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης καθώς επίσης και ο μέσος βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου.

Σε τυχούσα θέση  $x$ , η παροχή της υδατικής και μη υδατικής φάσης αντίστοιχα δίδονται από τον τύπο του Darcy:

$$q_w = -\frac{k_s k_{rw} A}{\mu_w} \left[ \frac{\partial P_w}{\partial x} \right] \quad (1.27)$$

$$q_n = -\frac{k_s k_{rn} A}{\mu_n} \left[ \frac{\partial P_n}{\partial x} \right] \quad (1.28)$$

Οι Buckley και Leverett όρισαν ως κλασματική ροή τον λόγο της παροχής της υδατικής φάσης προς τη συνολική παροχή, ήτοι:

$$f_w = \frac{q_w}{q_w + q_n} \quad (1.29)$$

Ακόμα, από την εξίσωση συνέχειας, σε τυχούσα διατομή κατά μήκος της στήλης ισχύει ότι:

$$q_{inj}^w = q_w + q_n \quad (1.30)$$

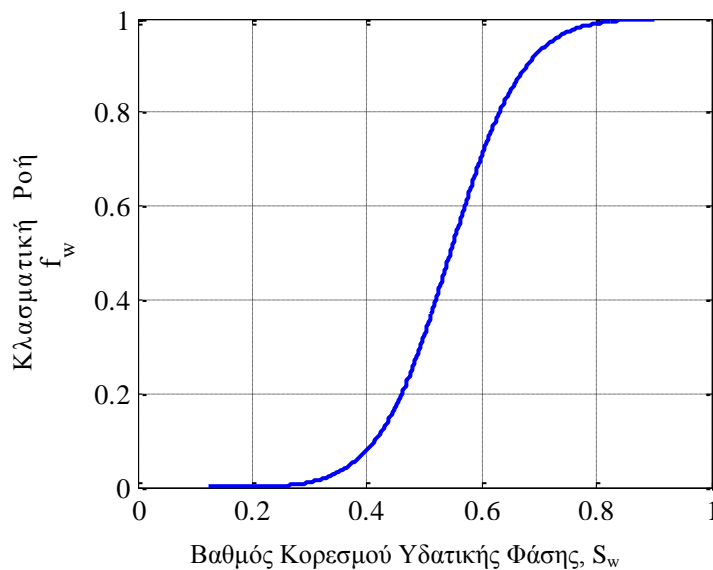
Από τις σχέσεις (1.1), (1.27) έως (1.30) και επιλύοντας ως προς την κλασματική ροή, προκύπτει ότι:

$$f_w = \frac{1 + \frac{k_s k_m A}{q_{inj} \mu_n} \frac{\partial P_c}{\partial x}}{1 + \frac{\mu_w k_m}{\mu_n k_{rw}}} \quad (1.31)$$

Σύμφωνα με τον Pinder (2008) και τον Kleppe (2012), αν ο δεύτερος όρος του αριθμητή της παραπάνω σχέσης είναι πολύ μικρότερος της μονάδας, ή ισοδύναμα, αν αγνοήσουμε την επίδραση των τριχοειδών πιέσεων, τότε η σχέση (1.31) λαμβάνει τη μορφή:

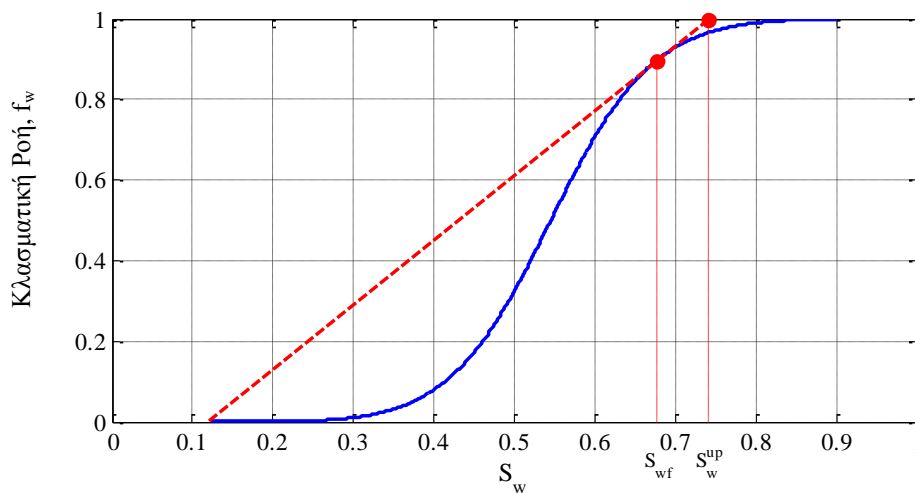
$$f_w = \frac{1}{1 + \frac{\mu_w k_m}{\mu_n k_{rw}}} = \frac{1}{1 + \frac{\mu_w k_m(S_w)}{\mu_n k_{rw}(S_w)}} = f(S_w) \quad (1.32)$$

Στο Σχήμα 2-8 απεικονίζεται η τυπική μορφή της καμπύλης κλασματικής ροής συναρτήσει του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης.



Σχήμα 2-8 Τυπική μορφή καμπύλης κλασματικής ροής – βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης.

Σύμφωνα με την Σταματάκη (2006) και τον Kleppe (2012), ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου υπολογίζεται γραφικά από το διάγραμμα κλασματικής ροής-βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης. Πιο συγκεκριμένα, από το σημείο  $(S_{winitial}, f_w(S_{winitial}))$  του παραπάνω διαγράμματος κατασκευάζεται η εφαπτόμενη στην καμπύλη κλασματικής ροής ευθεία. Ο βαθμός κορεσμού που αντιστοιχεί στο σημείο τομής της εφαπτομένης με την καμπύλη κλασματικής ροής είναι ο βαθμός κορεσμού  $S_{wf}$  της υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου. Επιπρόσθετα, το σημείο τομής της αποτέμνουσας με την ευθεία  $f_w=1$  του παραπάνω διαγράμματος προσδιορίζει τον μέσο βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου. Τα παραπάνω συνοψίζονται στο Σχήμα 2-9.



Σχήμα 2-9 Υπολογισμός βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου ( $S_{wf}$ ) και μέσου βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου ( $S_w^{up}$ )- βλέπε Σχήμα 2-7

Σύμφωνα με τους παραπάνω ερευνητές, στην περίπτωση σταθερού πορώδους  $n$  κατά μήκος της στήλης, η ταχύτητα κίνησης του μετώπου δίδεται από την σχέση:

$$V_f = \frac{q_{inj}^w}{An} \frac{df_w}{dS_w} \Big|_{S_w=S_{wf}} \quad (1.33)$$

Με γνωστή την ταχύτητα κίνησης του μετώπου, δύναται να υπολογισθεί και ο χρόνος άφιξης  $t_{arrival}$  του μετώπου στο πέρας της εδαφικής στήλης:

$$t_{arrival} = \frac{L}{V_f} \quad (1.34)$$



## 2.2 Στοιχεία θερμοδυναμικής

### 2.2.1 Βασικές Έννοιες

#### *Ειδική Θερμοχωρητικότητα*

Η Ειδική Θερμοχωρητικότητα ορίζεται ως η ενέργεια που απαιτείται για την αύξηση της θερμοκρασίας της μονάδας της μάζας μιας ουσίας κατά ένα βαθμό. Διακρίνονται δύο είδη ειδικής θερμοχωρητικότητας, η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο ( $C_v$ ) και η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση ( $C_p$ ). Για τα στερεά και τα ασυμπίεστα ρευστά ισχύει ότι  $C_p=C_v=C$ , ενώ για τα αέρια  $C_p>C_v$ . Οι μονάδες μέτρησης της θερμοχωρητικότητας στο Διεθνές σύστημα είναι το  $J/(kg K)$ .

#### *Ενθαλπία εξάτμισης (λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης)*

Η ενθαλπία εξάτμισης (ή λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης)  $h_{vap}$  είναι η ενέργεια που απαιτείται για την εξάτμιση μίας μονάδας μάζας κορεσμένου υγρού σε δεδομένη πίεση και θερμοκρασία. Η λανθάνουσα θερμότητα ελαττώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας.

#### *Εσωτερική Ενέργεια U*

Εσωτερική Ενέργεια ενός συστήματος ονομάζεται το σύνολο των ενεργειών κάθε μορφής που έχουν τα μόρια (ή άτομα) της ύλης του συστήματος. Η ολική εσωτερική ενέργεια παριστάνεται με το σύμβολο  $U$  και είναι εκτακτική ιδιότητα, δηλαδή εξαρτάται από το μέγεθος του συστήματος. Πιο συγκεκριμένα, η εσωτερική ενέργεια σχετίζεται με την ενέργεια των μορίων (αισθητή θερμότητα), τις δυνάμεις μεταξύ των μορίων (λανθάνουσα θερμότητα), τις δυνάμεις μεταξύ των ατόμων του κάθε μορίου (χημική ενέργεια και τέλος με τις δυνάμεις μεταξύ των στοιχειωδών σωματιδίων στον πυρήνα του κάθε ατόμου (πυρηνική ενέργεια). Το πηλίκο της εσωτερικής ενέργειας με τη μάζα  $m$  του συστήματος αποτελεί την ειδική εσωτερική ενέργεια και συμβολίζεται με  $u$ . Εκφράζει την εσωτερική ενέργεια ανά μονάδα μάζας. Οι μονάδες της εσωτερικής ενέργειας  $U$  και της ειδικής εσωτερικής ενέργειας  $u$  στο Διεθνές σύστημα είναι το  $J$  και το  $J/kg$ , αντίστοιχα.

Η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός ιδανικού αερίου μεταξύ δύο καταστάσεων 1 και 2 δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\Delta u = u_2 - u_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_v(T) dT \quad (1.35)$$

Η παραπάνω σχέση ισχύει για όλες τις διεργασίες ενός ιδανικού αερίου και η χρήση της δεν περιορίζεται στις διεργασίες σταθερού όγκου.

Η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας ενός ασυμπίεστου υγρού ή στερεού, θεωρώντας ότι η θερμοχωρητικότητα του δε μεταβάλλεται σημαντικά με τη μεταβολή της θερμοκρασίας, δίδεται από τη σχέση:

$$\Delta u = u_2 - u_1 = C \cdot \Delta T \quad (1.36)$$

### *Ενθαλπία*

Ως ενθαλπία (H) ορίζεται το άθροισμα της εσωτερικής ενέργειας U και του γινομένου της πίεσης p και του όγκου V. Ισχύει δηλαδή η σχέση

$$H = U + pV \quad (1.37)$$

Η ανάγκη ορισμού της εν λόγω ιδιότητας προέκυψε από την επαναλαμβανόμενη εμφάνιση, ιδιαίτερα στις διεργασίες ροής ρευστών, του αθροίσματος  $U+pV$ . Η μονάδα μέτρησης της ενθαλπίας στο Διεθνές Σύστημα είναι το J. Διαιρώντας τη σχέση (1.37) με τη μάζα m προκύπτει η ειδική ενθαλπία h, η οποία εκφράζει την ενθαλπία ανά μονάδα μάζας.

Η μεταβολή της ειδικής ενθαλπίας ενός ιδανικού αερίου μεταξύ δύο καταστάσεων 1 και 2 δίνεται από την παρακάτω σχέση, η χρήση της οποίας δεν περιορίζεται στις διεργασίες σταθερής πίεσης:

$$\Delta h = h_2 - h_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_p(T) dT$$

Για τα ασυμπίεστα υγρά και στερεά, αν θεωρήσουμε ότι η ειδική θερμοχωρητικότητα δε μεταβάλλεται σημαντικά με τη μεταβολή της θερμοκρασίας, όπως πραγματικά συμβαίνει, τότε η μεταβολή της ειδικής ενθαλπίας ισούται με τη μεταβολή της ειδικής εσωτερικής ενέργειας:

$$\Delta h = h_2 - h_1 = C \cdot \Delta T = \Delta u$$

### 2.2.2 Μεταφορά θερμότητας στο έδαφος

Η μεταφορά θερμότητας μπορεί να γίνει με τρεις διαφορετικούς μηχανισμούς: αγωγή (ή διάχυση), συναγωγή και ακτινοβολία. Ο Farouki (1981) αναφέρει ότι το ποσοστό της θερμότητας που μεταφέρεται σε αμμώδη εδάφη με ακτινοβολία είναι μικρότερο από το 1% της συνολικής μεταφοράς θερμότητας και συνεπώς, η μεταφορά θερμότητας με ακτινοβολία δύναται να εξαιρεθεί από τη παρούσα ανάλυση.

#### Μεταφορά Θερμότητας με Αγωγή

Στην περίπτωση που δεν παρατηρείται μακροσκοπική κίνηση του υγρού στο έδαφος, η μεταφορά θερμότητας πραγματοποιείται με αγωγή, δηλαδή από μόριο σε μόριο (Κουμούτσος & Λυγερού, 1991). Η μαθηματική σχέση που περιγράφει το φαινόμενο μεταφοράς θερμότητας με αγωγή σε ισότροπα υλικά είναι ο νόμος του Fourier, ο οποίος για την ειδική περίπτωση της μονοδιάστατης ροής θερμότητας έχει την ακόλουθη μορφή:

$$F_{conduction}^h = -\lambda_h \frac{dT}{dx} \quad (1.38)$$

όπου:  $F_{conduction}^h$  : ο ανηγμένος ρυθμός ροής θερμότητας (heat flux) [W/m<sup>2</sup>]

$\lambda_h$  : η θερμική αγωγιμότητα του εδάφους [W/(m·K)]

$dT/dx$  : η βαθμίδα θερμοκρασίας [K/m]

Το αρνητικό πρόσημο στο δεύτερο μέλος της εξίσωσης υποδηλώνει ότι η θερμότητα μεταφέρεται από την περιοχή υψηλών θερμοκρασιών στην περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών.

### Μεταφορά Θερμότητας με Συναγωγή

Η μεταφορά θερμότητας με συναγωγή οφείλεται στη μακροσκοπική κίνηση των υγρών. Για την περίπτωση μονοφασικής ροής σε πορώδες μέσο, ο Clauser (2011) αλλά και οι Nielsen και Began (2013) ορίζουν την ανηγμένη ροή θερμότητας λόγω μεταφοράς με συναγωγή ως:

$$F_{convection}^h = (\rho C_p)_f \cdot q_D \cdot T_f \quad (1.39)$$

όπου:

$\rho$ : η πυκνότητα του ρέοντος υγρού [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]

$C_p$ : η ειδική θερμοχωρητικότητα του υγρού [ $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ ]

$q_D$ : η ταχύτητα Darcy [ $\text{m}/\text{s}$ ]

$T_f$ : η θερμοκρασία του υγρού [ $\text{K}$ ]

Για την περίπτωση πολυφασικής ροής σε πορώδες μέσο, ο Falta (1995) ορίζει την ανηγμένη ροή θερμότητας ως:

$$F_{convection}^h = \sum_{\beta=a,w,g} F_{\beta} h_{\beta} \quad (1.40)$$

όπου:  $F_{\beta}$ : ο ανηγμένος ρυθμός ροής μάζας της φάσης  $\beta$  [ $\text{kg}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$ ]

$h_{\beta}$ : η ειδική ενθαλπία της φάσης  $\beta$  [ $\text{J}/\text{kg}$ ]

Σύμφωνα με τον Clauser (2011), η ποσοτική σύγκριση της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή και συναγωγή μπορεί να γίνει υπολογίζοντας τους αδιάστατους αριθμούς Peclet (Pe) και Nusselt (Nu). Οι αδιάστατοι αυτοί αριθμοί ορίζονται ως:

$$Pe = \frac{F_{convection}^h}{F_{conduction}^h} \quad (1.41)$$

$$Nu = \frac{F_{convection}^h + F_{conduction}^h}{F_{conduction}^h} \quad (1.42)$$

Για  $Pe > 1$  και αντίστοιχα για  $Nu > 2$  η μεταφορά θερμότητας με συναγωγή υπερισχύει της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή.

### 2.2.3 Θερμικά χαρακτηριστικά εδαφών

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, οι θερμικές ιδιότητες των εδαφών που εξετάζονται είναι αφενός η ειδική θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων του εδάφους και αφετέρου η θερμοαγωγιμότητα του πορώδους μέσου.

#### *Ειδική Θερμοχωρητικότητα*

Η ειδική θερμοχωρητικότητα των πετρωμάτων εξαρτάται από την ορυκτολογική τους σύνθεση (Kukkonen & Lindberg, 1998). Σύμφωνα με τον Clauser (2011), οι Cermak και Rybach (1982) συγκέντρωσαν από τη διεθνή βιβλιογραφία τιμές μετρήσεων που αφορούν διάφορα είδη πετρωμάτων και κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η ειδική θερμοχωρητικότητα  $C_R$  των πετρωμάτων κυμαίνεται από 700 έως 1100 J kg<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup> ενώ ως μέση τιμή της ειδικής θερμοχωρητικότητας αδιαπέρατου βράχου μπορεί να ληφθεί η τιμή των 850 J kg<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>. Στην παρούσα διπλωματική εργασία, θεωρούμε ότι η ειδική θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων του εδάφους ισούται με την ειδική θερμοχωρητικότητα του μητρικού πετρώματος και συνεπώς οι επιλεγείσες τιμές θερμικής αγωγιμότητας κυμαίνονται στο προαναφερθέν εύρος.

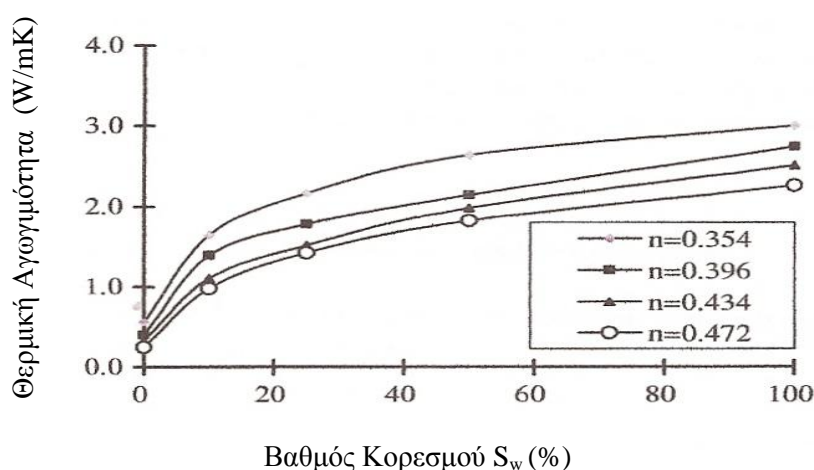
Επιπρόσθετα, οι Kukkonen και Lindberg (1998) αναφέρουν ότι, η ειδική θερμοχωρητικότητα των εδαφών αυξάνεται με αύξηση της θερμοκρασίας. Πιο συγκεκριμένα, η ειδική θερμοχωρητικότητα των εδαφών αυξάνεται κατά περίπου 10 έως 15% για αύξηση της θερμοκρασίας των πετρωμάτων από 25 σε 100°C. Η αύξηση αυτή δεν θεωρείται σημαντική και για τον λόγο αυτό δε λαμβάνεται υπόψη.

#### *Θερμική Αγωγιμότητα*

Η θερμική αγωγιμότητα των εδαφών εξαρτάται, σύμφωνα με τον Chen (2008), από τον τύπο του εδάφους, το μέγεθος των κόκκων, το πορώδες και τον βαθμό κορεσμού. Από τους παραπάνω παράγοντες, την πιο σημαντική επίδραση στη θερμική αγωγιμότητα του εδάφους έχουν το πορώδες και ο βαθμός κορεσμού. Σύμφωνα με τον Farouki (1981), στην περίπτωση κορεσμένου εδάφους, αύξηση του πορώδους ισοδυναμεί με μείωση της θερμικής αγωγιμότητας. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στη σημαντικά μεγαλύτερη τιμή της θερμικής αγωγιμότητας των στερεών κόκκων του εδάφους σε σύγκριση με αυτή του νερού οι οποίες σύμφωνα με τον ίδιο ερευνητή είναι ίσες με περίπου 2.90 και 0.60 W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>

αντίστοιχα. Ομοίως, στην περίπτωση ξηρού εδάφους, εδάφη με μεγαλύτερες τιμές πορώδους χαρακτηρίζονται από μικρότερες τιμές θερμικής αγωγιμότητας, πράγμα που αποδίδεται στην μικρή θερμική αγωγιμότητα του αέρα.

Για την περίπτωση των άμμων, ο Chen (2008) πραγματοποίησε μετρήσεις θερμικής αγωγιμότητας για διάφορες τιμές πορώδους και βαθμού κορεσμού. Πιο συγκεκριμένα, για την περίπτωση ξηρής άμμου ( $S_w=0$ ) ο Chen μέτρησε τιμές θερμικής αγωγιμότητας από 0.20 έως 0.50  $W m^{-1} K^{-1}$  για τιμές πορώδους από 0.35 μέχρι 0.55. Αντίστοιχα, για την περίπτωση κορεσμένης άμμου ( $S_w=1$ ) μετρήθηκαν τιμές από 2 έως 2.8  $W m^{-1} K^{-1}$  για ίδιο εύρος τιμών πορώδους. Στο Σχήμα 2-10 απεικονίζεται η μεταβολή της θερμικής αγωγιμότητας συναρτήσει του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης για διάφορες τιμές πορώδους.



Σχήμα 2-10 Θερμική αγωγιμότητα άμμου συναρτήσει του βαθμού κορεσμού για διάφορες τιμές πορώδους,  $n$ . Προσαρμογή από Chen (2008)

Επιπρόσθετα, ο Gudbjerg (2004) αναφέρει ότι για την περίπτωση των άμμων, η θερμική αγωγιμότητα υπό ξηρές ( $\lambda_{dry}$ ) και κορεσμένες συνθήκες ( $\lambda_{wet}$ ) μπορούν να υπολογισθούν συναρτήσει του πορώδους  $n$  από τον εμπειρικό τύπο του Sundberg:

$$\lambda_{dry} = 0.034n^{-2.1} \quad (1.43)$$

$$\lambda_{wet} = 0.57^n \cdot 7.7^{1-n} \quad (1.44)$$

Για τυπικές τιμές πορώδους, οι τιμές που προκύπτουν από τον εμπειρικό τύπο του Sundberg βρίσκονται σε συμφωνία με τις μετρημένες από τον Chen τιμές θερμικής αγωγιμότητας.

Για τις μερικώς κορεσμένες άμμους, η θερμική αγωγιμότητα υπολογίζεται σύμφωνα με τον τύπο που προτάθηκε από τον Falta (1992):

$$\lambda(S_w) = \lambda_{dry} + \sqrt{S_w} (\lambda_{wet} - \lambda_{dry}) \quad (1.45)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι η θερμική αγωγιμότητα της μη υδατικής φάσης δεν λαμβάνεται συνήθως υπόψη αφενός λόγω του μικρού βαθμού κορεσμού αυτής και αφετέρου λόγω της μικρής θερμικής αγωγιμότητας των ρύπων η οποία, για την περίπτωση των πτητικών ρύπων, είναι περίπου ίση με το 1/5 της θερμικής αγωγιμότητας του νερού (Falta et al., 1995). Για τον ίδιο λόγο, αγνοείται και η συνεισφορά της θερμικής αγωγιμότητας του αέρα, ο οποία είναι τάξη μεγέθους μικρότερη από αυτήν του νερού.

#### 2.2.4 Ποιότητα και χαρακτηριστικά υδρατμού

Κατά τη διάρκεια της εξάτμισης του νερού, και πριν την ολοκλήρωση της, μια ποσότητα της ουσίας είναι στην υγρή φάση και η υπόλοιπη στην αέρια. Το νερό δηλαδή συνιστά μίγμα κορεσμένου υγρού και κορεσμένου ατμού. Ως ποιότητα  $\chi$  του μίγματος, ορίζεται ο λόγος της μάζας του ατμού προς την ολική μάζα του μίγματος, δηλαδή:

$$\chi = \frac{m_{steam}}{m_{total}} \quad (1.46)$$

Η ποιότητα του ατμού όπως ορίστηκε παραπάνω, έχει νόημα για κορεσμένα μίγματα, για μίγματα δηλαδή στα οποία η υγρή και αέρια φάση βρίσκονται σε ισορροπία και έχουν θερμοκρασία ίση με τη θερμοκρασία κορεσμού (σημείο βρασμού) για δεδομένη πίεση της αέριας φάσης (Χαλικιά, 2004). Στην περίπτωση όπου  $\chi < 1$ , το μίγμα χαρακτηρίζεται ως μίγμα κορεσμένου υγρού-ατμού ενώ για  $\chi = 1$  χαρακτηρίζεται ως κορεσμένος ατμός. Αξίζει να ακόμα να σημειωθεί, ότι στην περίπτωση όπου για δεδομένη πίεση, η θερμοκρασία του ατμού είναι μεγαλύτερη από την θερμοκρασία κορεσμού, τότε ο ατμός χαρακτηρίζεται ως υπέρθερμος. Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα μας απασχολήσει η περίπτωση του κορεσμένου ατμού καθώς επίσης και του μίγματος κορεσμένου υγρού-ατμού.

Οι ιδιότητες του νερού και του ατμού, που αντιστοιχούν σε διάφορες τιμές πίεσης/θερμοκρασίας, ευρίσκονται από πίνακες οι οποίοι έχουν καθιερωθεί από τα Διεθνή Συνέδρια «Οι Ιδιότητες του Υδρατμού» καθώς επίσης και από τη «Διεθνή Επιτροπή Διατύπωσης (IFC)». Στον Πίνακα 2-3 παρουσιάζονται οι ιδιότητες κορεσμένου νερού/κορεσμένου ατμού για πίεση ίση με 1 και 1.5 atm αντίστοιχα.

**Πίνακας 2-3 Ιδιότητες κορεσμένου νερού/κορεσμένου ατμού για πίεση αέριας φάσης ίσης με 1 και 1.5 atm. Πηγή: Schmidt (1982)**

Ιδιότητα	Μονάδες	Πίεση 1.0atm	Πίεση 1.5atm
Θερμοκρασία Κορεσμού	°C	99.97	110.4
Πυκνότητα Νερού	kg/m <sup>3</sup>	958.37	949.87
Πυκνότητα Ατμού	kg/m <sup>3</sup>	0.5976	0.8640
Ειδική Ενθαλπία Νερού <sup>1</sup>	kJ/kg	419	467.31
Ειδική Ενθαλπία Ατμού <sup>1</sup>	kJ/kg	2675.5	2693.20
Ειδική Ενθαλπία Εξάτμισης	kJ/kg	2256.5	2225.89
Δυναμική Συνεκτικότητα (Ιξώδες) Νερού	Pa·s	2.8180 10 <sup>-4</sup>	2.5127 10 <sup>-4</sup>
Δυναμική Συνεκτικότητα (Ιξώδες) Ατμού	Pa·s	1.2268 10 <sup>-5</sup>	1.2660 10 <sup>-5</sup>

<sup>1</sup> T<sub>ref</sub>=0°C

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, το φυσικό μέγεθος που θα μας απασχολήσει για την περίπτωση μίγματος κορεσμένου υγρού-ατμού είναι η ειδική ενθαλπία του μίγματος. Η ειδική ενθαλπία  $h$  μίγματος κορεσμένου υγρού-ατμού ποιότητας  $\chi$ , υπολογίζεται ως:

$$h = \chi h_g + (1 - \chi) h_w \quad (1.47)$$

όπου:  $h_g$ : η ειδική ενθαλπία της αέριας φάσης  
 $h_w$ : η ειδική ενθαλπία της υγρής φάσης  
 $\chi$ : η ποιότητα του μίγματος



## 2.3 Προσομοίωση Πολυφασική Ροής

### 2.3.1 Διαθέσιμα αριθμητικά μοντέλα προσομοίωσης

Κατά τη δεκαετία του 1980, αναπτύχθηκαν αρκετά αριθμητικά μοντέλα για τη προσομοίωση ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής. Η πλειονότητα των μοντέλων αυτών δεν λαμβάνει υπόψη τη μεταφορά μάζας μεταξύ των φάσεων ή ακόμα αγνοεί την ύπαρξη της αέριας φάσης. Στην περίπτωση των θερμικών μεθόδων αποκατάστασης, η μεταφορά μάζας μεταξύ των φάσεων είναι σημαντική, ενώ για τη προσομοίωση των μεθόδων αυτών θα πρέπει να ληφθεί υπόψη και η μεταφορά θερμότητας.

Η μέθοδος εισπίεσης ατμού πρωτοεφαρμόστηκε στη βιομηχανία παραγωγής πετρελαίου το 1936 (Class et al., 2002). Από τη δεκαετία του 1970 αναπτύχθηκαν με επιτυχία μη ισοθερμικά μοντέλα τριφασικής ροής για την προσομοίωση της τριτογενούς παραγωγής πετρελαίου<sup>1</sup>. Ωστόσο, τα μοντέλα αυτά δεν δύναται να εφαρμοσθούν αυτούσια για τη προσομοίωση θερμικών μεθόδων αποκατάστασης υπεδάφους. Ο λόγος είναι ότι οι φρεάτιοι υδροφορείς παρουσιάζουν θεμελιώδεις διαφορές με τους ταμιευτήρες πετρελαίου, καθώς οι δεύτεροι είναι περιορισμένοι και χαρακτηρίζονται από σημαντικά μεγαλύτερες πιέσεις. Επιπρόσθετα, οι κώδικες που αναπτύχθηκαν για την προσομοίωση τριτογενούς παραγωγής, υποθέτουν ότι η μη υδατική φάση (πετρέλαιο), καθώς περιέχει μη πτητικά συστατικά, δεν απομακρύνεται εξολοκλήρου από το πορώδες μέσο, κάτι που δεν παρατηρείται κατά την εφαρμογή θερμικών μεθόδων για την απομάκρυνση πτητικών ρύπων από φρεάτιους υδροφορείς (Adenakan & Patzek, 1993).

Προς το τέλος της δεκαετίας του 1980, οπότε και πρωτοεμφανίστηκαν οι τεχνολογίες θερμικής αποκατάστασης υπεδάφους, αναπτύχθηκαν κώδικες για την προσομοίωση μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής σε φρεάτιους υδροφορείς. Αξίζει να σημειωθεί ότι η εισαγωγή της θερμοκρασίας ως μεταβλητής, αυξάνει σημαντικά τη μη γραμμικότητα του προβλήματος, καθώς πολλές από τις ιδιότητες των ρευστών (πυκνότητα, δυναμική συνεκτικότητα, τάση ατμών κτλ) είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Στον Πίνακα 2-4 παρουσιάζονται οι πλέον γνωστοί κώδικες/λογισμικά για την αριθμητική προσομοίωση μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής, καθώς επίσης και μερικά από τα βασικά τους χαρακτηριστικά.

---

<sup>1</sup> Η τριτογενής παραγωγή περιλαμβάνει την εφαρμογή μεθόδων για την ανάκτηση του υπολειμματικού (residual) πετρελαίου που έχει απομείνει στον ταμιευτήρα μετά την εισπίεση νερού (δευτερογενής παραγωγή). Οι μέθοδοι που εφαρμόζονται στο στάδιο της τριτογενούς παραγωγής είναι είτε θερμικές (εισπίεση ατμού ή θερμού νερού) είτε χημικές (εισπίεση πολυμερών, τασιενεργών) (Σταματάκη, 2006).

**Πίνακας 2-4 Υπάρχοντα λογισμικά για τη προσομοίωση μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής και βασικά χαρακτηριστικά/δυνατότητες αυτών. Πηγή: (USACE, 2009)**

Λογισμικό	Προσομοίωση Εισπίεσης Ατμού	Ροή NAPL	Μεταφορά μάζας μεταξύ των φάσεων	Μεταφορά διαλυμένης ουσίας	Μεταφορά ρύπου στην αέρια φάση	Χημικές Αντιδράσεις	Γραφικό Περιβάλλον
HYDROTHERM	✓						
M2NOTS	✓	✓	✓	✓	✓		
NUFT	✓	✓	✓	✓	✓	1	
PORFLOW	✓	✓		✓		✓	✓
STAR	✓		✓	✓	✓	1	2
STARS	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
STOMP	✓	✓	✓	✓	✓	1	
TETRAD	✓	✓	✓	✓	✓	✓	2
TOUGH2	✓	✓	✓	✓	✓	1	2

1: Φυσική Εξασθένηση

2: Εμπορικά διαθέσιμο

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό T2VOC, το οποίο αποτελεί επέκταση του λογισμικού TOUGH2. Το εν λόγω λογισμικό χρησιμοποιήθηκε αφενός γιατί έχει επαληθευτεί από πειραματικές διατάξεις στη βιβλιογραφία, και αφετέρου γιατί δίνει τη δυνατότητα προσομοίωσης τριφασικής ροής σε ετερογενή εδάφη. Ακόμα, σύμφωνα με τον Heron (2010), το T2VOC συνίσταται για την προσομοίωση εισπίεσης ατμού, προτού της εφαρμογής σε συνθήκες πεδίου.

### 2.3.2 Το λογισμικό πολυφασικής ροής T2VOC

Το T2VOC αποτελεί ένα λογισμικό για την προσομοίωση μη ισοθερμικών προβλημάτων πολυφασικής ροής σε ετερογενή πορώδη μέσα. Το εν λόγω λογισμικό αναπτύχθηκε στις αρχές της δεκαετίας του 1990, βασιζόμενο στο τότε υπάρχον λογισμικό TOUGH, το οποίο τροποποιήθηκε προκειμένου να ληφθεί υπόψη η μεταφορά θερμότητας αλλά και η επίδραση της θερμοκρασίας στα χαρακτηριστικά των ρύπων (Falta et al., 1995).

Πριν γίνει αναφορά στις εξισώσεις που επιλύονται, κρίνεται σκόπιμο να αναφερθούν μερικές από τις παραδοχές του εν λόγω λογισμικού. Αρχικά πρέπει να αναφέρουμε ότι το συγκεκριμένο λογισμικό θεωρεί ότι οι φάσεις β (β: υδατική, μη υδατική, αέρια) βρίσκονται σε χημική και θερμική ισορροπία και ότι δεν λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις εκτός

από α) τη μεταφορά μάζας μεταξύ των φάσεων β) την εισρόφηση στη στερεά φάση και γ) τη φυσική εξασθένηση του οργανικού ρύπου. Ακόμα, το T2VOC αγνοεί το φαινόμενο της υδροδυναμικής διασποράς τόσο στην υδατική όσο και στη μη υδατική φάση καθώς επίσης και τη διαλυτότητα του νερού στη μη υδατική φάση. Αγνοείται ακόμα η επίδραση της θερμοκρασίας στα χαρακτηριστικά της τριχοειδούς πίεσης, ενώ δεν γίνονται υπολογισμοί σχετικά με τις τάσεις του εδάφους.

Το λογισμικό T2VOC επιλύει, για κάθε πεπερασμένο όγκο, την ολοκληρωτική μορφή της εξίσωσης διατήρησης μάζας για κάθε ένα από τα συστατικά (components) κ που συμμετέχουν στη ροή (κ: νερό (w), αέρας (a), ρύπος (c)) καθώς επίσης και την εξίσωση διατήρησης ενέργειας (κ:θερμότητα (h)). Η ολοκληρωτική μορφή διατήρησης μάζας, για κάθε πεπερασμένο στοιχείο όγκου  $V_n$ , λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_n} M^{\kappa} dV_n = \int_{\Gamma_n} F^{\kappa} n d\Gamma_n + \int_{V_n} q^{\kappa} dV_n \quad , \kappa=w, a, c, h \quad (1.48)$$

Στην παραπάνω σχέση, το  $M^{\kappa}$  εκφράζει τη μάζα του συστατικού κ (κ: w, c, a) ανά μονάδα όγκου του πορώδους μέσου, το  $F^{\kappa}$  εκφράζει τον ανηγμένο ανά μονάδα επιφάνειας ρυθμό ροής μάζας του συστατικού κ εντός του πεπερασμένου όγκου επιφάνειας  $\Gamma^n$ , n είναι το κάθετο στην επιφάνεια  $\Gamma_n$  μοναδιαίο διάνυσμα με φορά προς το εσωτερικό του πεπερασμένου όγκου ενώ με  $q^{\kappa}$  συμβολίζεται ο ρυθμός παραγωγής η κατανάλωσης μάζας του συστατικού κ ανά μονάδα όγκου. Κατ' αντιστοιχία ορίζονται τα ίδια μεγέθη για την περίπτωση της θερμότητας.

Ο όρος  $M^{\kappa}$  υπολογίζεται ως:

$$M^{\kappa} = n \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} \quad , \kappa=w, a, c \quad (1.49)$$

Όπου  $\rho_{\beta}$  η πυκνότητα της φάσης β και  $X_{\beta}^{\kappa}$  η επί τοις εκατό κατά βάρος συγκέντρωση του συστατικού κ στη φάση β. Στη γενική περίπτωση, όπου κ=ρύπος (c), στην παραπάνω σχέση θα πρέπει να προστεθεί και ο όρος που αφορά την εισρόφηση στη στερεά φάση. Για τη θερμότητα, έχουμε:

$$M^h = (1-n) \rho_s C_R T + n \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} u_{\beta} \quad (1.50)$$

Στη σχέση (1.50) η ειδική εσωτερική ενέργεια  $u_\beta$  για την περίπτωση της υδατικής φάσης ( $\beta=w$ ) είναι ανεξάρτητη της συγκέντρωσης του ρύπου, ενώ για την αέρια φάση ( $\beta=a$ ) η ειδική εσωτερική ενέργεια εξαρτάται από την συγκέντρωση του ρύπου σε αυτήν.

Ο ανηγμένος ανά μονάδα επιφανείας ρυθμός ροής μάζας  $F^k$ , υπολογίζεται από τη σχέση του Darcy, ενώ για την περίπτωση της αέριας φάσης προστίθεται σε αυτόν και ο όρος που αφορά την υδροδυναμική διασπορά. Για την περίπτωση της θερμότητας, ο ανηγμένος ανά μονάδας επιφανείας ρυθμός ροής θερμότητας δίδεται από τη σχέση:

$$F^h = F_{convection}^h + F_{conduction}^h, \quad (1.51)$$

Όπου οι όροι του δεξιού μέλους της εξίσωσης (1.51) υπολογίζονται από τις σχέσεις (1.38) και (1.39).

Το εν λόγω λογισμικό θεωρεί ακόμα ότι η υδατική φάση δεν εξαφανίζεται ποτέ από τον κάθε διαφορικό όγκο, και αυτό επιτυγχάνεται θεωρώντας ότι ο βαθμός κορεσμού αυτής δύναται να λάβει πολύ μικρές, αλλά όχι μηδενικές τιμές. Με τον τρόπο αυτό, οι δυνατοί συνδυασμοί των τριών φάσεων μειώνονται από επτά σε τέσσερις. Η θερμοδυναμική κατάσταση του κάθε διαφορικού όγκου καθορίζεται από τον προσδιορισμό της τιμής τεσσάρων, ανεξάρτητων μεταξύ τους, μεταβλητών, η επιλογή των οποίων γίνεται σύμφωνα με τις υπάρχουσες στον διαφορικό όγκος φάσεις. Οι μεταβλητές αυτές ονομάζονται πρωταρχικές. Οι επιπρόσθετες παράμετροι, όπως για παράδειγμα η δυναμική συνεκτικότητα, η ειδική ενθαλπία, η τριχοειδής πίεσης, η θερμική αγωγιμότητα κτλ, είναι συνάρτηση των τεσσάρων ανεξάρτητων πρωταρχικών μεταβλητών, και οι τιμές των παραμέτρων αυτών υπολογίζονται σε κάθε επανάληψη (iteration).

Οι τρεις εξισώσεις διατήρησης μάζας καθώς επίσης και η εξίσωση ενέργειας επιλύονται με τη μέθοδο Newton-Raphson, και συγκεκριμένα, σύμφωνα με την παραλλαγή που πρότειναν οι Narasimhan και Witherspoon. Για κάθε διαφορικό όγκο δηλαδή, επιλύονται 4 εξισώσεις και προσδιορίζεται η τιμή των τεσσάρων ανεξάρτητων πρωταρχικών μεταβλητών μεταξύ των οποίων η πίεση της αέριας φάσης και η θερμοκρασία.

## 2.4 Τα χαρακτηριστικά του TCE – η επίδραση της θερμοκρασίας

### 2.4.1 Φυσικο-χημικές ιδιότητες

Το τριχλωροαιθυλένιο (TCE) αποτελεί μια πτητική οργανική ένωση (Volatile Organic Compound - VOC) η οποία κατατάσσεται στους χλωριωμένους υδρογονάνθρακες. Το TCE χρησιμοποιείται ευρέως στη βιομηχανία ως διαλύτης - απολιπαντικό αλλά και ως ενδιάμεσο χημικό προϊόν, ενώ η παραγωγή του στις Ηνωμένες Πολιτείες για το έτος 1991 εκτιμάται σε 144 χιλιάδες τόνους (Sale et al., 2008). Ως προς την ικανότητα καρκινογένεσης, το τριχλωροαιθυλένιο κατατάσσεται στη κατηγορία A2 (πιθανότατα καρκινογόνο) και αποτελεί τον πιο συχνά ανιχνευόμενο οργανικό ρύπο στο υπόγειο νερό στις Η.Π.Α. (Καββαδάς & Πανταζίδου, 2007). Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται οι φυσικο-χημικές ιδιότητες του TCE, οι οποίες χρήζουν αναφοράς στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

**Πίνακας 2-5 Φυσικο-Χημικές Ιδιότητες TCE για Θερμοκρασία 25°C**

Ιδιότητα	Τιμή	Αναφορά
Χημικός Τύπος	$C_2HCl_3$	
Μοριακό Βάρος (gr/mol)	131.4	(Russell & Matthews, 1992)
Πυκνότητα (kg/L)	1.458	(Davis, 1997)
Διαλυτότητα (mg/l)	1100	(Davis, 1997)
Τάση Ατμών (mm Hg)	74	(EPA, 2012)
Σταθερά Henry	0.38	(Davis, 1997)
Σημείο Βρασμού (°C)	87.3 @ 1atm	(Russell & Matthews, 1992)
Δυναμική Συνεκτικότητα (cP)	0.545	(Davis, 1997)
Λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης (kJ/mol)	34.54	(Davis, 1997)
Επιφανειακή Τάση TCE - Νερό (mN/m)	38	(Dane et al., 1994)
Επιφανειακή Τάση TCE - Αέρας (mN/m)	30	(Dane et al., 1994)

### 2.4.2 Η επίδραση της θερμοκρασίας

Η αύξηση της θερμοκρασίας επιδρά σημαντικά στις ιδιότητες των χλωριωμένων υδρογονανθράκων. Πιο συγκεκριμένα, οι ιδιότητες που μεταβάλλονται σημαντικά είναι η συνεκτικότητα, η διαλυτότητα, η πυκνότητα, καθώς επίσης και η τάση ατμών.

Η αύξηση της θερμοκρασίας επιφέρει σημαντική μείωση στη συνεκτικότητα της μη-υδατικής φάσης του ρύπου. Η συνεκτικότητα των υγρών εν γένει μειώνεται με την αύξηση

της θερμοκρασίας ενώ η συνεκτικότητα των αερίων αυξάνεται (Νουτσόπουλος & Χριστοδούλου, 1996). Η Davis (1997) αναφέρει ότι για την περίπτωση των χλωριωμένων υδρογονανθράκων, η συνεκτικότητα της μη-υδατικής φάσης μειώνεται κατά περίπου 1% με μοναδιαία αύξηση της θερμοκρασίας μέχρι το σημείο βρασμού του ρύπου. Πιο συγκεκριμένα, σε ότι αφορά το TCE, η συνεκτικότητά του σχεδόν υποδιπλασιάζεται για αύξηση της θερμοκρασίας από 25 σε 100°C (Battelle, 2004). Αντίθετα, σύμφωνα με την Davis, η συνεκτικότητα της αέριας φάσης των χλωριωμένων υδρογονανθράκων αυξάνεται κατά περίπου 30% για αύξηση της θερμοκρασίας κατά 100°C. Ωστόσο, αυτό δεν αποτελεί πρόβλημα καθώς η συνεκτικότητα των αερίων είναι δύο περίπου τάξεις μεγέθους μικρότερη από τη συνεκτικότητα των υγρών (Heron, 2006). Κατά συνέπεια, η αύξηση της θερμοκρασίας, αυξάνει τη κινητικότητα της μη υδατικής φάσης του ρύπου στο υπέδαφος ενώ η χαμηλή συνεκτικότητα των αερίων διευκολύνει την απομάκρυνση του ρύπου μέσω της αέριας φάσης.

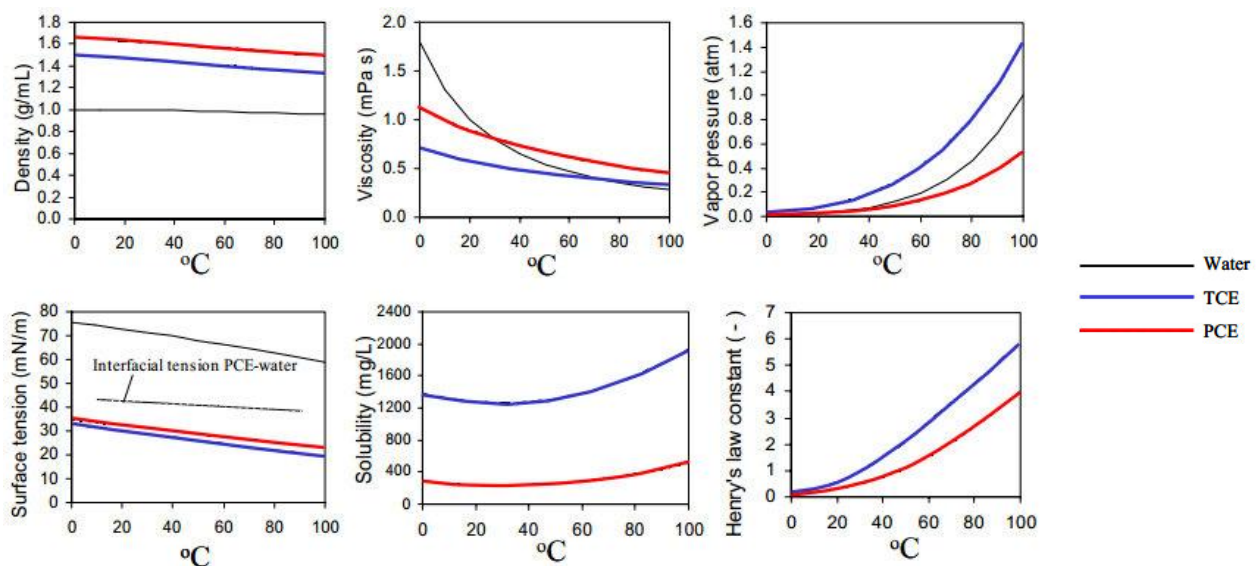
Η διαλυτότητα των χλωριωμένων υδρογονανθράκων αυξάνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας. Οι Knauss et al. (2000) μελέτησαν τη μεταβολή της διαλυτότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για το TCE και μέτρησαν τιμές διαλυτότητας ίσες με περίπου 2,800mg/L σε θερμοκρασία 72°C. Ο Gudbjerg (2003) αναφέρει ότι σύμφωνα με τον Heron, η διαλυτότητα του TCE αυξάνεται κατά 15% με αύξηση της θερμοκρασίας από τους 7 στους 71°C. Σε κάθε περίπτωση, η διαλυτότητα αυξάνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας, ωστόσο η αύξηση αυτή δεν είναι επαρκής ώστε να επιτυγχάνεται ικανοποιητική ανάκτηση της μάζας του ρύπου σε διαλυμένη μορφή.

Η τάση ατμών αυξάνεται σημαντικά με την αύξηση της θερμοκρασίας. Η Davis (1997) αναφέρει ότι η τάση ατμών των οργανικών ρύπων με σημείο βρασμού μικρότερο των 100°C πενταπλασιάζεται έως και επταπλασιάζεται με αύξηση της θερμοκρασίας από τους 10 στους 50°C. Η δραματική αυτή αύξηση της τάσης ατμών του ρύπου με την αύξηση της θερμοκρασίας είναι ιδιαίτερα σημαντική καθώς στην περίπτωση μίγματος νερού και NAPL, η συνολική πίεση του αερίου, που ισούται με το άθροισμα των μερικών πιέσεων του νερού και του NAPL, θα γίνει ίση με την εξωτερική πίεση (surrounding pressure) σε θερμοκρασία μικρότερη από το σημείο βρασμού καθενός εκ των συστατικών που απαρτίζουν το μίγμα (Atkins & Jones, 2009). Με άλλα λόγια το από κοινού σημείο βρασμού του μίγματος

(ευτηκτικό σημείο του αζεοτροπικού μίγματος) θα είναι μικρότερο από τα σημεία βρασμού καθενός εκ των συστατικών που απαρτίζουν το μίγμα. Για παράδειγμα, το σημείο βρασμού του TCE σε πίεση ίση με 1atm ισούται με 87.3°C ενώ το ευτηκτικό σημείο του μίγματος νερού και μη-υδατικής φάσης TCE ισούται με 73.1°C. Αξίζει να σημειωθεί ότι η δραματική αύξηση της τάσης ατμών των οργανικών ρύπων, σε συνδυασμό με την περιορισμένη αύξηση της διαλυτότητάς τους κατά την αύξηση της θερμοκρασίας έχει ως αποτέλεσμα τη σημαντική αύξηση του συντελεστή Henry. Ο Heron et al. (1998) πραγματοποίησε μετρήσεις του συντελεστή Henry για το τριχλωροαιθέριο και παρατήρησε ότι ο εν λόγω συντελεστής αυξάνεται κατά μία τάξη μεγέθους καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται από τους 20 στους 90°C.

Η πυκνότητα τόσο της μη-υδατικής φάσης του ρύπου όσο και του νερού μειώνονται ελαφρώς με αύξηση της θερμοκρασίας. Η Davis (1997) αναφέρει ότι στην περίπτωση των οργανικών ρύπων, ο όγκος της μη υδατικής φάσης του ρύπου αυξάνεται κατά 0.1% ανά μοναδιαία αύξηση της θερμοκρασίας. Η μεταβολή της πυκνότητας της μη-υδατικής φάσης δεν επηρεάζει σημαντικά τα χαρακτηριστικά της ροής και συνεπώς η επίδραση της θερμοκρασίας στην πυκνότητα μπορεί να θεωρηθεί δευτερευούσης σημασίας, συγκρινόμενη λόγου χάρη με την επίδραση που έχει η θερμοκρασία στην τάση ατμών.

Στο Σχήμα 2-11 παρουσιάζονται οι φυσικο-χημικές ιδιότητες του TCE, καθώς επίσης και του PCE, συναρτήσει της θερμοκρασίας.



Σχήμα 2-11 Φυσικο-χημικές ιδιότητες TCE & PCE συναρτήσει της θερμοκρασίας.  
Πηγή: Heron (2006)

## 2.5 Επισκόπηση περιστατικών εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού

Προκειμένου να διερευνηθεί η επίδραση των εδαφικών χαρακτηριστικών στην επίδοση της μεθόδου απορρύπανσης υδροφορέων με εισπίεση ατμού, αναζητήσαμε περιστατικά στα οποία έχει εφαρμοσθεί η εν λόγω μέθοδος, είτε αυτόνομα είτε ακόμα και σε συνδυασμό με άλλες τεχνολογίες αποκατάστασης.

Προτού παρουσιαστούν οι πηγές αναζήτησης αλλά και τα επιμέρους χαρακτηριστικά των περιπτώσεων εφαρμογής της μεθόδου, κρίνεται σκόπιμο να αναφερθούν τα συμπεράσματα που προέκυψαν από μελέτη που πραγματοποιήθηκε προς όφελος του Οργανισμού Προστασίας Περιβάλλοντος των Η.Π.Α σχετικά με τις θερμικές μεθόδους αποκατάστασης. Στην εν λόγω μελέτη με τίτλο «Critical Evaluation of State-of-the-Art In Situ Thermal Treatment Technologies for DNAPL Source Zone Treatment» (Kingston et al., 2010), πραγματοποιήθηκε συλλογή δεδομένων από σύνολο 182 περιπτώσεων εφαρμογής θερμικών τεχνολογιών αποκατάστασης για την περίοδο 1988-2007. Όπως επισημαίνεται στη μελέτη αυτή, η πλειοψηφία των περιστατικών χαρακτηρίζεται από έλλειψη καταγεγραμμένων δεδομένων σε ότι αφορά την περιγραφή των υδρογεωλογικών χαρακτηριστικών ή/και τον βαθμό απομάκρυνσης της μάζας των ρύπων. Από τα δεδομένα που συλλέχθηκαν, προέκυψε ότι στο 76% των περιστατικών οι κύριοι ρύποι ενδιαφέροντος ήταν χλωριωμένοι υδρογονάνθρακες, ενώ, σε ότι αφορά συγκεκριμένα την εισπίεση ατμού, το χρονικό διάστημα εφαρμογής της εν λόγω μεθόδου δεν ξεπερνά εν γένει το μισό έτος. Ακόμα, σύμφωνα με την ίδια μελέτη, από τις περιπτώσεις εφαρμογής της εισπίεσης ατμού, το 40% των περιστατικών αφορούσαν εδάφη με έντονη ετερογένεια.

Στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας, αναζητήσαμε περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού για τα οποία ήταν αφενός γνωστά τα υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά και αφετέρου ο βαθμός απομάκρυνσης της μάζας των ρύπων, προκειμένου να συσχετίσουμε την επίδραση των εδαφικών χαρακτηριστικών με την επίδοση της μεθόδου. Από την αναζήτηση αυτή εξαιρέθηκαν τα περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου σε πετρώματα. Τα προαναφερθέντα κριτήρια αναζήτησης περιόρισαν σημαντικά τον αριθμό των αποτελεσμάτων. Οι πηγές στις οποίες αναζητήθηκαν περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού, παρουσιάζονται στον Πίνακα 2-6.



**Πίνακας 2-6 Πηγές αναζήτησης περιστατικών εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού.**

Πηγή	Κατηγορία	Αναφορά
Critical Evaluation of State-of-the-Art In Situ Thermal Treatment Technologies for DNAPL Source Zone Treatment	Μελέτη	(Kingston et al., 2010)
In Situ Thermal Treatment of Chlorinated Solvents: Fundamentals and Field Applications	Μελέτη	(EPA, 2004)
Expert Panel Workshop on Research and Development Needs for Cleanup of Chlorinated Solvent Sites	Μελέτη	(SERDP & ESTCP, 2001)
Design: In Situ Thermal Remediation	Εγχειρίδιο Χρήσης	(US Army Corps of Engineers, 2009)
Performance of DNAPL Source Depletion Technologies at 59 Chlorinated Solvent-Impacted Sites	Επιστημονικό Άρθρο	(McGuire et al., 2006)
Clu-in: In Situ Thermal Treatment Site Profile Database	Ηλεκτρονική Βάση Δεδομένων	(Clu-in, 2013)

Τα αποτελέσματα της αναζήτησης περιστατικών παρουσιάζονται στον Πίνακα 2-7. Τα επιμέρους χαρακτηριστικά των περιστατικών αναζητήθηκαν σε άρθρα επιστημονικών περιοδικών, σε πρακτικά συνεδρίων αλλά και σε διαθέσιμες αναφορές κόστους/απόδοσης.

Στον Πίνακα 2-7, παρατηρούμε αρχικώς ότι το τριχλωροαιθυλένιο συνιστά ρύπο ενδιαφέροντος για το σύνολο των περιστατικών. Στα περιστατικά με βάθος ρυπασμένης ζώνης περί τα 10.7m, η μέθοδος εισπίεσης ατμού χρησιμοποιήθηκε σε συνδυασμό με άλλες τεχνολογίες αποκατάστασης για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης μάζας μεγαλύτερου από 80%. Ακόμα, στο περιστατικό ρύπανσης της A.G. Communications στο Ιλινόι των Η.Π.Α, όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης ήταν 15 μέτρα, για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης του ρύπου ίσου με 90% απαιτήθηκε παρατεταμένη εφαρμογή της μεθόδου, και συγκεκριμένα τέσσερα χρόνια συνεχούς εισπίεσης ατμού. Αντίθετα, στο περιστατικό Alameda Point, στη Καλιφόρνια, όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης ήταν περί τα 6.5m και το έδαφος ετερογενές, η αποκλειστική εφαρμογή της εισπίεσης ατμού για χρονικό διάστημα δύο μηνών είχε ως αποτέλεσμα την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης 99% για την περίπτωση του TCE. Από τις παραπάνω παρατηρήσεις επί των περιστατικών, θα μπορούσαμε να ισχυριστούμε ότι η επίδοση της μεθόδου βαίνει μειούμενη αυξανόμενου του βάθους της ρυπασμένης ζώνης

**Πίνακας 2-7 Χαρακτηριστικά των περιστατικών εφαρμογής της εισπύησης ατμού.**

Περιστατικό	I	II	III	IV	V	VI
	A.G. Communication Systems, Northlake, IL	Cape Canaveral, Air Force Station, FL	DOE, Portsmouth, OH	Young-Rainey Star Center, Largo, FL	Alameda Point, Site 5, CA	Solvent Services, San Jose, CA
Αναφορά	(EPA, 2004) (US Army Corps of Engineers, 2009)	(Battelle, 2003) (US Army Corps of Engineers, 2009)	(EPA, 2000) (Heron et al., 2001)	(Heron et al., 2005) (US Army Corps of Engineers, 2009)	(EPA, 2004) (Udell & Heron, 2001)	(Davis, 1998) (SERDP & ESTCP, 2001)
Κλίμακα Εφαρμογής	Πλήρης	Πιλοτική	Πιλοτική	Πλήρης	Πιλοτική	Πιλοτική
Ρύποι Ενδιαφέροντος	TCE, DCE, Ευλόλιο, Βενζόλιο	TCE	TCE	TCE, DCE, Τολουόλιο, Μεθυλοχλωρίδιο, Πετρελαιοειδή	TCE, Λάδι Κινητήρων, Πετρέλαιο	CVOC's
Τεχνολογία Αποκατάστασης	Εισπύηση Ατμού	Εισπύηση Ατμού & Αέρα	Εισπύηση Ατμού & Αέρα	Συνδυασμός Θερμικών Μεθόδων	Εισπύηση Ατμού	Εισπύηση Ατμού
Χαρακτηρισμός Εδάφους	Ετερογενές	Τρεις ομογενείς στρώσεις	Τρεις ομογενείς στρώσεις	Ετερογενές & Ανισότροπο	Ετερογενές	Ετερογενές
Στάθμη Υδροφόρου Ορίζοντα	-3.6 m	-2 m	-4.5m	-1.0m	-1.7m	-2m
Βάθος Ρυπασμένης Ζώνης	-15m	-10.7 m	-10.5	-10.7m	-6.5m	-2m
Έκταση προς Απορρύπανση	12.000m <sup>2</sup>	400m <sup>2</sup>	2000m <sup>2</sup>	1000m <sup>2</sup>	325m <sup>2</sup>	8m <sup>2</sup>
Χρόνος Εφαρμογής της Μεθόδου	4 χρόνια	6 μήνες	4 μήνες	6 μήνες	2 μήνες	6 ημέρες
Μέση Απόσταση Μεταξύ Πηγαδιών	7m	6.5m	7m	8.50m	9.5m	3.5m
Ποσοστό Απομάκρυνσης Μάζας (%)	90%	85%	>80%	99.90%	95% (motor oil & diesel) 99% (TCE)	>90%




### 3 Απορρύπανση Εδαφικής Στήλης

Στο παρόν κεφάλαιο εξετάζεται η απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση νερού και ατμού. Πραγματοποιείται σύγκριση των αναλυτικών λύσεων με τα αποτελέσματα του λογισμικού πολυφασικής ροής T2VOC και σύγκρινεται η επίδοση των μεθόδων σε όρους απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης αλλά και ενέργειας.

#### 3.1 Εδαφικά Χαρακτηριστικά

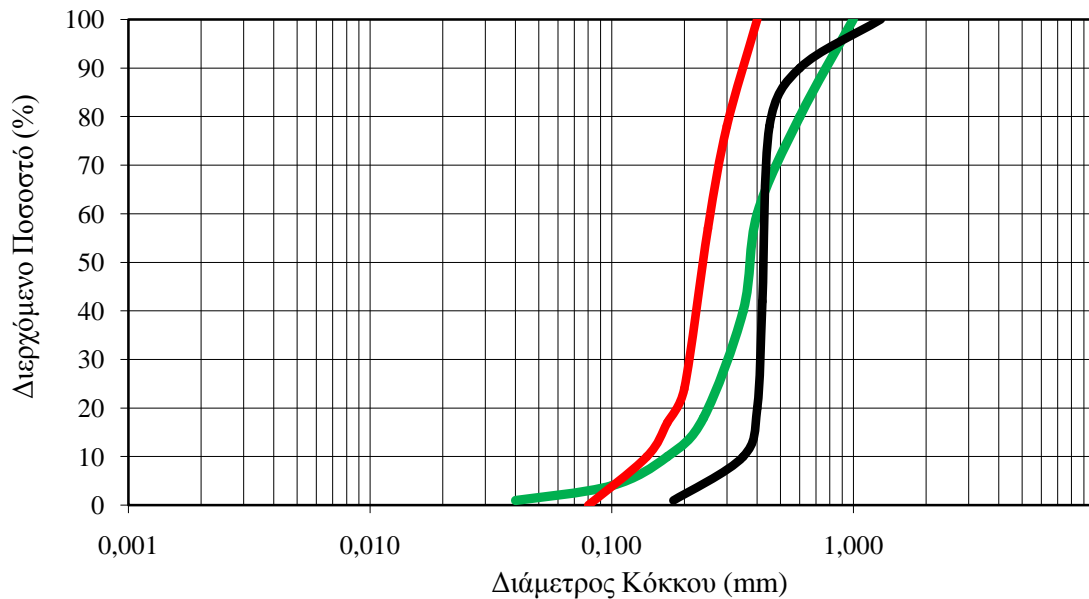
Για την περίπτωση του μονοδιάστατου προβλήματος, χρησιμοποιήθηκαν τρεις διαφορετικές άμμοι, τα χαρακτηριστικά των οποίων έχουν προσδιοριστεί πειραματικά από τους Pantazidou (1991) και Al-Suhaili & Faisal (2012). Στον Πίνακα 3-1 περιγράφονται τα εξεταζόμενα εδάφη, όπως αυτά χαρακτηρίστηκαν από τους αντίστοιχους ερευνητές.

**Πίνακας 3-1 Χαρακτηρισμός των προς εξέταση εδαφών**

Έδαφος	Χαρακτηρισμός	Αναφορά	Διακριτικό για τα σχήματα αυτού του κεφαλαίου
I	Χονδρόκοκκη, Κακώς Διαβαθμισμένη Άμμος	(Pantazidou, 1991)	
II	Λεπτόκοκκη, Κακώς Διαβαθμισμένη Άμμος	(Pantazidou, 1991)	
III	Μέση, Καλώς Διαβαθμισμένη Άμμος	(Al-Suhaili & Faisal, 2012)	

Για κάθε ένα από τα προαναφερθέντα εδάφη, είναι γνωστή η καμπύλη κοκκομετρικής διαβάθμισης. Στο Σχήμα 3-1 παρουσιάζεται η κοκκομετρική καμπύλη για κάθε μία από τις τρεις άμμους.

Σε ότι αφορά το πορώδες των προς εξέταση εδαφών, η Pantazidou (1991) μέτρησε τιμές από 0.46 έως 0.464 για τη λεπτόκοκκη άμμο, ενώ για την χονδρόκοκκη άμμο μετρήθηκαν οι τιμές 0.456 και 0.457. Η διαφορά του πορώδους μεταξύ των δύο εδαφών είναι αμελητέα και για τον λόγο αυτό, θεωρήθηκε πορώδες ίσο με 0.46 και για τις δύο άμμους. Αντίθετα, στη δημοσίευση των Al-Shuhaili και Faisal (2012), δεν γίνεται αναφορά στο πορώδες της μέσης άμμου «Kerbala Sand», οπότε το πορώδες της θεωρήθηκε και αυτό ίσο με 0.46.



Σχήμα 3-1 Καμπύλες Κοκκομετρικής διαβάθμισης των προς εξέταση άμμων.

Η υδραυλική αγωγιμότητα των άμμων προσδιορίστηκε πειραματικά από τους προαναφερθέντες ερευνητές. Επιπρόσθετα, για κάθε έδαφος, προσδιορίστηκε από το Σχήμα 3-1 η διάμετρος  $D_{10}$  και εν συνεχεία, η υδραυλική αγωγιμότητα βάσει της εμπειρικής σχέσης του Hazen (Salarashayeri & Siosemarde, 2012) για  $c=1$  και  $c=1.5$  αντίστοιχα:

$$K = c(D_{10})^2 \quad (3.1)$$

όπου:  $c$ : Θετική σταθερά η οποία λαμβάνει τιμές από 1 έως 1.5

$K$ : Υδραυλική αγωγιμότητα σε cm/s

Η υδραυλική αγωγιμότητα υπολογίσθηκε τελικώς ως η μέση τιμή της πειραματικά προσδιορισμένης και της θεωρητικής από τον τύπο του Hazen τιμής, για εκείνον τον συντελεστή  $c$  για τον οποίο η απόκλιση της εμπειρικής σχέσης του Hazen από την πειραματικά προσδιορισμένη τιμή ήταν η ελάχιστη.

Εν συνεχεία, απαιτείται ο προσδιορισμός των παραμέτρων τριχοειδούς πίεσης για τα υπό εξέταση εδάφη. Η Pantazidou (1991) πραγματοποίησε μετρήσεις τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης τόσο για τη χονδρόκοκκη όσο και για τη λεπτόκοκκη άμμο. Οι εν λόγω μετρήσεις αφορούσαν διφασικό σύστημα νερού αέρα και συγκεκριμένα, την περίπτωση της αποστράγγισης (καμπύλη drainage). Η ελάχιστη τιμή  $S_w$  που μετρήθηκε ήταν 0.11 και 0.12 για τη χονδρόκοκκη και λεπτόκοκκη άμμο, αντίστοιχα. Οι τιμές αυτές

είναι σε συμφωνία με την προτεινόμενη από τους Carcell & Paris (1998) τιμή για τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης σε αμμώδη εδάφη (βλέπε εδάφιο 2.1.3).

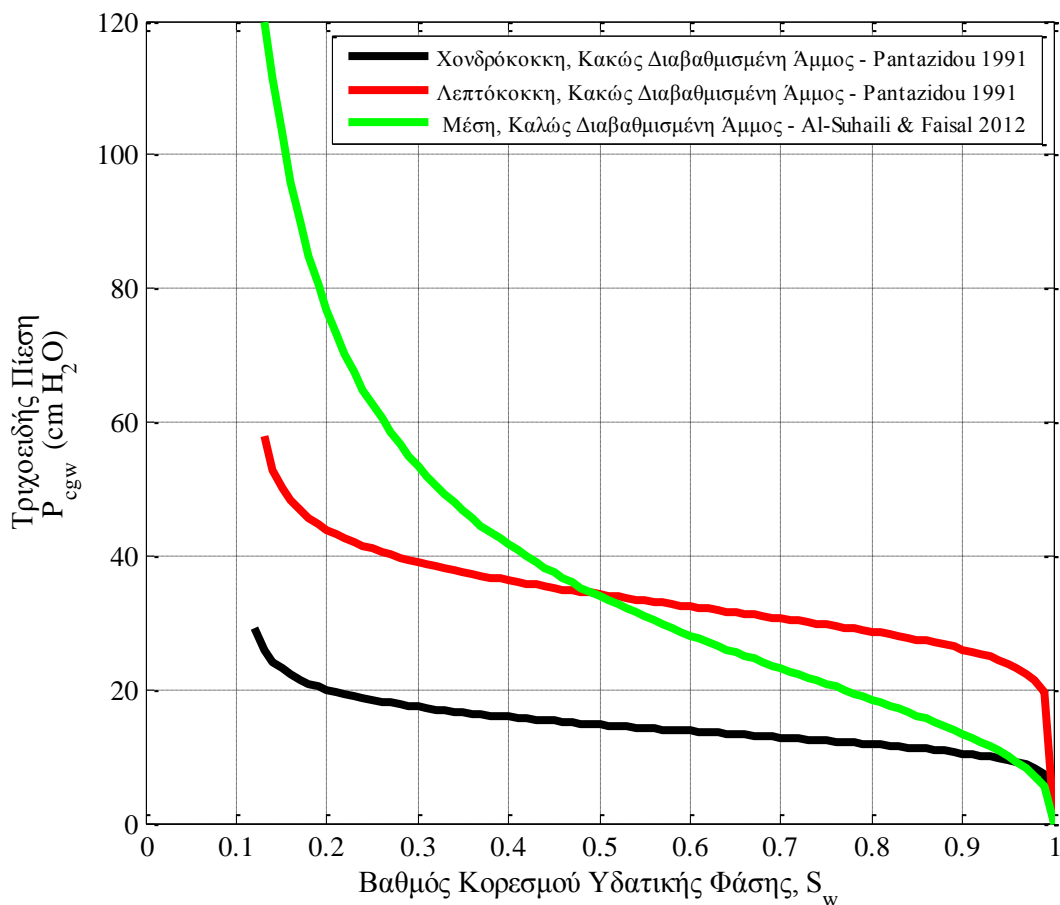
Σε ότι αφορά την καλώς διαβαθμισμένη/μέση άμμο, οι Al-Suhaili & Faisal (2012) πραγματοποίησαν μετρήσεις τριχοειδούς πίεσης σε σύστημα νερού – κηροζίνης και εκτίμησαν τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης ίσο με 0.07. Προκειμένου να *εκτιμηθεί* ο παραμένον βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης στο σύστημα νερού-αέρα, έγινε αναγωγή βάσει των επιφανειακών τάσεων. Για επιφανειακή τάση νερού-κηροζίνης ίση με 48 dynes/dm (Pantazidou, 1991) και επιφανειακή τάση νερού-αέρα ίση με 72.5 dynes/cm (Νουτσόπουλος & Χριστοδούλου, 1996) ο παραμένον βαθμός κορεσμού του νερού υπολογίστηκε κατά προσέγγιση ίσος με 0.106. Τελικώς, ο παραμένον βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης λήφθηκε ίσος με 0.12 για το σύνολο των τριών εδαφών.

Ελλείπει μετρήσεων του παραμένοντος βαθμού κορεσμού για την μη υδατική φάση, θεωρήσαμε ότι  $S_{nr}=0.10$ . Η τιμή αυτή είναι εντός του εύρους των τιμών που συνιστά ο Schuille (1998) (βλέπε εδάφιο 2.1.3) για αμμώδη εδάφη και συγκεκριμένα για την περίπτωση του TCE.

Προκειμένου να καθοριστούν οι καμπύλες τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού θα πρέπει να προσδιοριστούν οι παράμετροι  $S_m$ ,  $N$  και  $\alpha_{gn}$  για κάθε ένα από τα προς εξέταση εδάφη, καθώς επίσης και οι συντελεστές προσαρμογής  $\beta_{nw}$  και  $\beta_{gn}$ . Για τις κακώς διαβαθμισμένες άμμους, ο συντελεστής  $S_m$  λήφθηκε ίσος με 0.11 και 0.12 για τη λεπτόκοκκη και χονδρόκοκκη άμμο, αντίστοιχα, ενώ οι συντελεστές  $N$  και  $\alpha_{gn}$  προσδιορίστηκαν με προσαρμογή της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης Van Genuchten στις πειραματικές μετρήσεις της Pantazidou με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα `VG_parameter_estimation` το οποίο επισυνάπτεται στο παράρτημα.

Για την καλώς διαβαθμισμένη άμμο, οι Al-Suhaili & Faisal (2012) υπολόγισαν τους συντελεστές  $S_m$ ,  $\alpha_{gw}$  και  $N$  ίσους με 0.07,  $4.8 \text{ m}^{-1}$  και 2.7 αντίστοιχα.

Στο **Σχήμα 3-2** απεικονίζονται οι καμπύλες τριχοειδούς πίεσης – βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης για το σύνολο των τριών εδαφών.



Σχήμα 3-2 Καμπύλες Τριχοειδούς Πίεσης – Βαθμού Κορεσμού Υδατικής Φάσης σε σύστημα νερού-αέρα για τα εξεταζόμενα εδάφη. Μοντέλο Van-Genuchten, Πίνακας 2-1 & Πίνακας 3-2.

Προκειμένου να καθοριστούν οι καμπύλες σχετικής διαπερατότητας για τα παραπάνω εδάφη, απαιτείται ο προσδιορισμός της παραμέτρου  $\epsilon$  των σχέσεων (1.22) έως (1.24). Ο Corey (1994) αναφέρει ότι σύμφωνα με τον Averjanov η τιμή του  $\epsilon$  ισούται με 3.50 για φυσικές αποθέσεις άμμων ενώ την ίδια τιμή προτείνουν σύμφωνα με τον Ahmed (2006) οι Wyllie & Gardner (1958). Η τιμή της παραμέτρου  $\epsilon$  λήφθηκε τελικώς ίση με 3.50.

Για τον προσδιορισμό της θερμικής αγωγιμότητας των εδαφών, χρησιμοποιήθηκε η εμπειρική σχέση του Sundberg (βλέπε εδάφιο 2.2.3). Για τιμή πορώδους ίση με 0.46, η θερμική αγωγιμότητα υπό ξηρές και κορεσμένες συνθήκες υπολογίστηκε ίση με 0.18 και 2.33 W/(mK) αντίστοιχα. Επιπρόσθετα, οι τιμές αυτές είναι σε συμφωνία με τις μετρημένες από τον Chen (2008) τιμές για αντίστοιχες τιμές πορώδους (βλέπε εδάφιο 2.2.3).

Τέλος, η θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων θεωρήθηκε ίση με 1000J/(kg K) (Clauser, 2011).

Στον Πίνακα 3-2, παρουσιάζονται συγκεντρωτικά τα εδαφικά χαρακτηριστικά για το σύνολο των προς εξέταση εδαφών.

**Πίνακας 3-2 Εδαφικά χαρακτηριστικά για τα εξεταζόμενα εδάφη**

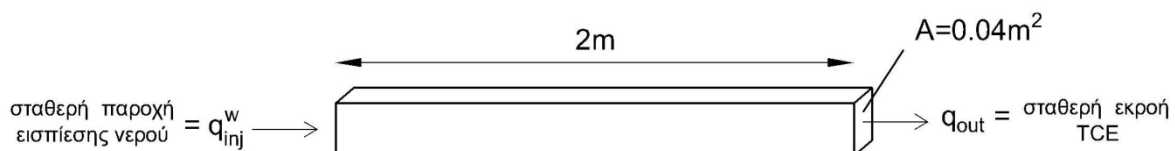
Έδαφος	I	II	III
	Χονδρόκοκκη Άμμος (Pantazidou 1991)	Λεπτόκοκκη Άμμος (Pantazidou 1991)	Μέση Άμμος (Al-Suhaili et. al.2012)
Αναφορά	(Pantazidou 1991)	(Pantazidou 1991)	(Al-Suhaili et. al.2012)
Χαρακτηρισμός Διαβάθμισης	Κακή	Κακή	Καλή
$D_{min}$ (mm)	0.17	0.08	0.05
$D_{max}$ (mm)	1.15	0.40	1.00
$D_{10}$ (mm)	0.33	0.13	0.18
K(m/s) Hazen c=1.00	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$1.60 \cdot 10^{-4}$	$3.24 \cdot 10^{-4}$
K(m/s) Hazen c=1.50	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$2.53 \cdot 10^{-4}$	$4.86 \cdot 10^{-4}$
K(m/s) Πειραματικό	$1.59 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-4}$	$3.20 \cdot 10^{-4}$
K (m/s)	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$3.22 \cdot 10^{-4}$	$3.22 \cdot 10^{-4}$
Πορώδες n	0.46	0.46	0.46
Παραμένον Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_{wr}$	0.12	0.12	0.12
Παραμένον Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_{nr}$	0.10	0.10	0.10
Παραμένον Βαθμός Κορεσμού Αέρα, $S_{gr}$	0.01	0.01	0.01
Μοντέλο Σχετικής Διαπερατότητας	Stone II ( $\epsilon=3.5$ )	Stone II ( $\epsilon=3.5$ )	Stone II ( $\epsilon=3.5$ )
$S_m$	0.11	0.12	0.07
$\alpha_{gw}$ ( $m^{-1}$ )	7.27	3.08	4.8
$\alpha_{nw}$ ( $m^{-1}$ )	13.78	5.84	9.09
$\alpha_{gn}$ ( $m^{-1}$ )	17.45	7.39	11.52
N	6.96	8.71	2.7
$M=1-1/N$	0.86	0.89	0.63
Θερμοχωρητικότητα Στερεών Κόκκων $C_R$ (J/kg)	1000	1000	1000
Θερμο/τητα ξηρού εδάφους $\lambda_{dry}$ (W/mK)	0.18	0.18	0.18
Θερμο/τητα κορεσμένου εδάφους $\lambda_{wet}$ (W/mK)	2.33	2.33	2.33

### 3.2 Απορρύπανση στήλης με εισπίεση νερού

Για την απορρύπανση στήλης με τη μέθοδο εισπίεσης νερού, θα εφαρμοσθεί η αναλυτική λύση Buckley-Leverett σε εδαφική στήλη πεπερασμένου μήκους και θα υπολογισθεί, σύμφωνα με την εν λόγω μέθοδο, η ταχύτητα κίνησης του μετώπου, που στη προκειμένη λύση είναι κατακόρυφο. Εν συνεχεία, θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων της λύσης Buckley-Leverett με τα αποτελέσματα της αντίστοιχης αριθμητικής λύσης, για κάθε ένα από τα εξεταζόμενα εδάφη.

#### 3.2.1 Περιγραφή αρχικών και συνοριακών συνθηκών

Για την απορρύπανση στήλης με εισπίεση νερού θεωρήθηκε εδαφική στήλη μήκους  $L=2m$  και διατομής  $A=0,04m^2$ . Στο Σχήμα 3-3 απεικονίζεται η μορφή της προς εξέταση εδαφικής στήλης.



Σχήμα 3-3 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες αναλυτικής μεθόδου Buckley-Leverett.

Ως αρχικές συνθήκες του προβλήματος, θεωρούμε ομοιόμορφη κατανομή των βαθμών κορεσμού της υδατικής και μη υδατικής φάσης. Η αρχική αυτή συνθήκη αποτελεί προϋπόθεση για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett. Πιο συγκεκριμένα, για  $t=0$  και  $0 \leq x \leq 2m$  έχουμε:

$$S_w(x, t = 0) = S_{w\text{initial}} = 0.13 \quad (3.2)$$

$$S_n(x, t = 0) = 1 - S_{w\text{initial}} = 0.87 \quad (3.3)$$

Εν συνεχεία θεωρούμε σταθερή παροχή εισπίεσης νερού ίση με  $q_{inj}^w$ . Πραγματοποιήθηκαν δύο σενάρια αναλύσεων A1 και A2 για παροχές εισπίεσης 20 και 50L/day, αντίστοιχα.

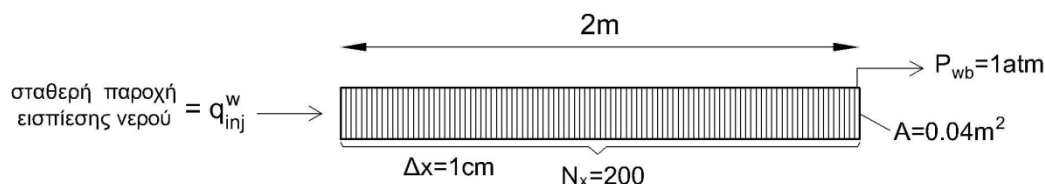


Για την εφαρμογή της αναλυτικής μεθόδου Buckley-Leverett, δεν απαιτείται ο καθορισμός κάποιας συνοριακής συνθήκης στο πέρας της στήλης. Θεωρούμε ότι στο πέρας της στήλης εκρέει συνολική παροχή TCE ίση με την εκάστοτε εισπιεζόμενη (20 και 50L/day αντίστοιχα). Με δεδομένη την παροχή εισπίεσης, τη διατομή της στήλης, το πορώδες, καθώς επίσης και τις σχέσεις σχετικής διαπερατότητας του μέσου θα υπολογισθεί η ταχύτητα του μετώπου σύμφωνα με τη μέθοδο που αναπτύχθηκε στο εδάφιο 2.1.4. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-3.

**Πίνακας 3-3 Δεδομένα για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett**

Δεδομένα	Σενάριο A1	Σενάριο A2
Παροχή Εισπίεσης Νερού, $q_{inj}$ (L/day)	<b>20.0</b>	<b>50.0</b>
Εμβαδόν Διατομής A ( $m^2$ )		0.04
Πορώδες n		0.46
Παραμένον Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_{wr}$		0.12
Παραμένον Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_{nr}$		0.10
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_{winitial}$		0.13
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_{ninitial}$		0.87
Δυναμική Συνεκτικότητα Νερού, $\mu_w$ (cp)		1.00
Δυναμική Συνεκτικότητα TCE, $\mu_n$ (cp)		0.53
Μοντέλο σχετικής διαπερατότητας	Stone II ( $\epsilon=3.50$ )	

Για την αριθμητική επίλυση με χρήση του λογισμικού T2VOC, η ισοδιάσταση  $\Delta x$  ελήφθη ίση με 1 cm σε όλο το μήκος της εδαφικής στήλης. Στο Σχήμα 3-4 απεικονίζεται η διακριτοποίηση της εδαφικής στήλης και οι συνοριακές συνθήκες.



**Σχήμα 3-4 Διακριτοποίηση εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες για τη προσομοίωση της εισπίεσης νερού με χρήση του λογισμικού T2VOC**

Για την αριθμητική προσομοίωση της εισπίεσης νερού, θεωρούμε τις ίδιες αρχικές συνθήκες με αυτές που παρουσιάστηκαν προηγουμένως ενώ η αρχική πίεση της μη υδατικής φάσης θεωρείται ίση με 1atm σε όλο το μήκος της στήλης. Ως συνοριακή συνθήκη στην αρχή της στήλης επιβάλλουμε σταθερή παροχή εισπίεσης νερού ίση με 20 και 50 L/day για τα Σενάρια A1 και A2 αντίστοιχα, ενώ στο πέρας της στήλης θεωρούμε φρέαρ άντλησης με δείκτη παραγωγικότητας (productivity index) ίσο με:

$$PI = \frac{k_s^i A}{dx/2} \quad (3.4)$$

όπου:  $k_s^i$ : η περατότητα του εδάφους  $i$ ,  $i=I, II, III$  ( $m^2$ )

$dx$ : η ισοδιάσταση κατά τον άξονα  $x$  (m)

$A$ : το εμβαδόν διατομής ( $m^2$ )

Ο δείκτης παραγωγικότητας χρησιμοποιείται ευρέως στην επιστήμη της μηχανικής πετρελαίων και εκφράζει την παροχή του φρέατος ανά μονάδα πτώσης πίεσης στον ταμιευτήρα (Ahmed, 2006), (Σταματάκη, 2006). Η σχέση (3.4) προτάθηκε από τον Falta (1992) προκειμένου να είναι συμβατή με το ισοζύγιο μάζας του T2VOC, και αυτός είναι ο λόγος που η σχέση (3.4) δεν ικανοποιεί τις μονάδες που επιβάλλονται από τον προαναφερθέντα ορισμό. Προκειμένου να ορισθεί πλήρως η συνοριακή συνθήκη στο πέρας της στήλης, απαιτείται επιπρόσθετα ο προσδιορισμός της πίεσης της αέριας φάσης (που ταυτίζεται με αυτήν της μη υδατικής φάσης) στο σημείο της άντλησης, ήτοι στον τελευταίο πεπερασμένο όγκο <sup>1</sup>. Η πίεση αυτή θεωρήθηκε ίση με 1atm, ίση δηλαδή με την πίεση της μη υδατικής φάσης τη χρονική στιγμή  $t=0$ .

Στον Πίνακα 3-4 παρουσιάζονται συγκεντρωτικά οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες, οι οποίες αποτελούν ταυτόχρονα και τα δεδομένα εισόδου στο λογισμικό T2VOC για την προσομοίωση απορρύπανσης στήλης με εισπίεση νερού.

---

<sup>1</sup> Η πίεση αυτή αναφέρεται στη διεθνή βιβλιογραφία με τον όρο wellbore flowing pressure. Η Σταματάκη (2006) αναφέρει τη πίεση αυτή ως πίεση στον πυθμένα του πηγαδιού.

**Πίνακας 3-4 Αρχικές/Συνοριακές συνθήκες και δεδομένα εισόδου (T2VOC) για την προσομοίωση απορρύπανσης στήλης εδάφους με εισπίεση νερού**

Παράμετρος	Σενάριο A1	Σενάριο A2
Παροχή Εισπίεσης Νερού, $q_{inj}$ (L/day)	<b>20.0</b>	<b>50.0</b>
Αρχική Θερμοκρασία, $T_o$ (°C)		20.0
Αρχική Πίεση Αέριας Φάσης, $P_o$ (atm)		1.00
Αρχική Συγκέντρωση Αέρα στην Υδατική Φάση, $C_w^a$		0.0
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Υδατικής Φάσης, $S_{winitial}$		0.13
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού μη Υδατικής Φάσης, $S_{ninitial}$		0.87
Πίεση Εξόδου Αέριας Φάσης, $P_{wb}$ (atm)		1.00
Ισοδιάσταση $\Delta x$ (m)		0.01

Σχολιασμός συνοριακών συνθηκών: Και στις δύο εξεταζόμενες περιπτώσεις (Buckley-Leverett και αριθμητική προσομοίωση), ο βαθμός κορεσμού του νερού στο πέρας της στήλης, πριν την άφιξη του μετώπου σε αυτό, είναι σχεδόν ίσος με τον παραμένοντα, που συνεπάγεται μηδενική κινητικότητα της υδατικής φάσης (στην έξοδο:  $k_{rw}=0$ ). Αυτό σημαίνει ότι από το πέρας της στήλης δύναται να εκρυσταλλώσει μόνο TCE. Λαμβάνοντας ακόμα υπόψη την εξίσωση συνέχειας, η εκροή TCE σε όρους όγκου θα είναι ίση με την εκάστοτε παροχή εισπίεσης νερού και στις δύο εξεταζόμενες περιπτώσεις. Επειδή ακόμα τα χαρακτηριστικά των ρευστών είναι πρακτικώς ανεξάρτητα της πίεσης (τα υγρά είναι ασυμπίεστα και η δυναμική συνεκτικότητα ανεξάρτητη της πίεσης), η θεωρούμενη πίεση στην έξοδο της στήλης, για την περίπτωση της αριθμητικής προσομοίωσης, δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα. Αυτό επιβεβαιώθηκε για πίεση εξόδου ίση με 1 και 2 atm. Εξάλλου, η κίνηση των ρευστών αποδίδεται στη μεταβολή της πίεσης και όχι στις πιέσεις αυτές καθ' αυτές. Συνεπώς οι συνοριακές συνθήκες στις δύο εξεταζόμενες περιπτώσεις είναι ισοδύναμες και συνεπώς έχει νόημα η σύγκριση των αποτελεσμάτων.

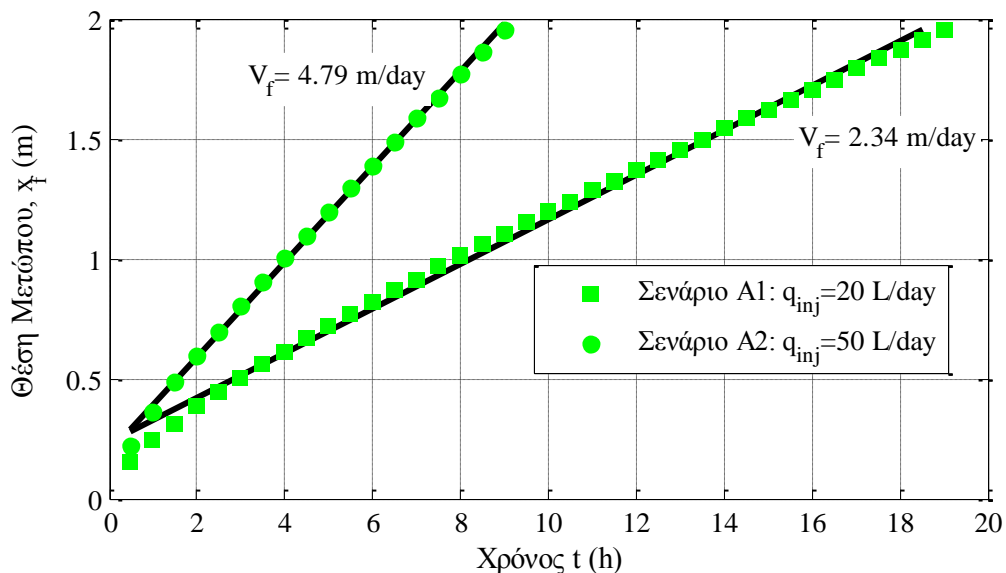
### 3.2.2 Μεθοδολογία

Με εφαρμογή της μεθόδου Buckley-Leverett, υπολογίστηκε η ταχύτητα κίνησης του μετώπου, ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης στη θέση του μετώπου, καθώς επίσης και ο μέσος βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου. Αξίζει να σημειωθεί ότι η μέθοδος Buckley-Leverett δεν λαμβάνει υπόψη την περατότητα του μέσου και συνεπώς τα αποτελέσματα αυτά είναι κοινά για το σύνολο των τριών προς εξέταση εδαφών. Τα αποτελέσματα της μεθόδου Buckley-Leverett, για κάθε ένα από τα σενάρια A1 και A2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-5.

**Πίνακας 3-5 Αποτελέσματα ανάλυσης κατά Buckley-Leverett**

Αποτέλεσμα	Σενάριο A1 $q_{inj}=20\text{L/day}$	Σενάριο A2 $q_{inj}=50\text{L/day}$
Ταχύτητα κίνησης μετώπου, $V_f$ (m/day)	<b>1.790</b>	<b>4.470</b>
Βαθμός κορεσμού νερού στη θέση του μετώπου, $S_{wf}$		0.677
Μέσος βαθμός κορεσμού νερού ανάντη του μετώπου, $S_w^{up}$		0.741

Εν συνεχεία, με χρήση του λογισμικού T2VOC υπολογίστηκε, για κάθε ένα από τα εξεταζόμενα εδάφη, η θέση του μετώπου για διάφορες χρονικές στιγμές από την χρονική στιγμή  $t=0$  (έναρξη εισπίεσης) μέχρι την χρονική στιγμή άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης. Θα πρέπει στο σημείο αυτό να επισημάνουμε ότι τα εξεταζόμενα εδάφη διαφοροποιούνται ως προς την περατότητα και χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης. Ως θέση του μετώπου ορίσαμε την τετμημένη του πεπερασμένου όγκου στον οποίο ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης είναι ίσος με 0.13, ενώ στον αμέσως προηγούμενο πεπερασμένο όγκο ο βαθμός κορεσμού είναι μεγαλύτερος από 0.13. Με βάσει τα δεδομένα αυτά και για την εκάστοτε παροχή εισπίεσης, κατασκευάστηκε για κάθε έδαφος το διάγραμμα χρόνου - θέσης  $x_f$  του μετώπου. Στο Σχήμα 3-5 παρουσιάζεται ενδεικτικά το διάγραμμα χρόνου-θέσης του μετώπου για την καλώς διαβαθμισμένη άμμο.



Σχήμα 3-5 Εισπίεση νερού σε εδαφική στήλη: Διάγραμμα χρόνου – θέσης μετώπου (T2VOC) για την καλώς διαβαθμισμένη άμμο. Σενάρια A1 και A2.

Από το Σχήμα 3-5, υπολογίστηκε η ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης με τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων. Ο συντελεστής γραμμικής συσχέτισης  $r$  για το σύνολο των

προσομοιώσεων ήταν μεγαλύτερος από 0.994. Η ταχύτητα κίνησης του μετώπου υπολογίστηκε ως η κλίση (slope) της ευθείας αυτής, καθώς  $V_f = dx_f/dt$ . Αξίζει να σημειωθεί ότι για  $t < 0.5h$  η κίνηση του μετώπου δεν είναι ευθύγραμμη ομαλή και το διάγραμμα χρόνου- θέσης του μετώπου είναι μη γραμμικό στο διάστημα 0-0.5h. Αυτός είναι και ο λόγος που η ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης δεν διέρχεται από το σημείο (0,0) (βλέπε Σχήμα 3-5). Το τμήμα αυτό δεν λήφθηκε υπόψη στη παρούσα ανάλυση καθώς μας ενδιαφέρει η σύγκριση της σταθερής ταχύτητας κίνησης του μετώπου με την σταθερή ταχύτητα κίνησης του μετώπου που υπολογίζει η μέθοδος Buckley-Leverett. Η διαδικασία επαναλήφθηκε για τα τρία εδάφη για παροχή εισπίεσης ίση με 20 και 50 L/day αντίστοιχα.

### 3.2.3 Σύγκριση αποτελεσμάτων λύσης Buckley-Leverett και αριθμητικής προσομοίωσης

Η σύγκριση των αποτελεσμάτων της αναλυτικής και αριθμητικής επίλυσης παρουσιάζεται στον Πίνακα 3-6. Στον ίδιο πίνακα παρουσιάζεται και η απόκλιση, κατ' απόλυτη τιμή, της αναλυτικής μεθόδου Buckley-Leverett από τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης, θεωρώντας τα τελευταία ως πιο αξιόπιστα.

**Πίνακας 3-6 Εισπίεση νερού σε εδαφική στήλη: Αποτελέσματα αναλυτικής λύσης (Buckley –Leverett) και αριθμητικής προσομοίωσης (T2VOC) για τα Σενάρια A1 και A2**

Σενάριο A1: Παροχή Εισπίεσης Νερού 20L/day					
Έδαφος	Χαρακτηρισμός	$i_{inj}^1$	Ταχύτητα Κίνησης Μετώπου (m/day)		Απόκλιση
			T2VOC	Buckley-Leverett	
I	Χονδρόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	0.36%	2.27	1.79	21.1%
II	Λεπτόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	1.80%	1.99		10.0%
III	Μέση Άμμος, Καλώς Διαβαθμισμένη	1.80%	2.34		23.5%
Σενάριο A2: Παροχή Εισπίεσης Νερού 50L/day					
Έδαφος	Χαρακτηρισμός	$i_{inj}^1$	Ταχύτητα Κίνησης Μετώπου (m/day)		Απόκλιση
			T2VOC	Buckley-Leverett	
I	Χονδρόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	0.90%	4.75	4.47	5.9%
II	Λεπτόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	4.50%	4.50		0.7%
III	Μέση Άμμος, Καλώς Διαβαθμισμένη	4.50%	4.79		6.7%

1: Υδραυλική Κλίση Εισπίεσης Νερού  $i_{inj} = q_{inj}/(KA)$

Από τον Πίνακα 3-6 καθίσταται εμφανές ότι αύξηση της παροχής εισπίεσης ή ισοδύναμα της υδραυλικής κλίσης εισπίεσης έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση της ακρίβειας της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett. Μάλιστα, η αύξηση της παροχής από 20 σε 50L/day είχε ως αποτέλεσμα την αύξηση της ακρίβειας της αναλυτικής λύσης για το σύνολο των εδαφών που εξετάστηκαν. Επιπρόσθετα, σε ότι αφορά τα εδάφη I και II, τα οποία φέρουν τον ίδιο χαρακτηρισμό ως προς την κοκκομετρική τους διαβάθμιση, για δεδομένη παροχή εισπίεσης (20 ή 50L/day), η ακρίβεια της μεθόδου Buckley-Leverett είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση του λεπτόκοκκου (λιγότερο περατού) εδάφους. Είναι εμφανές ότι αυξανόμενης της υδραυλικής κλίσης εισπίεσης αυξάνεται η ακρίβεια της αναλυτικής μεθόδου Buckley-Leverett. Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι καθώς αυξάνεται η υδραυλική κλίση εισπίεσης, ο όρος

$$\frac{k_s k_m A}{q_{inj} \mu_n} \frac{\partial P_c}{\partial x}$$

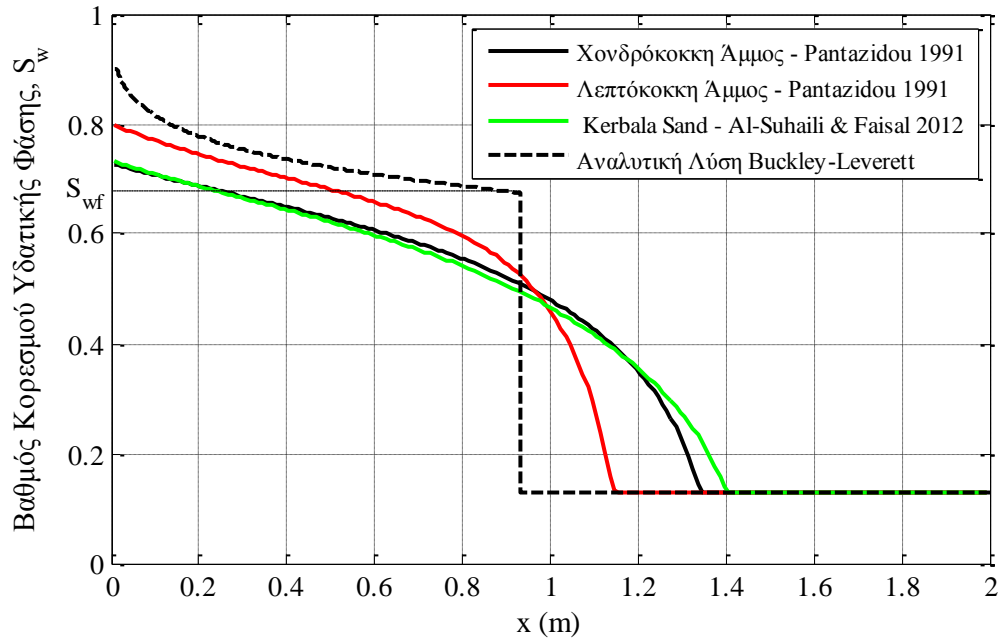
της σχέσης (1.31) μειώνεται και συνεπώς ικανοποιείται σε μεγαλύτερο βαθμό η παραδοχή της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett ότι δηλαδή ο παραπάνω όρος είναι μηδενικός. Για υδραυλική κλίση εισπίεσης ίση με 4.5% η απόκλιση της λύσης Buckley-Leverett δεν ξεπερνά το 7% για το σύνολο των εδαφών.

Σε ότι αφορά την επίδραση της υδραυλικής αγωγιμότητας, δεν παρατηρείται κάποια συστηματική τάση από τα αποτελέσματα του Πίνακα 3-6, αλλά φαίνεται ότι η ταχύτητα κίνησης του μετώπου εξαρτάται τόσο από την υδραυλική αγωγιμότητα όσο και από τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης του μέσου.

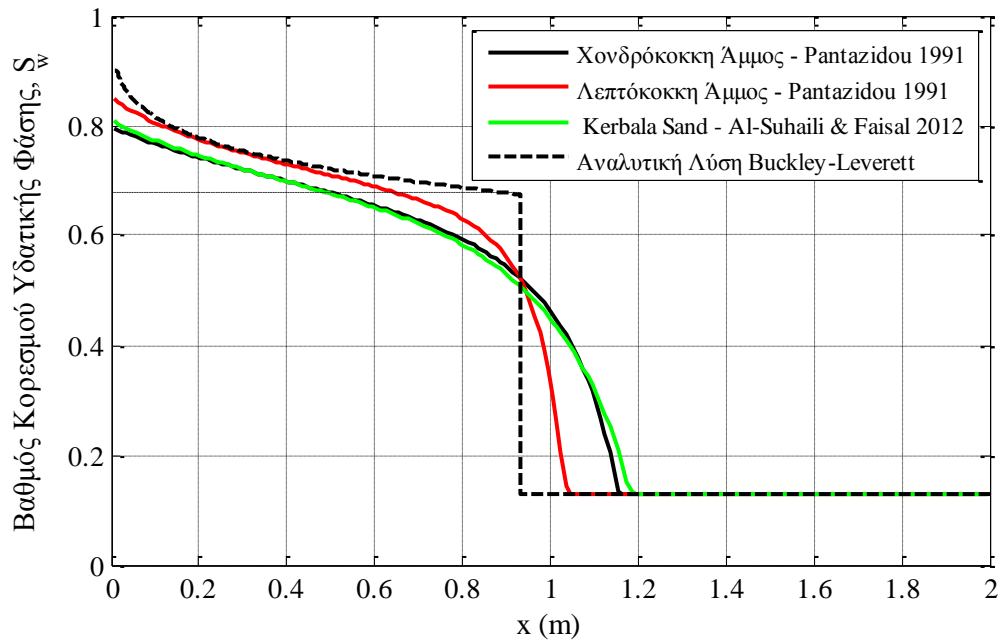
Συγκρίνοντας ακόμα τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων για τα εδάφη II και III, τα οποία έχουν την ίδια υδραυλική αγωγιμότητα, προκύπτει ότι η μέθοδος Buckley-Leverett παρουσιάζει μεγαλύτερη ακρίβεια στο κακώς διαβαθμισμένο έδαφος. Η παρατήρηση αυτή αφορά και τα δύο σενάρια παροχών A1 και A2. Για ίδια υδραυλική κλίση, η αναλυτική λύση Buckley-Leverett παρουσιάζει μεγαλύτερη ακρίβεια για το κακώς διαβαθμισμένο έδαφος. Αυτό ήταν αναμενόμενο καθώς η αναλυτική λύση αγνοεί την επίδραση των τριχοειδών πιέσεων, οι οποίες στην περίπτωση της καλώς διαβαθμισμένης άμμου είναι σημαντικές με αποτέλεσμα την αύξηση της απόκλισης. Πιο συγκεκριμένα, από την ανάλυση που παρουσιάζεται στο Παράρτημα Α προκύπτει ότι η ακρίβεια της αναλυτικής λύσης σχετίζεται με την κλίση της καμπύλης τριχοειδούς πίεσης, δηλαδή από την διαβάθμιση του εδάφους. Αντίθετα, η πίεση εισόδου του πορώδους μέσου δε φαίνεται να επιδρά στην ακρίβεια της αναλυτικής λύσης.

Από τα αποτελέσματα της αναλυτικής και αριθμητικής λύσης, είναι ακόμα εμφανές ότι η μέθοδος Buckley-Leverett υποεκτιμά, σε κάθε περίπτωση, την ταχύτητα κίνησης του μετώπου με αποτέλεσμα να υπερεκτιμά τον χρόνο άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης. Καθώς όμως το αθροιστικό ποσοστό απομάκρυνσης μάζας έως τη χρονική στιγμή άφιξης του μετώπου στο πέρας της στήλης είναι, για σταθερή παροχή εισπίεσης, γραμμική συνάρτηση του χρόνου, η εν λόγω μέθοδος υπερεκτιμά το ποσοστό απομάκρυνσης μάζας κατά την άφιξη του μετώπου στο πέρας της στήλης.

Στο Σχήμα 3-6 απεικονίζεται η κατανομή του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης για τα τρία εδάφη, όπως προέκυψε από την αριθμητική προσομοίωση και τη λύση Buckley-Leverett για παροχή εισπίεσης ίση με 20L/day (Σενάριο A1). Αντιστοίχως στο Σχήμα 3-7 απεικονίζονται τα ίδια μεγέθη για παροχή εισπίεσης ίση με 50L/day (Σενάριο A2).



Σχήμα 3-6 Κατανομή βαθμών κορεσμού υδατικής φάσης (T2VOC) και αναλυτικής λύσης (Buckley-Leverett) για τα εξεταζόμενα εδάφη.  $t=12.5h$ ,  $q_{inj}^w=20L/day$ .



Σχήμα 3-7 Κατανομή βαθμών κορεσμού υδατικής φάσης (T2VOC) και αναλυτικής λύσης (Buckley-Leverett) για τα εξεταζόμενα εδάφη.  $t=5h$ ,  $q_{inj}^w=50L/day$



## Παρατηρήσεις

Στα Σχήματα 3-6 και 3-7 παρατηρούμε ότι όσο η κατανομή των βαθμών κορεσμού αποκλίνει από την κατακόρυφο, η ακρίβεια της λύσης Buckley-Leverett μειώνεται και αυτό είναι αναμενόμενο καθώς η μέθοδος αυτή υποθέτει ότι το μέτωπο (front) είναι κατακόρυφο. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι τόσο στο Σχήμα 3-6 όσο και στο Σχήμα 3-7 η κατανομή του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης της μέσης άμμου τυγχάνει (όπως αποδεικνύεται στο παράρτημα) να ταυτίζεται με αυτήν της χονδρόκοκκης.

Μετά από τη συζήτηση που προηγήθηκε, στο Παράρτημα Α ακολουθεί προσέγγιση στην οποία αποδεικνύεται ότι:

- Σε δεδομένο έδαφος, αύξηση της παροχής αυξάνει τη κλίση του μετώπου και συνεπώς την ακρίβεια της μεθόδου Buckley-Leverett.
- Για ίδια υδραυλική αγωγιμότητα και παροχή εισπίεσης, τα κακώς διαβαθμισμένα εδάφη παρουσιάζουν πιο κατακόρυφο μέτωπο
- Για δεδομένη παροχή εισπίεσης, η κλίση της κατανομής του βαθμού κορεσμού της χονδρόκοκκης άμμου τυγχάνει να ταυτίζεται με αυτήν της μέσης άμμου.
- 

### 3.3 Απορρύπανση στήλης με εισπίεση ατμού

Για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού, εξετάζεται, σε ότι αφορά τα γεωμετρικά και εδαφικά χαρακτηριστικά, η ίδια εδαφική στήλη που εξετάστηκε και στην εισπίεση νερού. Και στις δύο περιπτώσεις, η συνολική μάζα της μη υδατικής φάσης εντός της στήλης τη χρονική στιγμή  $t=0$  είναι η ίδια. Σκοπός στην ανάλυση που ακολουθεί είναι να υπολογισθεί η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου αναλυτικά αλλά και αριθμητικά με χρήση του λογισμικού πολυφασικής ροής. Τα αποτελέσματα της αναλυτικής λύσης συγκρίνονται με τα αντίστοιχα του λογισμικού πολυφασικής ροής για τρία διαφορετικά σενάρια αρχικών και συνοριακών συνθηκών. Στα εδάφια που ακολουθούν, παρουσιάζονται οι αρχικές συνθήκες του προβλήματος, η προτεινόμενη αναλυτική για την εισπίεση ατμού λύση και τέλος πραγματοποιείται σύγκριση των αποτελεσμάτων της αναλυτικής λύσης με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την αριθμητική προσομοίωση.

### 3.3.1 Περιγραφή αρχικών και συνοριακών συνθηκών

Η απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού έχει εξεταστεί από τους Falta et al (1992) αλλά και από άλλους ερευνητές όπως ο Benz et al. (1997). Στα πειράματα που πραγματοποιήθηκαν από τους εν λόγω ερευνητές, ο αρχικός βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης ήταν ίσος με τον παραμένοντα. Οι Falta et al. (1992) παρατήρησαν ότι κατά την εισπίεση ατμού σε εδαφική στήλη σχηματίζεται ένα θερμικό μέτωπο, ανάντη του οποίου ο βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης (TCE) είναι μηδενικός. Σύμφωνα με τον ίδιο, καθώς η θερμοκρασία ανάντη του μετώπου είναι μεγαλύτερη από το σημείο βρασμού του TCE, αυτό, έχοντας μετατραπεί σε αέρια φάση και καθώς μεταφέρεται προς τα κατάντη του μετώπου, όπου η θερμοκρασία φθίνει απότομα, υγροποιείται. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται, με αποτέλεσμα την σταδιακή αύξηση του βαθμού κορεσμού της μη υδατικής φάσης στα κατάντη του θερμικού μετώπου.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, θα μας απασχολήσει η περίπτωση όπου ο αρχικός βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης (TCE) δεν είναι ίσος με τον παραμένοντα, αλλά αντιθέτως, έχει τιμή αντίστοιχη με αυτήν που μελετήθηκε στην απορρύπανση στήλης με εισπίεση νερού. Κατά την εισπίεση ατμού, η ροή στη στήλη είναι εν γένει τριφασική καθώς παρατηρείται ταυτόχρονη ροή υδατικής, μη υδατικής και αέριας φάσης. Συνεπώς, οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος θα πρέπει προσαρμοσθούν καταλλήλως. Ως αρχικές συνθήκες θεωρούμε, ομοίως με την περίπτωση εισπίεσης νερού που εξετάστηκε προηγουμένως, ομοιόμορφη κατανομή των βαθμών κορεσμού των φάσεων τη χρονική στιγμή  $t=0$ . Τη χρονική στιγμή  $t=0$  οι βαθμοί κορεσμού των φάσεων κατανέμονται ως ακολούθως:

$$S_w(x, t = 0) = S_w^o = S_{wr} = 0.12$$

$$S_g(x, t = 0) = S_g^o = S_{gr} = 0.01 \quad 0 \leq x \leq L = 2m, \quad (3.5)$$

$$S_n(x, t = 0) = S_n^o = 1 - S_w^o - S_g^o = 0.87$$

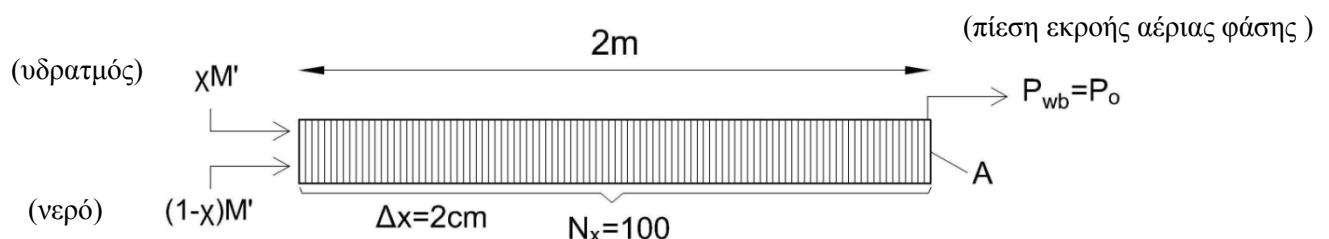
όπου με  $S_\beta^o$  συμβολίζουμε τον βαθμό κορεσμού της φάσης  $\beta$  τη χρονική στιγμή  $t=0$ .

Σε ότι αφορά τις πιέσεις των φάσεων τη χρονική στιγμή  $t=0$ , θεωρούμε ότι η πίεση της αέριας φάσης είναι ίση με  $P_o$ . Γνωρίζοντας την κατανομή των βαθμών κορεσμού των φάσεων τη χρονική στιγμή  $t=0$  προσδιορίζονται, βάσει των σχέσεων τριχοειδούς πίεσης-βαθμού κορεσμού, η πίεση της υδατικής και μη υδατικής φάσης, αντίστοιχα. Ως τιμές της πίεσης  $P_o$ , θα χρησιμοποιηθούν οι τιμές  $P_o=1$  και  $P_o=1.5$  atm, αντίστοιχα. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα χαρακτηριστικά του υδρατμού, όπως για παράδειγμα η πυκνότητα, η ειδική θερμότητα εξάτμισης κ.α. είναι συνάρτηση της πίεσης της αέριας φάσης και άρα εξαρτώνται από την αρχική πίεση  $P_o$ . Ακόμα, θεωρούμε ότι η αρχική θερμοκρασία  $T_o$  της στήλης ισούται με τη θερμοκρασία περιβάλλοντος  $T_e=20^\circ\text{C}$ .

Ως συνοριακές συνθήκες θεωρούμε σταθερή παροχή  $M'$  κορεσμένου μίγματος νερού-ατμού ποιότητας  $\chi$  στην αρχή της εδαφικής στήλης. Συνεπώς, η παροχή υδρατμού σε όρους μάζας θα είναι ίση με  $\chi \cdot M'$ , ενώ η παροχή νερού ίση με  $(1-\chi) \cdot M'$ . Η σύγκριση της αναλυτικής λύσης με τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης θα πραγματοποιηθεί για παροχή μίγματος νερού-ατμού ίσης με  $10\text{kg/day}$  και ποιότητα μίγματος ίση με  $0.75$  και  $1$  αντίστοιχα.

Τα αποτελέσματα της αναλυτικής λύσης θα υπολογιστούν βάσει της λύσης που παρουσιάζεται στο επόμενο εδάφιο, για τις αρχικές και συνοριακές συνθήκες που παρουσιάστηκαν προηγουμένως.

Για την αριθμητική επίλυση με χρήση του λογισμικού T2VOC, η εδαφική στήλη διακριτοποιήθηκε σε  $100$  πεπερασμένους όγκους ισοδιάστασης ίσης με  $2\text{cm}$ . Ως αρχικές και συνοριακές συνθήκες, χρησιμοποιήθηκαν οι ως άνω περιγραφόμενες, ενώ ως συνοριακή συνθήκη στο πέρας της στήλης, υποθέσαμε φρέαρ άντλησης με δείκτη παραγωγικότητας  $PI$ , όπως ακριβώς ορίστηκε στο εδάφιο 3.2.1 και συγκεκριμένα στη σχέση (3.4). Η πίεση της αέριας φάσης στο πέρας της στήλης θεωρήθηκε ίση με  $P_o$ , ίση δηλαδή με την αρχική πίεση της αέριας φάσης κατά μήκος της στήλης.



Σχήμα 3-8 Διακριτοποίηση εδαφικής στήλης και συνοριακές συνθήκες για την προσομοίωση εισπίεσης ατμού με χρήση του λογισμικού T2VOC.

### 3.3.2 Παρουσίαση αναλυτικής λύσης

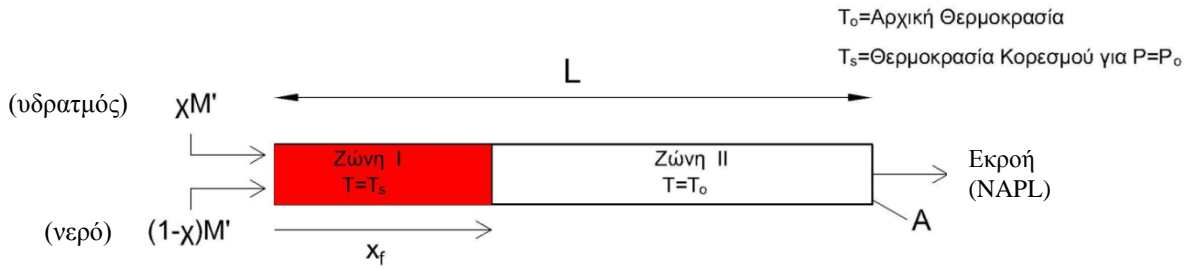
Για την εισπίεση ατμού, οι Kaslusky και Udell (2002) έχουν προτείνει μια αναλυτική λύση για την περίπτωση ταυτόχρονης εισπίεσης ατμού και αέρα, όταν ο αρχικός βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης είναι ίσος με τον παραμένοντα. Στη παρούσα διπλωματική εργασία, η αναλυτική λύση που προτείνεται αφορά αρχικό παραμένοντα βαθμό κορεσμού της μη υδατικής φάσης της τάξεως του 80-90%.

Η αναλυτική λύση, όπως παρουσιάζεται στο εδάφιο αυτό αφορά τη γενική περίπτωση και συνεπώς δεν προκαθορίζονται οι τιμές των παραμέτρων. Στην αναλυτική λύση που παρουσιάζεται, υπολογίζεται η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου καθώς επίσης και ο βαθμός κορεσμού των φάσεων ανάντη του μετώπου.

Για τη διατύπωση της αναλυτικής λύσης, θεωρούμε εδαφική στήλη μήκους  $L$  με διατομή επιφάνειας  $A$ . Οι αρχικές συνθήκες συνοψίζονται παρακάτω:

$$\begin{aligned} S_w(x, t = 0) &= S_w^o = S_{wr} \\ S_g(x, t = 0) &= S_g^o \\ S_n(x, t = 0) &= S_n^o = 1 - S_w^o - S_g^o \\ P_g^o(x, t = 0) &= P_o \\ T(x, t = 0) &= T_o = T_e \end{aligned} \quad 0 \leq x \leq L, \quad (3.6)$$

Τη χρονική στιγμή  $t=0$ , θεωρούμε έναρξη εισπίεσης κορεσμένου μίγματος υγρού- υδρατμού σταθερής ροής μάζας  $M'$  και σταθερής ποιότητας  $\chi$ . Τα χαρακτηριστικά του υδρατμού προσδιορίζονται βάσει της αρχικής πίεσης  $P_o$ , η οποία θεωρείται ίση με τη πίεση κορεσμού. Κάνουμε την παραδοχή ότι κατά τη διάρκεια της εισπίεσης, η μεταβολή των ιδιοτήτων του υδρατμού που οφείλεται στη μεταβολή της πίεσης της αέριας φάσης είναι μικρή, και ως εκ τούτου, θεωρούμε ότι τα χαρακτηριστικά του υδρατμού παραμένουν αμετάβλητα σε όλη τη διάρκεια εφαρμογής της μεθόδου. Τη χρονική στιγμή  $t>0$  το μέτωπο της εκτόπισης βρίσκεται στη θέση  $x_f$ . Για την τυχούσα χρονική στιγμή  $t$  διακρίνουμε δύο ζώνες κατά μήκος της στήλης: τη Ζώνη I ανάντη της θέσης του μετώπου και τη Ζώνη II κατάντη της θέσης του μετώπου. Θεωρούμε ότι η θερμοκρασία στη Ζώνη I είναι ίση με τη θερμοκρασία κορεσμού ( $T_s$ ) του νερού που αντιστοιχεί σε πίεση κορεσμού  $P_o$ . Στη Ζώνη II θεωρούμε ότι η θερμοκρασία είναι ίση με την αρχική θερμοκρασία της στήλης  $T_o$ . Κάνουμε δηλαδή την παραδοχή ότι η θερμοκρασία μεταβάλλεται απότομα στη θέση  $x_f$  του μετώπου. Τα παραπάνω απεικονίζονται στο Σχήμα 3-9.



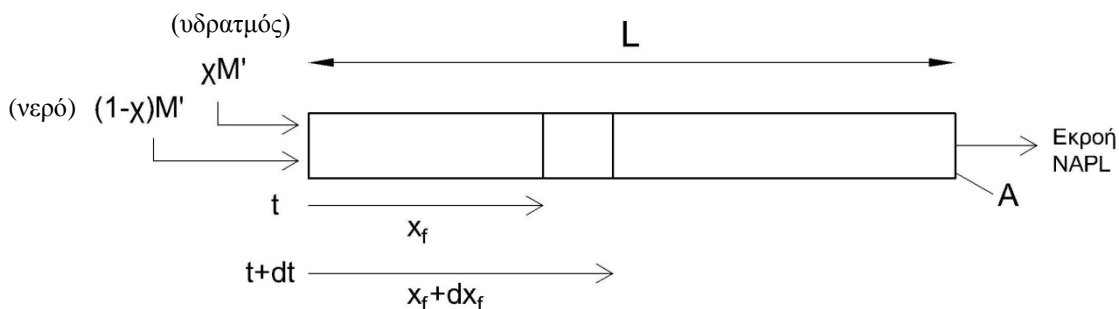
Σχήμα 3-9 Σχηματική απεικόνιση των θερμοκρασιακών Ζωνών I & II για τυχούσα θέση  $x_f$  του θερμικού μετώπου

Εν συνεχεία, θεωρούμε ότι στη Ζώνη II, οι βαθμοί κορεσμού των φάσεων παραμένουν αμετάβλητοι, δηλαδή ισχύει ότι:

$$S_{\beta}^{\text{II}}(x_f < x \leq L, t) = S_{\beta}^{\text{II}} = S_{\beta}^{\text{o}}, \quad \beta = w, n, g \quad (3.7)$$

όπου με  $S_{\beta}^{\text{II}}$  συμβολίζουμε τον βαθμό κορεσμού της φάσης  $\beta$  στη Ζώνη II. Επειδή οι βαθμοί κορεσμού της υδατικής και αέριας φάσης στη Ζώνη II είναι ίσοι με τους παραμένοντες βαθμούς κορεσμού των φάσεων αυτών, στο πέρας της στήλης εκρέει μη υδατική φάση. Στη Ζώνη I, ο βαθμός κορεσμού του TCE είναι μηδενικός, ενώ οι βαθμοί κορεσμού της υδατικής και αέριας φάσης στη Ζώνη I θεωρούνται σταθεροί και ίσοι με  $S_w^I$  και  $S_g^I$  αντίστοιχα. Επιπρόσθετα, για τη Ζώνη I, η πυκνότητα τόσο του ατμού όσο και του νερού είναι συνάρτηση της πίεσης κορεσμού και συμβολίζονται αντίστοιχα με  $\rho_g^I$  και  $\rho_w^I$ .

Από την ποσότητα του υδρατμού που εισρέει εντός της στήλης, ένα ποσοστό αυτής υγροποιείται, προκειμένου να αποδώσει την θερμότητα που απαιτείται για αύξηση της θερμοκρασίας της στήλης από την αρχική θερμοκρασία περιβάλλοντος  $T_o$  σε θερμοκρασία ίση με τη θερμοκρασία κορεσμού  $T_s$ . Στη προσπάθειά μας να υπολογίσουμε την ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου θα χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση συνέχειας. Θεωρούμε ότι την χρονική στιγμή  $t$  το θερμικό μέτωπο βρίσκεται στη θέση  $x_f$ , ενώ τη χρονική στιγμή  $t+dt$  το μέτωπο βρίσκεται στη θέση  $x_f+dx_f$ . Τα παραπάνω απεικονίζονται στο Σχήμα 3-10.



Σχήμα 3-10 Στοιχειώδης μεταβολή  $dx_f$  της θέσης του θερμικού μετώπου σε χρονικό διάστημα  $dt$ .

Η εξίσωση συνέχειας κατά μήκος της στήλης λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned} \text{Όγκος Εισρέοντος} & \quad \text{Όγκος Εισρέοντος} & \quad \text{Όγκος Εισρέοντος Ατμού που} & \quad \text{Όγκος μη υδατικής φάσης} \\ \text{Ατμού κατά το} & + \text{Νερού κατά το} & \text{υγροποιείται για αύξηση της} & = \text{που εκρέει από το πέρασ της} \\ \text{χρονικό διάστημα } dt & \text{χρονικό διάστημα} & \text{θερμοκρασίας της στήλης} & \text{στήλης κατά το χρονικό} \\ & dt & \text{μήκους } dx_f & \text{διάστημα } dt \end{aligned} \quad (3.8)$$

Προκειμένου να υπολογίσουμε τον όγκο του εισρέοντος ατμού στο χρονικό διάστημα  $dt$ , διαιρούμε τη μάζα του εισρέοντος υδρατμού με την πυκνότητα αυτού στη Ζώνη I. Αντίστοιχα, υπολογίζεται και ο όγκος του εισρέοντος νερού κατά το ίδιο χρονικό διάστημα. Ο όγκος της μη υδατικής φάσης που εκρέει από το πέρασ της στήλης θα ισούται με τον όγκο της μη υδατικής φάσης που εκτοπίζεται λόγω μετατόπισης του μετώπου από τη θέση  $x_f$  στη θέση  $dx_f$ . Ο όγκος αυτός θα ισούται με  $dx_f An S_n''$ .

Για να υπολογίσουμε τον όγκο του εισρέοντος ατμού που υγροποιείται, θα πρέπει να υπολογίσουμε τη θερμότητα που απαιτείται προκειμένου να αυξηθεί η θερμοκρασία στοιχειώδους μήκους στήλης  $dx_f$  από τη θερμοκρασία περιβάλλοντος στη θερμοκρασία κορεσμού. Η συνολική αυτή θερμότητα (TH) θα είναι ίση με το άθροισμα της θερμότητας που απαιτείται προκειμένου να αυξηθεί η θερμοκρασία τόσο των στερεών κόκκων του εδάφους όσο και της υδατικής φάσης που βρίσκεται στη Ζώνη II. Έχουμε:

$$TH = dx_f A \Delta T \left[ (1-n) \rho_s C_R + n S_w'' \rho_w'' C_w \right] \quad (3.9)$$

Διαιρώντας τη συνολική αυτή θερμότητα με την ειδική θερμότητα εξάτμισης του νερού προκύπτει η απαιτούμενη μάζα υδρατμών που πρέπει να υγροποιηθεί για την θέρμανση μήκους στήλης ίσου με  $dx_f$ . Διαιρώντας εκ νέου τη μάζα αυτή με την πυκνότητα του ατμού στη Ζώνη I, προκύπτει ο όγκος του υγροποιούμενου ατμού. Βάσει των παραπάνω, η σχέση (3.8) γράφεται:

$$\frac{\chi M' dt}{\rho_g^I} + \frac{(1-\chi) M' dt}{\rho_w^I} - \frac{dx_f A \Delta T \left[ (1-n) \rho_s C_R + n S_w'' \rho_w'' C_w \right]}{h_{vap}^w \rho_g^I} = dx_f An S_n'' \quad (3.10)$$

Διαιρώντας την σχέση (3.10) με  $dt$  και επιλύοντας ως προς  $V_f = dx_f / dt$ , προκύπτει η έκφραση για την ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου  $V_f$ :

$$V_f = \frac{\left[ \frac{\chi M'}{\rho_g^I} + \frac{(1-\chi)M'}{\rho_w^I} \right]}{\frac{A(T_s - T_o)}{h_{vap}^w \rho_g^I} \left[ (1-n)\rho_s C_R + nS_w'' \rho_w'' C_w \right] + AnS_n''} \quad (3.11)$$

Αξίζει να επισημάνουμε ότι βάσει της σχέσης (3.11), η ταχύτητα κίνησης του μετώπου εξαρτάται από την ανηγμένη ανά μονάδα επιφάνειας παροχή μίγματος νερού-υδρατμού ( $M'/A$ ), την ποιότητα  $\chi$  του μίγματος, το πορώδες  $n$ , την ειδική θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων του εδάφους  $C_R$ , την αρχική κατανομή των βαθμών κορεσμού, την αρχική θερμοκρασία και τέλος την αρχική πίεση της αέριας φάσης  $P_o$ . Βάσει της πίεσης  $P_o$  προσδιορίζονται, από τους πίνακες ιδιοτήτων νερού-υδρατμού, αφενός η θερμοκρασία κορεσμού  $T_s$  και αφετέρου οι ιδιότητες των ρευστών στη Ζώνη I, καθώς επίσης και η ειδική θερμότητα εξάτμισης του νερού.

Εν συνεχεία θα υπολογίσουμε τον μέσο βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου. Για τον βαθμό κορεσμού ανάντη του μετώπου θα ισχύει:

$$S_w^I = S_w^o + \Delta S_w^c + \Delta S_w^{(1-x)}, \quad (3.12)$$

όπου:  $\Delta S_w^c$ : Η αύξηση του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης λόγω υγροποίησης του υδρατμού

$\Delta S_w^{(1-x)}$ : Η αύξηση του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης λόγω εισροής νερού, για  $\chi < 1$

Προκειμένου να υπολογίσουμε το  $\Delta S_w^c$  διαιρούμε τη μάζα των υδρατμών που υγροποιούνται για θέρμανση εδαφικής στήλης μήκους  $dx_f$  με την πυκνότητα του νερού στη Ζώνη I, και κατόπιν με τον όγκο των κενών στο αντίστοιχο μήκος εδαφικής στήλης. Τελικώς προκύπτει:

$$\Delta S_w^c = \frac{(T_s - T_o) \left[ (1-n)\rho_s C_R + nS_w'' \rho_w'' C_w \right]}{h_{vap}^w \rho_w^I n} \quad (3.13)$$

Ο όρος  $\Delta S_w^{(1-x)}$  προκύπτει διαιρώντας τον όγκο του νερού που εισρέει σε χρόνο  $dt$  με τον όγκο των κενών σε μήκος εδαφικής στήλης ίσο με  $dx_f$ . Προκύπτει ότι:

$$\Delta S_w^{(1-x)} = \frac{(1-\chi)M'}{AnV_f \rho_w^I} \quad (3.14)$$

Τελικώς, βάσει των σχέσεων (3.12), (3.13) και (3.14) ο μέσος βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου υπολογίζεται ως:

$$S_w^I = S_{wr} + \frac{(T_s - T_o) \left[ (1-n) \rho_s C_R + n S_w^H \rho_w^H C_w \right]}{h_{vap}^w \rho_w^I n} + \frac{(1-\chi) M'}{An V_f \rho_w^I} \quad (3.15)$$

### 3.3.3 Μεθοδολογία

Η σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων της αναλυτικής και αριθμητικής λύσης, για το σύνολο των υπό εξέταση εδαφών, πραγματοποιήθηκε για τρία διαφορετικά σενάρια αρχικών/συνοριακών συνθηκών B1, B2 και B3. Οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες ως προς τις οποίες διαφοροποιούνται τα σενάρια αυτά, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-7.

**Πίνακας 3-7 Εισπίεση ατμού: Σενάρια σύγκρισης αναλυτική λύσης και αριθμητικής προσομοίωσης.**

Παράμετρος	Σενάριο B1	Σενάριο B2	Σενάριο B3
Αρχική Πίεση Αερίου (atm)	1.00	1.00	<b>1.50</b>
Ποιότητα Ατμού $\chi$	1.00	<b>0.75</b>	1.00
Παροχή Μίγματος Υδρατμών (kg/day)	10.0	10.0	10.0

Για κάθε ένα από τα παραπάνω σενάρια, υπολογίστηκε η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου, καθώς επίσης και ο παραμένων βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου, σύμφωνα με την αναλυτική λύση που παρουσιάστηκε στο εδάφιο 3.3.2. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-8.

Εν συνεχεία, για κάθε ένα από τα παραπάνω σενάρια, πραγματοποιήθηκαν αριθμητικές προσομοιώσεις με χρήση του λογισμικού T2VOC. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε σενάριο πραγματοποιήθηκαν τρεις αριθμητικές προσομοιώσεις, μία για κάθε ένα από τα εξεταζόμενα εδάφη. Τα δεδομένα εισόδου στο λογισμικό T2VOC παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-9, ενώ τα επιμέρους εδαφικά χαρακτηριστικά που αφορούν την τριχοειδή πίεση, την απόλυτη και σχετική διαπερατότητα, λήφθηκαν από τον Πίνακα 3-2.



**Πίνακας 3-8 Απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού:  
Δεδομένα για την εφαρμογή της αναλυτικής λύσης.**

Δεδομένα	Σενάριο B1	Σενάριο B2	Σενάριο B3
Παροχή Υδρατμού $M'$ (kg/day)	10	10	10
Επιφάνεια Διατομής $A$ (m <sup>2</sup> )	0.04	0.04	0.04
Ποιότητα Ατμού $\chi$	1.00	<b>0.75</b>	1.00
Αρχική Πίεσης Αέριας Φάσης $P_o$ (atm)	1.00	1.00	<b>1.50</b>
Αρχική Θερμοκρασία $T_o$ (°C)	20	20	20
Θερμοκρασία Κορεσμού $T_s$ (°C)	100	100	111
Θερμοκτικότητα Υδατικής Φάσης $C_w$ (kJ/kgK)	4.20	4.20	4.20
Θερμοκτικότητα Στερεών Κόκκων $C_R$ (kJ/kgK)	1000	1000	1000
Πυκνότητα Στερεών Κόκκων $\rho_s$ (kg/m <sup>3</sup> )	2650	2650	2650
Πορώδες $n$	0.46	0.46	0.46
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_w^H$	0.12	0.12	0.12
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού TCE $S_n^H$	0.87	0.87	0.87
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Αέρα, $S_g^H$	0.01	0.01	0.01

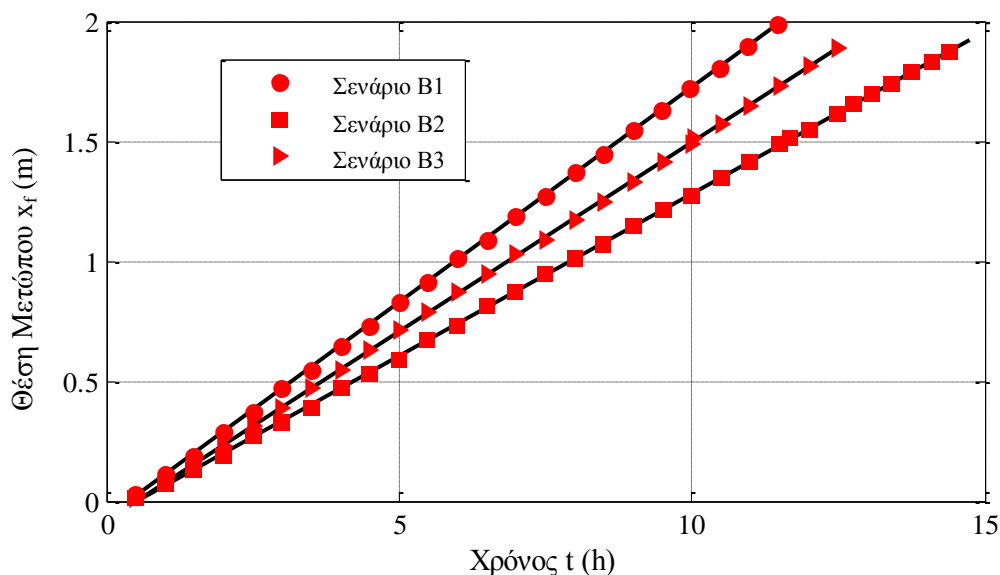
Τα χαρακτηριστικά της αέριας και υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου, λήφθηκαν από τον Πίνακα 2-3 για αρχική πίεση  $P_o$  ίση με 1 και 1.5 atm.

**Πίνακας 3-9 Παράμετροι εισόδου (T2VOC) για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού.**

Παράμετρος	Σενάριο B1	Σενάριο B2	Σενάριο B3
Παροχή Μίγματος Υδρατμών $M'$ (kg/day)	10.0	10.0	10.0
Ειδική Ενθαλπία Μίγματος Υδρατμών $h$ (kJ/kg)	<b>2676</b>	<b>2112</b>	<b>2694</b>
Επιφάνεια Διατομής $A$ (m <sup>2</sup> )	0.04	0.04	0.04
Αρχική Θερμοκρασία $T_o$ (°C)	20.0	20.0	20.0
Αρχική Πίεσης Αέριας Φάσης $P_o$ (atm)	<b>1.00</b>	<b>1.00</b>	<b>1.50</b>
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_w^o$	0.12	0.12	0.12
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_n^o$	0.87	0.87	0.87
Πίεση Εξόδου Αέριας Φάσης $P_{wb}=P_o$ (atm)	1.00	1.00	1.50
Θερμοκτικότητα Στερεών Κόκκων $C_R$ (kJ/kgK)	1000	1000	1000
Πυκνότητα Στερεών Κόκκων $\rho_s$ (kg/m <sup>3</sup> )	2650	2650	2650
Πορώδες $n$	0.46	0.46	0.46

Αξίζει να σημειωθεί ότι μεταξύ της αναλυτικής λύσης και του λογισμικού T2VOC, υπάρχει πλήρης αντιστοιχία μεταξύ των δεδομένων εισόδου. Στην αναλυτική λύση εισάγεται η ποιότητα  $\chi$  του μίγματος υδρατμών, ενώ στο λογισμικό T2VOC χρησιμοποιείται ως αντίστοιχη παράμετρος η ειδική ενθαλπία του μίγματος που υπολογίζεται βάσει της ποιότητας  $\chi$  από τη σχέση (1.47). Επιπρόσθετα, στο λογισμικό εισάγεται η αρχική πίεση  $P_0$  βάσει της οποίας υπολογίζονται οι ιδιότητες τόσο του νερού όσο και του ατμού (π.χ. πυκνότητα, συνεκτικότητα κτλ). Κατ' αντιστοιχία, στην περίπτωση της αναλυτικής λύσης οι αντίστοιχες ιδιότητες λαμβάνονται από τους πίνακες ιδιοτήτων του νερού για δεδομένη αρχική πίεση  $P_0$ . Η συνοριακή συνθήκη και στις δύο περιπτώσεις είναι ίδια καθώς δύναται να εκρεύσει αποκλειστικά η μη υδατική φάση.

Για κάθε μία από τις εννέα προσομοιώσεις, υπολογίσθηκε η θέση του μετώπου ανά μισή ώρα εξέλιξης του φαινομένου. Ως θέση του μετώπου τη χρονική στιγμή  $t$ , ορίστηκε η τετμημένη του πεπερασμένου όγκου στον οποίο ο βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης είναι μηδενικός ενώ, στον αμέσως επόμενο πεπερασμένο όγκο ο βαθμός κορεσμού του TCE είναι μεγαλύτερος του μηδενός. Με τον τρόπο αυτό υπολογίζεται η θέση του μετώπου τη χρονική στιγμή  $t$ . Στη συνέχεια, για κάθε προσομοίωση, κατασκευάστηκε το διάγραμμα χρόνου-θέσης του μετώπου. Στο Σχήμα 3-11 παρουσιάζεται ενδεικτικά το εν λόγω διάγραμμα για τη λεπτόκοκκη άμμο.



Σχήμα 3-11 Εισπίεση ατμού σε εδαφική στήλη: Διάγραμμα χρόνου – θέσης μετώπου (T2VOC) για τη λεπτόκοκκη άμμο. Σενάρια αρχικών συνθηκών B1, B2 και B3.

Στη συνέχεια, υπολογίστηκε η ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης με τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων καθώς επίσης και ο συντελεστής γραμμικής συσχέτισης των μεταβλητών χρόνου και θέσης του μετώπου. Ο συντελεστής γραμμικής συσχέτισης ήταν μεγαλύτερος από 0.997 για το σύνολο των προσομοιώσεων, που καταδεικνύει ισχυρή γραμμική συσχέτιση μεταξύ των μεταβλητών αυτών. Η ταχύτητα κίνησης του μετώπου υπολογίστηκε ως η κλίση (slope) της ευθείας αυτής καθότι  $V_f = dx_f/dt$ . Στο Σχήμα 3-11 παρατηρούμε ότι ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης δεν διέρχεται από την αρχή των αξόνων. Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι απαιτείται μικρό χρονικό διάστημα (της τάξης των 20 λεπτών, Σχήμα 3-11) προκειμένου το μέτωπο να αρχίσει να κινείται με σταθερή ταχύτητα.

Η αναλυτική λύση, όπως παρουσιάστηκε προηγουμένως, υπολογίζει τον μέσο βαθμό κορεσμού του νερού ανάντη του θερμικού μετώπου για τυχούσα χρονική στιγμή. Προκειμένου να συγκριθεί η τιμή αυτή με τα δεδομένα εξόδου του λογισμικού υπολογίστηκε, για κάθε σενάριο σύγκρισης, ο μέσος βαθμός κορεσμού του νερού ανάντη του θερμικού μετώπου ανά μισή ώρα εξέλιξης του φαινομένου, και κατόπιν η μέση τιμή των τιμών αυτών για το σύνολο των χρονικών στιγμών.

Πιο συγκεκριμένα, για κάθε μία από τις εννέα στον αριθμό αριθμητικές προσομοιώσεις, ο υπολογισμός του μέσου βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου υπολογίστηκε ως εξής: για κάθε χρονική στιγμή  $t_1, t_2, \dots, t_{k-1}, t_k$  για την οποία είναι γνωστός ο αύξων αριθμός του πεπερασμένου όγκου στον οποίο βρίσκεται το μέτωπο, έστω  $n_1, n_2, \dots, n_{k-1}, n_k, 0 < n < 100$  υπολογίστηκε ο μέσος βαθμός κορεσμού ανάντη του μετώπου:

$$\bar{s}_w^j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} S_w^i}{n_j}, \quad j=1,2,\dots,k-1,k, \quad (3.16)$$

Στην παραπάνω σχέση με  $S_w^i$  συμβολίζεται ο βαθμός κορεσμού του νερού στον  $i$ -στό πεπερασμένο όγκο.

Εν συνεχεία, ο μέσος βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης ορίστηκε ως ο μέσος βαθμός κορεσμού ανάντη του μετώπου για το σύνολο των χρονικών στιγμών  $t_1, t_2, \dots, t_{k-1}, t_k$ , δηλαδή:

$$\bar{S}_w^{up} = \frac{\sum_{j=1}^k \bar{s}_w^j}{k} \quad (3.17)$$

Τόσο για τον υπολογισμό της ταχύτητας κίνησης του μετώπου όσο και για τον υπολογισμό του μέσου βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη αυτού, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα `steam_front`, το οποίο επισυνάπτεται στο παράρτημα.

### 3.3.4 Σύγκριση αποτελεσμάτων αναλυτικής μεθόδου και αριθμητικής προσομοίωσης

Τα αποτελέσματα υπολογισμού της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου και του μέσου βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου, όπως προέκυψαν από την αναλυτική και αριθμητική επίλυση παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-10. Στον ίδιο πίνακα, παρουσιάζεται και η απόκλιση σε ποσοστό επί τοις εκατό, των αποτελεσμάτων της αναλυτικής μεθόδου από αυτά της αριθμητικής προσομοίωσης, θεωρώντας τα τελευταία ως πιο αξιόπιστα.

**Πίνακας 3-10 Εισπίεση ατμού σε εδαφική στήλη. Αποτελέσματα αναλυτικής λύσης και αριθμητικής προσομοίωσης για τα σενάρια σύγκρισης B1, B2 και B3.**

Σενάριο	Έδαφος	Ταχύτητα θερμικού μετώπου $V_f$ (m/day)		Απόκλιση	Μέσος βαθμός κορεσμού νερού ανάντη του μετώπου		Απόκλιση
		(T2VOC)	(Αναλυτική)		(T2VOC)	(Αναλυτική)	
B1 $P_o=1\text{atm}$ $\chi=1.00$	I	4.27		0.9%	0.260		2.3%
	II	4.31	4.23	1.9%	0.248	0.254	2.4%
	III	4.20		0.7%	0.264		3.8%
B2 $P_o=1\text{atm}$ $\chi=0.75$	I	3.07		3.3%	0.298		0.0%
	II	3.24	3.17	2.2%	0.283	0.298	1.5%
	III	3.16		0.3%	0.296		0.7%
B3 $P_o=1.5\text{atm}$ $\chi=1.00$	I	3.56		2.2%	0.283		2.5%
	II	3.77	3.64	3.4%	0.259	0.276	6.5%
	III	3.68		1.1%	0.277		0.4%

Από τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων, καθίσταται εμφανές ότι η αναλυτική μέθοδος υπολογίζει με σημαντική ακρίβεια τόσο την ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου όσο και τον μέσο βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη αυτού. Πιο συγκεκριμένα, για τα σενάρια αρχικών και συνοριακών συνθηκών που εξετάστηκαν, η μέγιστη απόκλιση της αναλυτικής μεθόδου για τον υπολογισμό της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου προέκυψε ίση με 3.4%, ενώ για τον υπολογισμό του μέσου βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου η μέγιστη απόκλιση ήταν ίση με 6.5%. Το μικρό σφάλμα της αναλυτικής μεθόδου μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι αυτή προέκυψε με χρήση δύο πλήρως ντετερμινιστικών σχέσεων: της εξίσωσης συνέχειας και της εξίσωσης ενέργειας.

Συγκρίνοντας την ταχύτητα κίνησης του μετώπου για τα σενάρια αρχικών και συνοριακών συνθηκών B1 και B3, προκύπτει ότι στο Σενάριο B3, όπου η αρχική πίεση του αερίου είναι μέγιστη και ίση με 1.5 atm, η ταχύτητα κίνησης του μετώπου εμφανίζεται μειωμένη κατά 14%. Προκειμένου να ερμηνεύσουμε τη μείωση αυτή, θα επανέλθουμε στην αναλυτική εξίσωση υπολογισμού της ταχύτητας του μετώπου. Προς ευκολία του αναγνώστη, η σχέση αυτή παρατίθεται στη συνέχεια:

$$V_f = \frac{\left[ \frac{\chi M'}{\rho_g^I} + \frac{(1-\chi)M'}{\rho_w^I} \right]}{\frac{A(T_s - T_o)}{h_{vap}^w \rho_g^I} \left[ (1-n)\rho_s C_R + nS_w'' \rho_w'' C_w \right] + AnS_w''} \quad (3.18)$$

Η θερμοκρασία κορεσμού  $T_s$  είναι συνάρτηση της πίεσης κορεσμού. Συγκεκριμένα αυξανόμενη της αρχικής πίεσης  $P_o$  του αερίου, και κατ'επέκτασιν της πίεσης κορεσμού, η θερμοκρασία κορεσμού  $T_s$  αυξάνεται με αποτέλεσμα τη μείωση του παρονομαστή της παραπάνω σχέσης. Ακόμα, η ειδική ενθαλπία  $h_{vap}$  εξάτμισης του νερού είναι φθίνουσα συνάρτηση της πίεσης (Schmidt, 1982). Τα παραπάνω δικαιολογούν ότι αυξανόμενη της αρχικής πίεσης, η ταχύτητα κίνησης του μετώπου βαίνει μειούμενη. Η σημασία της παρατήρησης αυτής είναι ότι καθώς αυξάνεται το βάθος κάτω από τη στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα, η πίεση της υδατικής και κατά συνέπεια της αέριας φάσης αυξάνεται ( $P_g = P_w + P_{cgw}$ ) με αποτέλεσμα τη μείωση της ταχύτητας κίνησης του μετώπου, για δεδομένη παροχή και ποιότητα μίγματος υδρατμών.

Τέλος, παρατηρούμε ότι σε κάθε ένα από τα σενάρια αρχικών/συνοριακών συνθηκών που εξετάστηκαν, η μεταβολή της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου από έδαφος σε έδαφος είναι πρακτικά ασήμαντη. Λαμβάνοντας ακόμα υπόψη ότι τα εξεταζόμενα εδάφη διαφέρουν αποκλειστικά ως προς τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης και διαπερατότητας, συμπεραίνουμε ότι η ταχύτητα κίνησης του μετώπου στην περίπτωση εισπίεσης ατμού είναι πρακτικά ανεξάρτητη από τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης και περατότητας του εδάφους. Από τη σχέση υπολογισμού της ταχύτητας κίνησης του θερμικού μετώπου και λαμβάνοντας υπόψη την ακρίβεια της σχέσης αυτής, προκύπτει ότι τα εδαφικά χαρακτηριστικά που επιδρούν στη ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου είναι αφενός το πορώδες  $n$  και αφετέρου η ειδική θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων  $C_R$ . Αυτό επιβεβαιώθηκε με πρόσθετες αριθμητικές προσομοιώσεις για διάφορες τιμές πορώδους και θερμοχωρητικότητας των στερεών κόκκων.

### 3.4 Σύγκριση μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού

Στις προηγούμενες παραγράφους πραγματοποιήθηκε σύγκριση μεταξύ των αναλυτικών και αριθμητικών λύσεων για την περίπτωση της εισπίεσης νερού και ατμού αντίστοιχα. Στη παρούσα παράγραφο θα εξετασθεί, με χρήση του λογισμικού T2VOC, η επίδοση των μεθόδων για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης μάζας TCE ίσου με 75 και 80%, σε όρους απαιτούμενου χρόνου αλλά και ενέργειας. Για τον σκοπό αυτό, χρησιμοποιήθηκαν οι ήδη πραγματοποιηθείσες προσομοιώσεις για την περίπτωση εισπίεσης νερού (Σενάριο A2, εδάφιο 3.2.1) καθώς και μία νέα σειρά προσομοιώσεων για την περίπτωση της εισπίεσης ατμού.

#### 3.4.1 Σύγκριση του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης στήλης μεταξύ των μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού

Στο εδάφιο αυτό, θα συγκριθεί ο απαιτούμενος χρόνος για την απορρύπανση της εδαφικής στήλης που εξετάστηκε στις δύο προηγούμενες παραγράφους. Ο αρχικός βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης, σε κάθε μία από τις περιπτώσεις που ήδη εξετάστηκαν ήταν ίσος με 0.87. Δεδομένου του μήκους, της επιφάνειας διατομής της εδαφικής στήλης, αλλά και του πορώδους, η συνολική μάζα της μη υδατικής φάσης (TCE) εντός της στήλης υπολογίστηκε ίση με 46.74kg.

Προκειμένου να υπολογισθεί, και κατόπιν να συγκριθεί, ο απαιτούμενος χρόνος απορρύπανσης εδαφικής στήλης με τη μέθοδο εισπίεσης νερού και ατμού αντίστοιχα, θα πρέπει αρχικώς να καθοριστεί το επιδιωκόμενο ποσοστό απομάκρυνσης μάζας TCE από την εδαφική στήλη. Επιλέγουμε να εξετάσουμε τις εν λόγω μεθόδους για την επίτευξη ποσοστού απομάκρυνσης μάζας ίσου με 75 και 80%, θεωρώντας ότι τα ποσοστά αυτά αντιστοιχούν σε σημαντική απομάκρυνση μάζας TCE.

Εν συνεχεία, προκειμένου να συγκριθεί ο απαιτούμενος χρόνος, θα πρέπει να προσδιοριστεί το κοινό εκείνο χαρακτηριστικό των μεθόδων, ως προς το οποίο θα πραγματοποιηθεί η σύγκριση. Η σύγκριση θα μπορούσε δυνητικά να πραγματοποιηθεί για ίδιο ρυθμό εισπίεσης νερού/ατμού σε όρους μάζας ή ίδια παροχή νερού/ατμού σε όρους όγκου. Επειδή όμως οι πυκνότητες των δύο ρευστών διαφέρουν σημαντικά, οι επιλογές αυτές κρίνονται ακατάλληλες. Δεδομένου ότι έχουμε ήδη μελετήσει την ταχύτητα κίνησης του μετώπου για κάθε μία από τις εν λόγω μεθόδους, αποφασίζουμε να πραγματοποιήσουμε τη σύγκριση για ίδια ταχύτητα κίνησης μετώπου.

Στο εδάφιο 3.2.3 για παροχή εισπίεσης νερού ίση με 50L/day (Σενάριο A2) η ταχύτητα κίνησης του μετώπου, υπολογίστηκε, σύμφωνα με την αναλυτική λύση Buckley-Leverett, ίση με 4.47 m/day. Βάσει της αναλυτικής σχέσης (3.11), υπολογίζουμε την απαιτούμενη παροχή κορεσμένου υδρατμού  $M'$  προκειμένου η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου να είναι και αυτή ίση με 4.47m/day. Για αρχική πίεση  $P_o$  ίση με 1 atm και ποιότητα ατμού  $\chi=1$ , η ζητούμενη παροχή βρέθηκε ίση με 10.57 kg/day.

Για τον υπολογισμό του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης, πραγματοποιήθηκαν δύο σειρές προσομοιώσεων. Η πρώτη σειρά προσομοιώσεων (C1) αφορά την εισπίεση νερού για το σύνολο των τριών εδαφών και είναι ίδια με το Σενάριο A2 που εξετάστηκε στη παράγραφο 3.2. Η δεύτερη σειρά προσομοιώσεων (C2) αφορά την εισπίεση ατμού, ομοίως, για το σύνολο των υπό εξέταση εδαφών. Πραγματοποιήθηκαν δηλαδή έξι στο σύνολο αριθμητικές προσομοιώσεις. Στον Πίνακα 3-11 παρουσιάζονται τα δεδομένα εισόδου στο λογισμικό T2VOC για τις σειρές προσομοιώσεων C1 και C2. Τα επιμέρους εδαφικά χαρακτηριστικά λαμβάνονται από τον Πίνακα 3-2.

**Πίνακας 3-11 Παράμετροι εισόδου (T2VOC) για τον υπολογισμό του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης εδαφικής στήλης με τη μέθοδο εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού.**

Παράμετρος	Σειρά Προσομοιώσεων C1: Εισπίεση Νερού (Ίδια δεδομένα εισόδου με Σενάριο A2 §3.2)
Παροχή Εισπίεσης Νερού (L/day)	50.0
Αρχική Θερμοκρασία $T_o$ (°C)	20.0
Αρχική Πίεση Αέριας Φάσης $P_o$ (atm)	1.00
Αρχική Συγκέντρωση Αέρα στην Υδατική Φάση $C_w^a$	0.00
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_w^o$	0.13
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_n^o$	0.87
Πίεση Εξόδου Αέριας Φάσης (atm)	1.00
Ισοδιάσταση $\Delta x$ (m)	0.01
Παράμετρος	Σειρά Προσομοιώσεων C2: Εισπίεση Ατμού
Παροχή Μίγματος Υδρατμών $M'$ (kg/day)	10.57
Ειδική Ενθαλπία Μίγματος Υδρατμών (kJ/kg)	2676
Αρχική Θερμοκρασία $T_o$ (°C)	20.0
Αρχική Πίεση Αέριας Φάσης $P_o$ (atm)	1.00
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού Νερού, $S_w^o$	0.12
Αρχικός Βαθμός Κορεσμού TCE, $S_n^o$	0.01
Πίεση Εξόδου Αέριας Φάσης $P_{wb}=P_o$ (atm)	1.00
Ισοδιάσταση $\Delta x$ (m)	0.02

Για το σύνολο των ανωτέρω προσομοιώσεων, υπολογίστηκε ανά χρονικό διάστημα μισής ώρας το αθροιστικό ποσοστό απομάκρυνσης μάζας TCE από την εδαφική στήλη.

Τη χρονική στιγμή  $t_j$  η μάζα του TCE εντός της στήλης υπολογίστηκε ως:

$$M_{TCE}(t_j) = \sum_{i=1}^{nx} [S_n^i(t_j) \cdot \Delta V \cdot n \cdot \rho_{TCE}] \quad (3.19)$$

όπου:  $S_n^i(t_j)$ : ο βαθμός κορεσμού του TCE τη χρονική στιγμή  $t_j$  στον διαφορικό όγκο  $i$

$\Delta V$ : ο όγκος του διαφορικού όγκου  $i$

$nx$ : ο αριθμός των διαφορικών όγκων κατά μήκος της στήλης.

Το ποσοστό απομάκρυνσης μάζας τη χρονική στιγμή  $t_j$  υπολογίστηκε ως:

$$P(t_j) = 1 - \frac{M_{TCE}(t_j)}{M_{TCE}(t=0)} \quad (3.20)$$

Για κάθε μία από τις εννέα προσομοιώσεις, υπολογίστηκε από τα δεδομένα χρόνου - βαθμού απομάκρυνσης μάζας, ο απαιτούμενος χρόνος για την απομάκρυνση ποσοστού μάζας 75 και 80% αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στον Πίνακα 3-12.

**Πίνακας 3-12 Απαιτούμενος χρόνος εφαρμογής των μεθόδων εισπίεσης νερού/ατμού για την απομάκρυνση 75 και 80% της μάζας του DNAPL από την εδαφική στήλη**

Σειρά Προσομοιώσεων C1: Εισπίεση Νερού ( $q_{inj}^w=50L/day$ )			
Έδαφος	Χαρακτηρισμός	Απαιτούμενος χρόνος (h) για ποσοστό απομάκρυνσης:	
		75%	80%
I	Χονδρόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	18.84	35.34
II	Λεπτόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	16.75	31.98
III	Μέση Άμμος, Καλώς Διαβαθμισμένη	18.80	35.54
Σειρά Προσομοιώσεων C2: Εισπίεση Ατμού ( $M'=10.57kg/day$ )			
Έδαφος	Χαρακτηρισμός	Απαιτούμενος χρόνος (h) για ποσοστό απομάκρυνσης:	
		75%	80%
I	Χονδρόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	7.95	8.48
II	Λεπτόκοκκη Άμμος, Κακώς Διαβαθμισμένη	7.84	8.33
III	Μέση Άμμος, Καλώς Διαβαθμισμένη	8.07	8.57



Στον Πίνακα 3-12, συγκρίνοντας τα εδάφη II και III για την περίπτωση της εισπίεσης νερού, παρατηρούμε ότι το κακώς διαβαθμισμένο έδαφος απορρυπαίνεται γρηγορότερα από το καλώς διαβαθμισμένο έδαφος. Πιο συγκεκριμένα, ο απαιτούμενος χρόνος απορρύπανσης είναι κατά 12% μεγαλύτερος στην περίπτωση της καλώς διαβαθμισμένης άμμου. Η σύγκριση αυτή έχει νόημα καθώς τα εδάφη αυτά έχουν την ίδια υδραυλική αγωγιμότητα. Προκειμένου να δώσουμε μια φυσική ερμηνεία στη διαφορά αυτή θα πρέπει να λάβουμε υπόψη μας ότι τα καλώς διαβαθμισμένα εδάφη χαρακτηρίζονται από μεγάλο εύρος διαμέτρου πόρων. Κατά την εισπίεση νερού σε ένα αρχικά ρυπασμένο, όπως στην περίπτωση μας, καλώς διαβαθμισμένο έδαφος, το νερό ρέει επιλεκτικά από τους διαθέσιμους πόρους με αποτέλεσμα να παρακάμπτει τους πόρους στους οποίους παραμένει εγκλωβισμένη η μη υδατική φάση<sup>1</sup>. Αντίθετα, στο κακώς διαβαθμισμένο έδαφος, το οποίο χαρακτηρίζεται από ομοιογένεια σε ότι αφορά τη διάμετρο των πόρων, το νερό εκτοπίζει ομοιόμορφα τη μη υδατική φάση και για τον λόγο αυτό το κακώς διαβαθμισμένο έδαφος απορρυπαίνεται γρηγορότερα.

Αντίθετα, στην περίπτωση της εισπίεσης ατμού, για δεδομένη παροχή εισπίεσης, η διαφορά στον απαιτούμενο χρόνο απορρύπανσης για το σύνολο των τριών εδαφών δεν υπερβαίνει το 3% και για τα δύο υπό εξέταση ποσοστά απομάκρυνσης μάζας. Με άλλα λόγια, στην εισπίεση ατμού, για δεδομένη παροχή ατμού, η ταχύτητα απορρύπανσης είναι ανεξάρτητη από τη περατότητα και τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης του εδάφους. Δεδομένου ότι ο ρυθμός απομάκρυνσης μάζας εξαρτάται από την ταχύτητα του θερμικού μετώπου, καθώς στα ανάντη αυτού ο βαθμός κορεσμού του TCE είναι μηδενικός, και σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν στο εδάφιο 3.3.4, η ταχύτητα απορρύπανσης εξαρτάται και αυτή από το πορώδες και τη θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων.

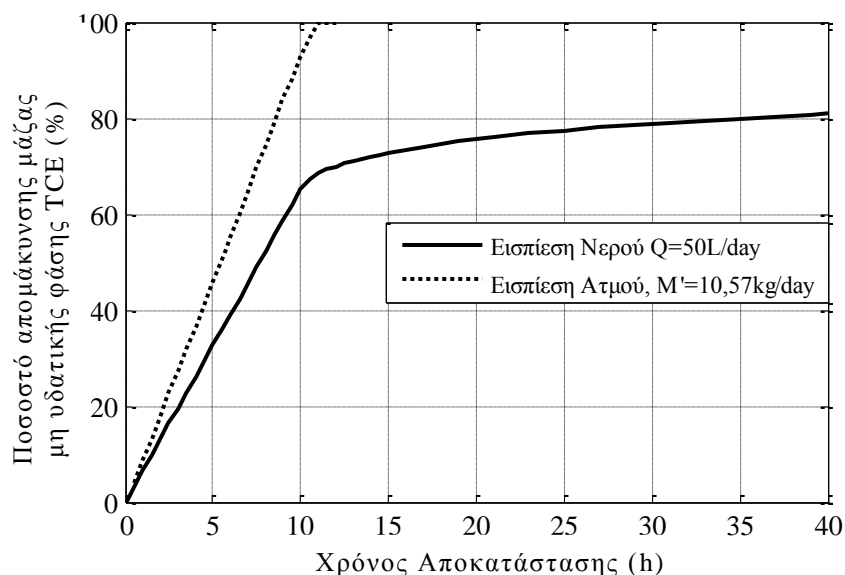
Παρατηρούμε ότι στην εισπίεση νερού, για αύξηση του ποσοστού απομάκρυνσης από 75 σε 80% απαιτείται διπλασιασμός, σχεδόν, του χρόνου απορρύπανσης. Αυτό είναι ήδη γνωστό από τον κλάδο της μηχανικής πετρελαίων (Ahmed, 2006), (Σταματάκη, 2006), όπου κατά το στάδιο της δευτερογενούς παραγωγής πετρελαίου<sup>2</sup>, η αποδοτικότητα των γεωτρήσεων μειώνεται σημαντικά μετά την άφιξη του μετώπου στο παραγωγικό πηγάδι, οπότε και η

---

<sup>1</sup> Αυτό αποδίδεται στα φαινόμενα «snap-off» και «by-passing» (Pinder & Gray, 2008) τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί από τους ερευνητές προκειμένου να ερμηνεύσουν την αύξηση του παραμένου βαθμού κορεσμού της μη υδατικής φάσης στην περίπτωση των καλώς διαβαθμισμένων εδαφών. Τα εδάφη αυτά χαρακτηρίζονται ακόμα από σημαντικό λόγο διαμέτρου πόρων (aspect ratio) που ενισχύει το προαναφερθέντα φαινόμενα.

<sup>2</sup> Το στάδιο κατά το οποίο η παραγωγή πετρελαίου πραγματοποιείται με εισπίεση νερού στον ταμειυτήρα (waterflooding) (Σταματάκη, 2006).

παραγωγή, (στην περίπτωση μας η απορρύπανση) καθίσταται αντοικονομική (Ahmed, 2006), (Σταματάκη, 2006). Στο Σχήμα 3-12 παρουσιάζεται ενδεικτικά το ποσοστό απομάκρυνσης μάζας συναρτήσει του χρόνου απορρύπανσης για την καλώς διαβαθμισμένη άμμο.



Σχήμα 3-12 Συγκριτικό Διάγραμμα χρόνου-ποσοστού απομάκρυνσης DNAPL για την απορρύπανση της καλώς διαβαθμισμένης άμμου με εισπίεση νερού και εισπίεση ατμού.

Στο Σχήμα 3-12 είναι εμφανής η μείωση του ρυθμού απομάκρυνσης μάζας TCE μετά την άφιξη του μετώπου στο πέρας της στήλης ( $t=10h$ ) για την εισπίεση νερού. Για την επίτευξη σημαντικού ποσοστού απομάκρυνσης μάζας ( $>75\%$ ) η εισπίεση νερού απαιτεί σημαντικά περισσότερο χρόνο, σε σύγκριση με την εισπίεση ατμού. Μάλιστα η διάσταση στον απαιτούμενο χρόνο εφαρμογής των μεθόδων μεγαλώνει καθώς το επιδιωκόμενο ποσοστό απομάκρυνσης μάζας αυξάνεται. Η μειωμένη επίδοση της εισπίεσης νερού αποδίδεται στην επίδραση των τριχοειδών δυνάμεων που συνεπάγεται κατακράτηση σημαντικής ποσότητας μη υδατικής φάσης TCE ανάντη του μετώπου. Αντίθετα, στην εισπίεση ατμού, οι τριχοειδείς δυνάμεις δεν επηρεάζουν την επίδοση της μεθόδου, ο βαθμός κορεσμού του TCE ανάντη του θερμικού μετώπου είναι μηδενικός και συνεπώς κατά την άφιξη του θερμικού μετώπου στο πέρας της στήλης έχει επιτευχθεί 100% απομάκρυνση του TCE. Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος επιτυγχάνει ολική απομάκρυνση μάζας TCE σε χρονικό διάστημα μόλις 10 ωρών.

Παρατηρούμε ότι παρόλο που επιλέξαμε την ταχύτητα κίνησης του μετώπου κατά την εισπίεση νερού να είναι ίση με την ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου, η κλίση του διαγράμματος χρόνου-απομάκρυνσης μάζας είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση της εισπίεσης ατμού. Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι ανάντη του θερμικού μετώπου, ο βαθμός κορεσμού της μη υδατικής φάσης είναι μηδενικός, πράγμα που καθιστά την εκτόπιση «τέλεια» και αυξάνει σημαντικά την επίδοση της μεθόδου έναντι της εισπίεσης νερού.

### 3.4.2 Σύγκριση των μεθόδων σε όρους απαιτούμενου έργου

Στο παρόν εδάφιο θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των δύο μεθόδων σε όρους ενέργειας. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε μέθοδο, θα υπολογισθεί η απαιτούμενη ισχύς καθώς επίσης και η απαιτούμενη ενέργεια για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης μάζας TCE ίσου με 75% για την περίπτωση της εδαφικής στήλης που εξετάστηκε προηγουμένως. Η ενεργειακή αυτή σύγκριση θα εφαρμοστεί δηλαδή σε διάταξη πειραματικής/εργαστηριακής κλίμακας και θα χρησιμοποιηθούν τα αποτελέσματα των αριθμητικών προσομοιώσεων, όπως αυτά προέκυψαν από το προηγούμενο εδάφιο. Τα ενεργειακά μεγέθη που υπολογίζονται, αν και ασήμαντα σε όρους ενέργειας ή κόστους, καταδεικνύουν τη διαφορά σε απαιτήσεις ενέργειας που υφίσταται μεταξύ των μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού.

Για την περίπτωση της εισπίεσης νερού, θεωρήθηκε υψομετρική διαφορά  $\Delta z^1$  ίση με ένα μέτρο, ενώ η μέγιστη (σχετική) πίεση της υδατικής φάσης στο σημείο εισπίεσης βρέθηκε ίση με 0.375 cm H<sub>2</sub>O για το λεπτόκοκκο έδαφος. Κατά συνέπεια, το συνολικό μανομετρικό ύψος της αντλίας ισούται με 1.375 m. Λόγω της μικρής παροχής νερού (50L/day) οι γραμμικές απώλειες στον αγωγό αμελούνται. Εφαρμόζοντας την εξίσωση Bernoulli, και για παροχή ίση με 50L/day η απαιτούμενη ισχύς προκύπτει ίση με 680J/day, πρακτικώς ασήμαντη αφενός λόγω της μικρής παροχής και αφετέρου λόγω του μικρού μανομετρικού ύψους. Λαμβάνοντας υπόψη ότι απαιτούνται 19 περίπου ώρες εισπίεσης για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης ίσου με 75%, η απαιτούμενη ενέργεια προκύπτει ίση με 538J.

Στην εισπίεση ατμού, η συνολική απαιτούμενη ισχύς ισούται με το άθροισμα αφενός της ισχύος που απαιτείται για τη θέρμανση του νερού και τη μετατροπή του σε ατμό σε συνθήκες πίεσης μίας ατμόσφαιρας και αφετέρου της ισχύος που απαιτείται για αύξηση της πίεσης του ατμού από μία ατμόσφαιρα σε αυτήν της αέριας φάσης στην αρχή της εδαφικής

---

<sup>1</sup> Υψομετρική διαφορά  $\Delta z$ : η διαφορά μεταξύ της στάθμης του ηρεμούντος ύδατος (έστω στάθμη διαπέδου) και του σημείου εισπίεσης (άξονας εδαφικής στήλης) σε συνθήκες εργαστηρίου/πειραματικής διάταξης.

στήλης. Η ισχύς που απαιτείται για τη θέρμανση και εν συνεχεία μετατροπή του νερού σε ατμό υπολογίζεται ως ακολούθως:

$$I = M'(C_w(T_s - T_o) + h_{vap}) \quad (3.21)$$

- όπου:
- $M'$ : η παροχή, σε όρους μάζας, του νερού
  - $C_w$ : η θερμοχωρητικότητα του νερού
  - $T_s$ : η θερμοκρασία κορεσμού
  - $T_o$ : η αρχική θερμοκρασία
  - $h_{vap}$  η λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης του νερού

Για τα μεγέθη που εξετάστηκαν στο προηγούμενο εδάφιο, η ισχύς αυτή προέκυψε ίση με 27400kJ/day (=0.32kW), η οποία είναι τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτήν που απαιτείται στην περίπτωση της εισπίεσης νερού. Η σημαντική αυτή διαφορά αποδίδεται τόσο στη σημαντική ειδική θερμότητα εξάτμισης όσο και στην ειδική θερμοχωρητικότητα του νερού.

Για λόγους πληρότητας, υπολογίστηκε ακόμα η ισχύς που απαιτείται για αύξηση της πίεσης και μεταφορά του ατμού από το σημείο παραγωγής στο σημείο εισπίεσης ( $\Delta z=1$  m). Στο σημείο παραγωγής θεωρούμε ότι η πίεση του ατμού είναι ίση με την ατμοσφαιρική ενώ η μέγιστη πίεση της αέριας φάσης στο σημείο εισπίεσης προέκυψε ίση με 1.09 atm. Προκειμένου να λάβουμε υπόψη τη μεταβολή του όρου  $V^2/(2g)$  στην εξίσωση Bernoulli λόγω αύξησης της πίεσης, επιλέχθηκε αγωγός ονομαστικής διαμέτρου 10mm (DIN 2450) και μήκους 1.5m, οι γραμμικές απώλειες κατά μήκος του οποίου υπολογίστηκαν από τη σχέση Darcy-Weisbach και το διάγραμμα Moody (Στάμου, 2009). Η σχέση Darcy-Weisbach μπορεί να χρησιμοποιηθεί αυτούσια και για την περίπτωση ροής ατμού σε αγωγό (Stamper & Koral, 1979). Η απαιτούμενη για το σκοπό αυτό ισχύς υπολογίστηκε ίση με 8.19kJ/day, η οποία είναι κατά πολύ μικρότερη από την ισχύ που απαιτείται για θέρμανση του νερού.

Τέλος, για την απομάκρυνση 75% της μάζας του ρύπου, απαιτείται στην εισπίεση ατμού ενέργεια ίση με 2.53kWh ενώ για την απομάκρυνση του ίδιου ποσοστού με εισπίεση νερού απαιτούνται μόλις  $1.5 \cdot 10^{-4}$  kWh. Η σημαντική αυτή διαφορά καταδεικνύει την διαφορά που υφίσταται, σε όρους ενέργειας, μεταξύ των δύο μεθόδων.

### 3.5 Διαπιστώσεις και κύρια σημεία κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάστηκε ενδελεχώς η απορρύπανση εδαφικής στήλης με εφαρμογή των μεθόδων εισπίεσης νερού και εισπίεσης ατμού. Υπολογίστηκε η απόκλιση των αναλυτικών λύσεων από τα αποτελέσματα του λογισμικού T2VOC και πραγματοποιήθηκε σύγκριση ως προς την επίδοση των μεθόδων. Οι διαπιστώσεις συνοψίζονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

Για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση νερού, παρατηρήθηκε ότι **η ακρίβεια της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett αυξάνεται σημαντικά με αύξηση της παροχής εισπίεσης νερού**. Για υδραυλική κλίση εισπίεσης ίση με 4.5% η απόκλιση της αναλυτικής λύσης από την αριθμητική προσομοίωση δεν ξεπερνά το 6.7% για τα τρία εδάφη που εξετάστηκαν.

Παρατηρήθηκε ακόμα ότι για δεδομένη παροχή εισπίεσης νερού και υδραυλική αγωγιμότητα, **τα κακώς διαβαθμισμένα εδάφη απορρυπαίνονται γρηγορότερα από τα καλώς διαβαθμισμένα εδάφη**. Στα καλώς διαβαθμισμένα εδάφη, το νερό, ρέει επιλεκτικά πρωταρχικώς μέσω των διαθέσιμων πόρων, παρακάμπτοντας τους πόρους στους οποίους παραμένει εγκλωβισμένη η μη υδατική φάση. Αυτός είναι και ο λόγος που απαιτείται περισσότερος χρόνος για την εκτόπιση της μη υδατικής φάσης σε καλώς διαβαθμισμένα εδάφη.

Για την απορρύπανση εδαφικής στήλης με εισπίεση ατμού, **το αναλυτικό μοντέλο που παρουσιάστηκε υπολογίζει με σημαντική ακρίβεια τόσο την ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου όσο και τον βαθμό κορεσμού της υδατικής φάσης ανάντη του μετώπου**. Η μέγιστη απόκλιση της προτεινόμενης αναλυτικής λύσης από τα αποτελέσματα του λογισμικού T2VOC, δε ξεπερνά το 6.5% για τις περιπτώσεις και τα εδάφη που εξετάστηκαν.

Παρατηρήθηκε ακόμα ότι για σταθερή παροχή εισπίεσης ατμού, **η ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου, που ταυτίζεται με τον ρυθμό απορρύπανσης της εδαφικής στήλης, είναι πρακτικώς ανεξάρτητη από τα χαρακτηριστικά τριχοειδούς πίεσης και περατότητας του πορώδους μέσου**. Τα εδαφικά χαρακτηριστικά που επηρεάζουν τη ταχύτητα κίνησης του θερμικού μετώπου και, κατ' επέκταση, την ταχύτητα απορρύπανσης είναι αφενός το πορώδες και αφετέρου η ειδική θερμοχωρητικότητα των στερεών κόκκων.

Από τη σύγκριση της επίδοσης των δύο μεθόδων **επιβεβαιώθηκε η εκ των προτέρων γνωστή αδυναμία της εισπίεσης νερού να επιτύχει σημαντική απομάκρυνση μάζας της μη υδατικής φάσης εντός εύλογου χρονικού διαστήματος**. Συγκεκριμένα η επίδοση της μεθόδου μειώνεται σημαντικά μετά την άφιξη του μετώπου στο πέρας της στήλης, οπότε και η αναλυτική λύση Buckley-Leverett αδυνατεί να υπολογίσει τον απαιτούμενο χρόνο απορρύπανσης για την επίτευξη αξιόλογου ποσοστού απομάκρυνσης μάζας, πχ 80%. Αντίθετα, η εισπίεση ατμού επιτυγχάνει 100% απομάκρυνση μάζας του τριχλωροαιθέριου καθώς ο βαθμός κορεσμού αυτού ανάντη του μετώπου είναι μηδενικός και η εκτόπιση μπορεί να χαρακτηριστεί ως «τέλεια». **Με εφαρμογή της προτεινόμενης για την εισπίεση ατμού αναλυτικής λύσης δύνανται να υπολογισθεί με σημαντική ακρίβεια ο απαιτούμενος χρόνος εφαρμογής της μεθόδου για την επίτευξη του εκάστοτε επιδιωκόμενου βαθμού απομάκρυνσης μάζας.**

## 4 Απορρύπανση διδιάστατου πεδίου

Στο παρόν κεφάλαιο εξετάζεται η επίδραση των εδαφικών χαρακτηριστικών στην επίδοση των μεθόδων εισπίεσης ατμού και άντλησης νερού για την απομάκρυνση μη υδατικής φάσης TCE από διδιάστατο πεδίο. Εξετάζονται τρεις υδροφορείς: δύο ομογενείς (O1 και O2), το έδαφος των οποίων διαφοροποιείται ως προς την υδραυλική αγωγιμότητα και τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της μη υδατικής φάσης, και ένας ετερογενής, το πλέον περατό έδαφος του οποίου έχει τα ίδια χαρακτηριστικά με αυτά του ομογενούς υδροφορέα O1. Πραγματοποιείται ακόμα σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς καθώς επίσης και έλεγχος των τάσεων του εδάφους για την περίπτωση της εισπίεσης ατμού.

### 4.1 Περιγραφή προβλήματος διαρροής σε διδιάστατο πεδίο

#### 4.1.1 Σενάριο διαρροής

Για τη ρύπανση του διδιάστατου πεδίου θεωρούμε διαρροή μη υδατικής φάσης TCE από δεξαμενή, ο πυθμένας της οποίας βρίσκεται σε στάθμη  $-2.25\text{m}$  και πλησίον της στάθμης του υδροφόρου ορίζοντα. Προκειμένου να μεγιστοποιηθεί το βάθος της ρυπασμένης ζώνης, η υδραυλική κλίση των υδροφορέων θεωρήθηκε μηδενική. Από τη δεξαμενή εκρέουν, με σταθερό ρυθμό,  $438\text{kg}$  TCE σε χρονικό διάστημα τριών ετών, μετά το πέρας των οποίων η διαρροή σταματά. Στη συνέχεια και για διάστημα έξι ετών από το πέρας της διαρροής, η μη υδατική φάση ισορροπεί υπό την επίδραση βαρυτικών και τριχοειδών δυνάμεων. Για την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης TCE θα εφαρμοστούν οι μέθοδοι εισπίεσης ατμού και άντλησης νερού.

#### 4.1.2 Διαστάσεις πεδίου

Έχοντας εισαγάγει το πρόβλημα, θα πρέπει στη συνέχεια να επιλεχθούν οι διαστάσεις του πεδίου, στο οποίο θα εφαρμοσθούν οι τεχνολογίες απορρύπανσης και θα πραγματοποιηθεί η αριθμητική προσομοίωση, με χρήση του λογισμικού T2VOC. Το μήκος του πεδίου καθορίστηκε με κριτήριο την απόσταση μεταξύ των φρεάτων εισπίεσης και άντλησης που έχει εφαρμοσθεί σε πραγματικά περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού. Σύμφωνα με την Davis (1998), η ελάχιστη καταγεγραμμένη απόσταση μεταξύ των σημείων αυτών είναι ίση με  $1.5\text{m}$ , ενώ η μέγιστη  $18\text{m}$ . Στα περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού που παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 2-7, παρατηρούμε ότι η απόσταση μεταξύ των φρεάτων εισπίεσης και άντλησης κυμαίνεται από  $3.5$  έως  $9.5$  μέτρα. Το μήκος  $L$  του διδιάστατου πεδίου επιλέγεται ίσο με  $8\text{m}$ .

Για τον προσδιορισμό της κατακόρυφης διάστασης του πεδίου, μελετήθηκαν τα υδρογεωλογικά χαρακτηριστικά από περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού. Για τα περιστατικά που παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 2-7, το βάθος της ρυπασμένης ζώνης ταυτίζεται με τη θέση εδαφικής (αργιλικής) στρώσης χαμηλής περατότητας ή αδιαπέρατου βραχώδους σχηματισμού. Στα περιστατικά αυτά, το βάθος της αδιαπέρατης στρώσης κυμαίνεται από 9 έως 10 m, ενώ στο A.G Communications Site, η αργιλική στρώση εντοπίστηκε σε βάθος 14 μέτρων από τη στάθμη του εδάφους. Το πάχος της αργιλικής στρώσης, ήταν σε κάθε περίπτωση από 1 έως 1.75m. Στο προς εξέταση διδιάστατο πεδίο, και σε όλες τις παραλλαγές αυτού, επιλέγεται η τοποθέτηση μοναδιαίου πάχους αργιλικής στρώσης σε βάθος 9 μέτρων από τη στάθμη του εδάφους. Η κατακόρυφη διάσταση του πεδίου επιλέγεται τελικώς ίση με 10m.

Η εγκάρσια στο πεδίο διάσταση επιλέχθηκε ίση με 1m ( $\Delta y=1m$ ).

#### **4.1.3 Χαρακτηριστικά υδροφορέων**

Έχοντας προσδιορίσει τις διαστάσεις του διδιάστατου πεδίου, θα πρέπει εν συνεχεία να καθοριστούν τα εδαφικά χαρακτηριστικά καθενός εκ των εξεταζόμενων υδροφορέων καθώς επίσης και η κατανομή των στρώσεων/φακών χαμηλής περατότητας για τον ετερογενή υδροφορέα.

Από το σύνολο των περιστατικών εισπίεσης ατμού που μελετήθηκαν για την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας, η μόνη παράμετρος του εδάφους που ήταν γνωστή, με ελάχιστες εξαιρέσεις, ήταν η υδραυλική αγωγιμότητα του εδάφους η οποία βρέθηκε ότι κυμαίνεται από  $5 \cdot 10^{-5}$  έως  $3 \cdot 10^{-3}$  m/s. Οι τιμές αυτές άλλωστε ικανοποιούν τον περιορισμό που αναφέρουν τόσο ο Heron (2010) όσο και η Davis (1998), ότι δηλαδή μέθοδος εισπίεσης ατμού δε συνίσταται σε περιπτώσεις όπου το έδαφος έχει υδραυλική αγωγιμότητα μικρότερη από  $10^{-6}$  m/s. Επιπρόσθετα, σύμφωνα με τον Gudbjerg (2004), επειδή τα αριθμητικά μοντέλα προσομοίωσης πολυφασικής ροής υποθέτουν (τοπική) θερμοδυναμική και χημική ισορροπία, στις περιπτώσεις όπου το έδαφος παρουσιάζει σημαντική περατότητα, τα μοντέλα αυτά δίνουν αποκλίσεις καθώς η παραδοχή αυτή δεν ικανοποιείται. Για μεγάλες τιμές υδραυλικής αγωγιμότητας εμφανίζονται «φυσαλίδες» αέρα οπότε δεν ικανοποιείται η παραδοχή ισορροπίας των φάσεων. Βάσει των παραπάνω, σε ότι αφορά τα περατά εδάφη των υδροφορέων που θα εξετασθούν, επιλέγονται τιμές υδραυλικής αγωγιμότητας της τάξης των  $10^{-4}$  και  $10^{-5}$  m/s που αντιστοιχούν σε τυπικές τιμές μέσης και



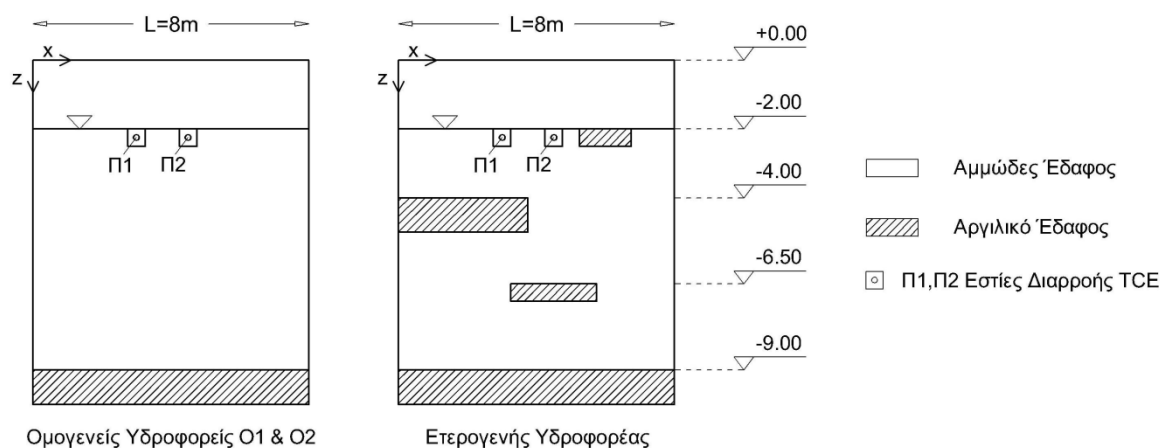
λεπτόκοκκης άμμου (Νάνου & Παπαθανασιάδης, 2010, Pinder & Gray, 2008). Η υδραυλική αγωγιμότητα της αργιλικής στρώσης λαμβάνεται ίση με  $4 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$ .

Για την περίπτωση του ετερογενούς εδάφους, θεωρούμε αμμώδες έδαφος το οποίο περιλαμβάνει αργιλικούς φακούς χαμηλής περατότητας. Προκειμένου να καθοριστούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των φακών αλλά και των στρώσεων χαμηλής περατότητας του ετερογενούς εδάφους, μελετήθηκαν πρωταρχικώς τα περιστατικά του Πίνακα 2-7. Ωστόσο, για κανένα από τα περιστατικά αυτά δεν υπήρχε λεπτομερής χαρακτηρισμός της ετερογένειας του εδάφους και συγκεκριμένα των φακών χαμηλής περατότητας. Για τον λόγο αυτό, πραγματοποιήθηκε αναζήτηση μελετών/περιστατικών στις οποίες έχει γίνει λεπτομερής περιγραφή της ετερογένειας του εδάφους. Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα:

**Πίνακας 4-1 Ενδεικτικά χαρακτηριστικά φακών χαμηλής περατότητας από μελέτες/περιστατικά.**

Μελέτη/Περιστατικό	Μήκος (m)	Πάχος (m)	Αναφορά
Cleaning Facility, Cocoa FL	2-10	0.10-0.25	(Parker et al., 2008)
Description and origin of clay lenses in gravel	2-32	0.10-0.76	(Lindsey et al., 1998)
Pemaco Superfund Site, Maywood, CA	>1.2	0.90-1.20	(T N & Associates, 2004)

Βάσει των παραπάνω, και λαμβάνοντας υπόψη τη διακριτοποίηση του διδιάστατου πεδίου που ακολουθεί στο επόμενο εδάφιο, θεωρήσαμε αργιλικό φακό πάχους ενός μέτρου μέχρι το μέσον του διδιάστατου πεδίου και δύο φακούς πάχους 0.5m. Στο Σχήμα 4-1 παρουσιάζονται οι διαστάσεις των υδροφορέων και η κατανομή των φακών χαμηλής περατότητας για τον ετερογενή υδροφορέα.



Σχήμα 4-1 Διαστάσεις και κατανομή στρώσεων/φακών χαμηλής περατότητας για τους εξεταζόμενους υδροφορείς

Εν συνεχεία, στον Πίνακα 4-2 παρουσιάζονται λεπτομερώς τα εδαφικά χαρακτηριστικά των υδροφορέων.

**Πίνακας 4-2 Εδαφικά Χαρακτηριστικά Υδροφορέων**

Υδροφορέας:	O1	O2	Ετερογενής	Αργιλικό Έδαφος
<b>Παράμετρος</b>				
Υδραυλική Αγωγιμότητα $K$ (m/s)	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$4.0 \cdot 10^{-7}$
Πορώδες $n$	0.36	0.36	0.36	0.40
Πυκνότητα στερεών Κόκκων $\rho_s$ (kg/m <sup>3</sup> )	2650	2650	2650	2650
Παραμένον βαθμός κορεσμού νερού $S_{wr}$	<b>0.10</b>	<b>0.20</b>	<b>0.10</b>	<b>0.20</b>
Παραμένον βαθμός κορεσμού TCE $S_{nr}$	<b>0.05</b>	<b>0.18</b>	<b>0.05</b>	<b>0.17</b>
Παραμένον βαθμός κορεσμού αέριας φάσης $S_{gr}$	0.01	0.01	0.01	0.01
Παράμετρος Σχετικής Διαπερατότητας (Stone II) –εξ (1.22)-(1.24)	$\varepsilon=3.5$	$\varepsilon=3.5$	$\varepsilon=3.5$	$\varepsilon=3.5$
<b>Παράμετροι Τριχοειδούς Πίεσης (Μοντέλο Van Genuchten)</b>				
$S_m$	0.00	0.00	0.00	0.07
$N^1$	1.84	1.84	1.84	5.00
$\alpha_{gw}$ (m <sup>-1</sup> )	5.5	5.5	5.5	1.20
$\alpha_{nw}$ (m <sup>-1</sup> )	10.42	10.42	10.42	2.27
$\alpha_{gn}$ (m <sup>-1</sup> )	13.20	13.20	13.20	2.88
<b>Θερμικά Χαρακτηριστικά</b>				
Θερμοχωρητικότητα στερεών κόκκων $C_R$ (kJ/kg)	1000	1000	1000	800
Θερμική αγωγιμότητα ξηρού εδάφους $\lambda_{dry}$ (W/mK)	0.30	0.30	0.30	0.25
Θερμική αγωγιμότητα κορεσμένου εδάφους $\lambda_{wet}$ (W/mK)	3.00	3.00	3.00	2.72

<sup>1</sup> Λόγω Προβλημάτων σύγκλισης για  $N > 2.0$  στο Στάδιο D των προσομοιώσεων, χρησιμοποιήθηκε η ίδια καμπύλη τριχοειδούς πίεσης για τα περατά εδάφη των υδροφορέων.

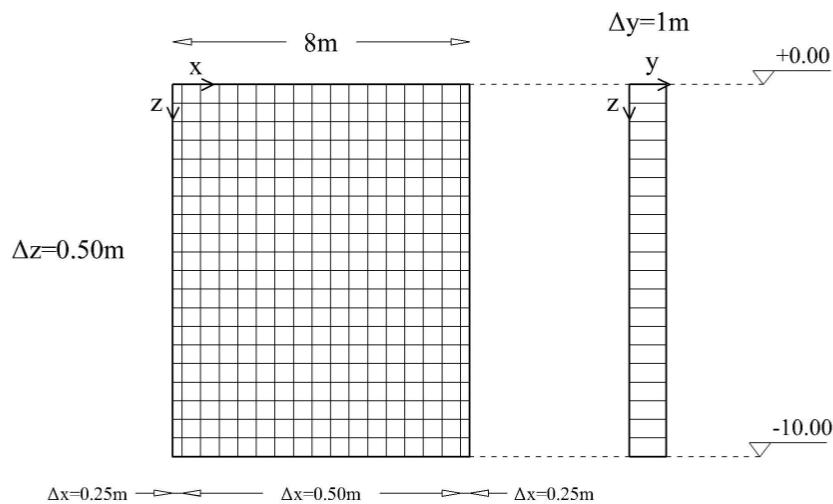
Στο σημείο αυτό θα πρέπει να σχολιάσουμε ότι η τιμή του παραμένοντος βαθμού κορεσμού της μη υδατικής φάσης για τον ετερογενή και ομογενή υδροφορέα O1 λήφθηκε ίση με 0.05 προκειμένου να εξασφαλίσουμε τη ρύπανση, από μη υδατική φάση, μεγάλου εύρους του διδιάστατου πεδίου. Αντίθετα, στο ομογενές πεδίο O2, ο παραμένον βαθμός κορεσμού του TCE θεωρήθηκε μεγαλύτερος, αφενός λόγω της μικρότερης υδραυλικής αγωγιμότητας (Ahmed, 2006) και αφετέρου προκειμένου να εξετάσουμε την επίδραση του παραμένοντος βαθμού κορεσμού στην επίδοση των μεθόδων εισπίεσης νερού/ατμού.

Θα πρέπει να σημειωθεί ακόμα ότι η πίεση εισόδου (σύστημα νερού-αέρα) της αργλικής στρώσης θεωρήθηκε ίση με 45cm προκειμένου να εξασφαλισθεί η διήθηση μη υδατικής φάσης εντός των στρώσεων χαμηλής περατότητας. Οι παράμετροι τριχοειδούς πίεσης που χρησιμοποιήθηκαν για τα αμμώδη εδάφη των υδροφορέων αντιστοιχούν σε καλώς διαβαθμισμένο έδαφος με πίεση εισόδου ίση με 2.5cm. Παράμετροι τριχοειδούς πίεσης που αντιστοιχούν σε μεγαλύτερες τιμές πίεσης εισόδου έχουν ως αποτέλεσμα την εμφάνιση προβλημάτων σύγκλισης στο λογισμικό T2VOC, κατά πάσα πιθανότητα λόγω της ασυνέχειας που εμφανίζεται στην καμπύλη τριχοειδούς πίεσης.

Η θερμική αγωγιμότητα των εδαφών υπολογίστηκε βάσει του πορώδους από τον εμπειρικό τύπο του Sundberg (βλέπε εδάφιο 2.2.3)

#### *4.1.4 Στοιχεία προσομοίωσης*

Το διδιάστατο πεδίο μήκους 8m και βάθους 10m, διακριτοποιήθηκε σε πεπερασμένους όγκους ισοδιάστασης ίσης με 0.50m. Για τους πεπερασμένους όγκους που εφάπτονται στις κατακόρυφες παρειές του πεδίου, θεωρήθηκε ισοδιάσταση  $\Delta x=0.25m$ , προκειμένου να αυξηθεί η ακρίβεια στα σημεία εισπίεσης και άντλησης (Kaslusky & Udell, 2002). Ο συνολικός αριθμός των πεπερασμένων όγκων ανέρχεται σε 340. Ακόμα, προκειμένου να λάβουμε υπόψη την απώλεια θερμότητας με διάχυση προς τις κατώτερες στρώσεις εδάφους που δεν προσομοιώνονται, θεωρούμε ότι τα κατώτατα στοιχεία του πεδίου ( $z= 9.75$ ) έχουν όγκο τετραπλάσιο από αυτόν των υπολοίπων στοιχείων. Στο Σχήμα 4-2 παρουσιάζεται σχηματικώς η χωρική διακριτοποίηση του διδιάστατου πεδίου.



Σχήμα 4-2 Διακριτοποίηση διδιάστατου πεδίου

Για κάθε μία από τις τρεις περιπτώσεις υπεδάφους που θα εξετασθούν, η ρύπανση και η απορρύπανση του πεδίου θα πραγματοποιηθεί σε τέσσερα στάδια προσομοίωσης. Σε κάθε στάδιο, τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης θα χρησιμοποιηθούν ως αρχικές συνθήκες στο αμέσως επόμενο στάδιο προσομοίωσης. Στον Πίνακα 4-3 παρουσιάζονται τα στάδια προσομοίωσης καθώς επίσης και σύντομη περιγραφή αυτών. Οι αρχικές/συνοριακές που αφορούν το κάθε στάδιο παρουσιάζονται αναλυτικώς στις αντίστοιχες ενότητες.

**Πίνακας 4-3 Στάδια για την προσομοίωση διαρροής και απορρύπανσης του διδιάστατου πεδίου.**

Στάδιο	Περιγραφή	Αντίστοιχη Ενότητα	Αρχικές & Συνοριακές Συνθήκες	Αποτελέσματα
A	Ισορροπία Υδατικής – Αέριας Φάσης υπό την επίδραση Βαρυτικών και Τριχοειδών Δυνάμεων	4.2.1	Πίνακας 4-4	Πίνακας 4-5
B	Διαρροή TCE – ενεργός πηγή	4.2.2	Σχήμα 4-3 Πίνακας 4-6 α&β	Σχήμα 4-4
Γ	Ανακατανομή TCE μετά το πέρας της διαρροής	4.2.3	Σχήμα 4-5 Πίνακας 4-6β	Σχήμα 4-6
Δ1	Απορρύπανση πεδίου με άντληση νερού	4.3.1	Σχήμα 4-7 Πίνακας 4-6β	Σχήμα 4-8 Σχήμα 4-9 Σχήμα 4-10
Δ2	Απορρύπανση πεδίου με εισπίεση ατμού	4.3.2	Σχήμα 4-12 Πίνακας 4-8	Σχήμα 4-13 Σχήμα 4-14 Σχήμα 4-15

## 4.2 Προσομοίωση διαρροής

### 4.2.1 Στάδιο A: Ισορροπία Υδατικής – Αέριας φάσης

Για το πρώτο στάδιο προσομοίωσης, όπου θεωρούμε συνθήκες διφασικής ροής υδατικής-αέριας φάσης, θα πρέπει να ορισθούν οι αρχικές συνθήκες. Οι αρχικές συνθήκες που πρέπει να εισαχθούν στο λογισμικό T2VOC είναι η πίεση της αέριας φάσης, ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης καθώς επίσης και η θερμοκρασία για το σύνολο των πεπερασμένων όγκων. Οι αρχικές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν για τους τρεις υδροφορείς, παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα.

**Πίνακας 4-4 Στάδιο A: Ισορροπία Υδατικής-Αέριας Φάσης. Αρχικές Συνθήκες**

Υδροφορέας:		Υδροφορέας O1		Υδροφορέας O2		Ετερογενής Υδροφορέας	
z(m)	T (°C)	P <sub>g</sub> (Pa)	S <sub>w</sub>	P <sub>g</sub> (Pa)	S <sub>w</sub>	P <sub>g</sub> (Pa)	S <sub>w</sub>
0.25	20	101325	0.13	101325	0.22	101325	0.10
0.75	20	101325	0.40	101325	0.45	101325	0.26
1.25	20	101325	0.65	101325	0.60	101325	0.39
1.75	20	101325	0.90	101325	0.92	101325	0.61
2.25	20	101325	0.98	101325	0.98	101325	0.98
2.75	20	112000	0.99	101325	0.99	101325	0.99
≥3.25	20	112000	0.99	112000	0.99	112000	0.99

Για τις ανωτέρω αρχικές συνθήκες, και τα εδαφικά χαρακτηριστικά του Πίνακα 4-2 προσδιορίστηκε, με χρήση του λογισμικού T2VOC, η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα καθώς επίσης και η ελάχιστη απόλυτη πίεση της αέριας φάσης στην ακόρεστη ζώνη. Τα αποτελέσματα για το σύνολο των τριών υδροφορέων παρουσιάζονται στον Πίνακα 4-5

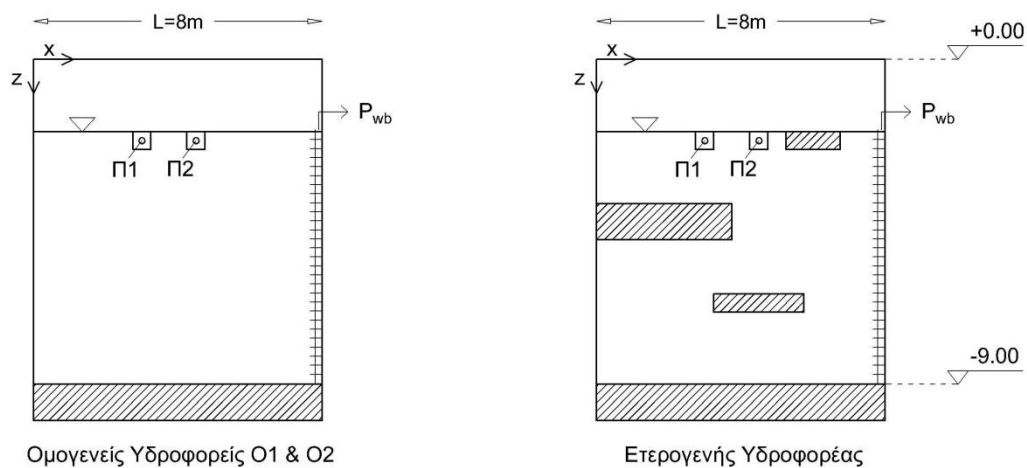
**Πίνακας 4-5 Στάδιο A: Ισορροπία Υδατικής-Αέριας Φάσης. Αποτελέσματα Προσομοίωσης**

Υδροφορέας:	O1	O2	Ετερογενής
Στάθμη Υδροφόρου Ορίζοντα (m)	-2.08	-1.80	-1.93
Ελάχιστη (απόλυτη) Πίεση Αέριας Φάσης στην ακόρεστη ζώνη (Pa)	954083	958225	952897

Για το σύνολο των εξεταζόμενων υδροφορέων, η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα προέκυψε σε στάθμη περίπου -2m.

#### 4.2.2 Στάδιο Β: Διήθηση TCE

Τα αποτελέσματα από το πρώτο στάδιο προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκαν ως αρχικές συνθήκες στο δεύτερο στάδιο προσομοίωσης. Ως συνοριακή συνθήκη θεωρήθηκε φρέαρ πλήρους διείσδυσης, με στάθμη ύδατος ίδια με τη στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα που προσδιορίστηκε προηγουμένως. Εφαρμόζουμε την εν λόγω οριακή συνθήκη, καθώς η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα δεν μεταβάλλεται κατά την εισροή του DNAPL θεωρώντας ότι αυτό εκτοπίζει ίσο όγκο υδατικής φάσης, η οποία και αντλείται από το φρέαρ. Η οριακή αυτή συνθήκη εισάγεται στο λογισμικό T2VOC θέτοντας τη πίεση εξόδου του φρέατος (wellbore pressure) ίση με την πίεση της αέριας φάσης στο ανώτατο στοιχείο του φρέατος για δεδομένη στάθμη υδροφόρου ορίζοντα. Η πίεση αυτή υπολογίζεται αθροίζοντας την υδροστατική πίεση στο ανώτατο στοιχείο του φρέατος με την πίεση εισόδου της αέριας φάσης στο εν λόγω έδαφος ( $P_g = P_w + P_{cgw}$ ). Ο δείκτης παραγωγικότητας υπολογίστηκε για κάθε έναν από τους πεπερασμένους όγκους του φρέατος σύμφωνα με τη σχέση (3.4). Για την περίπτωση φρέατος άντλησης σε διδιάστατο πεδίο, το λογισμικό T2VOC λαμβάνει υπόψη τη μεταβολή της πίεσης καθ' ύψος αυτού, λόγω της κατακόρυφης συνιστώσας της ροής (Falta et al., 1995). Στο Σχήμα 4-3 παρουσιάζεται σχηματικώς η συνοριακή συνθήκη για την προσομοίωση της διαρροής του TCE από την υπόγεια δεξαμενή.



Σχήμα 4-3 Στάδιο Β: Διαρροή TCE. Απεικόνιση Συνοριακών Συνθηκών.  
Π1, Π2: Εστίες Διαρροής TCE

Στον Πίνακα 4-6 παρουσιάζονται αναλυτικά οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς. Τα επιμέρους εδαφικά χαρακτηριστικά λήφθηκαν από τον Πίνακα 4-2.

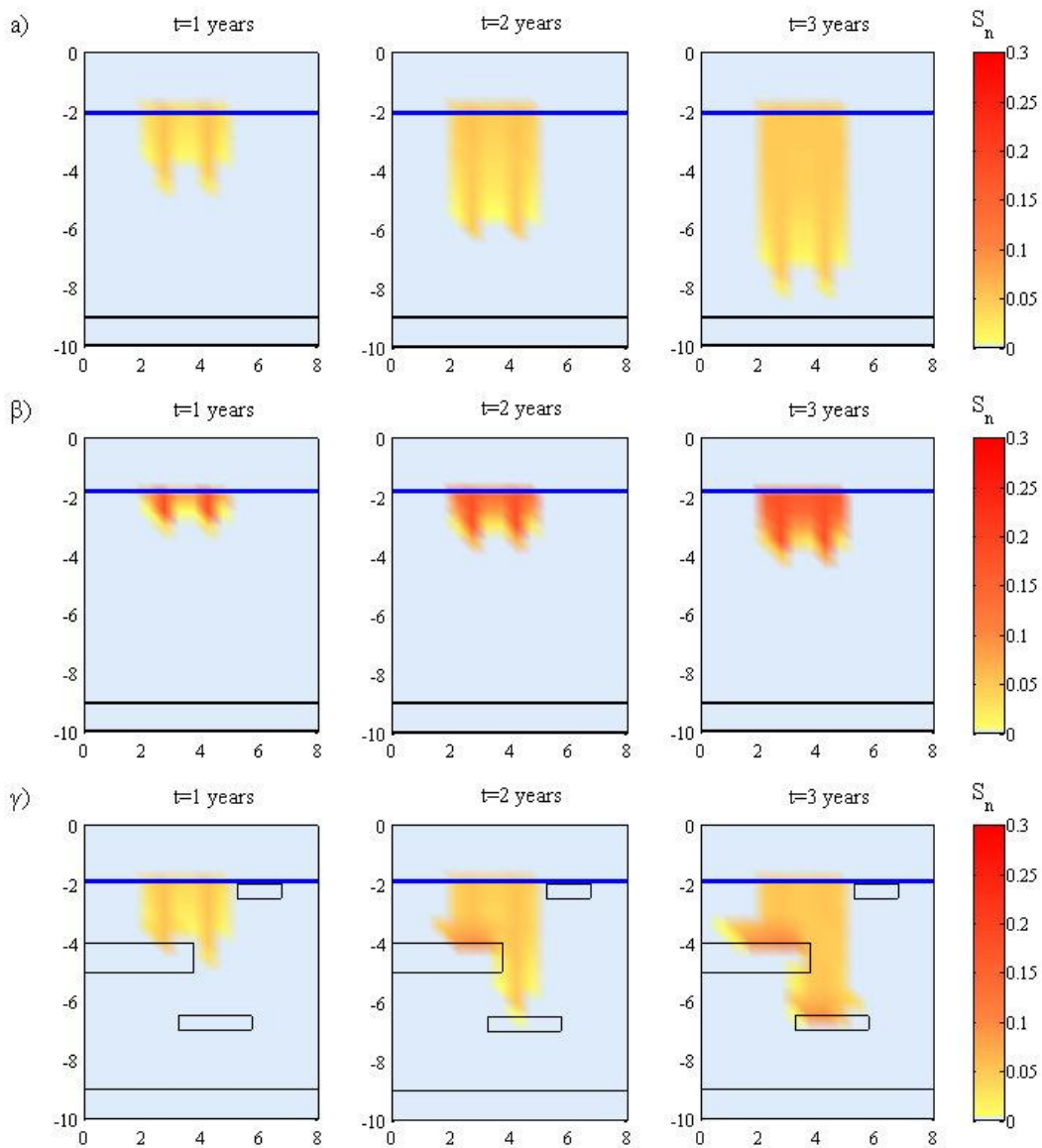
#### Πίνακας 4-6α Στάδιο Β: Διαρροή TCE. Συνοριακές Συνθήκες

Παράμετρος	
Παροχή TCE, Π1 (kg/day)	0.2
Παροχή TCE, Π2 (kg/day)	0.2
Χρόνος διαρροής (years)	3

#### Πίνακας 4-6β Επιμέρους Συνοριακές Συνθήκες

Υδροφορέας:	O1	O2	Ετερογενής
$P_{wb}$ (Pa)	103200	106000	104700
Δείκτης παραγωγικότητας ( $m^3$ )	$1.0 \cdot 10^{-10}$	$1.6 \cdot 10^{-11}$	$1.0 \cdot 10^{-10}$
Αριθμός κατακόρυφων στοιχείων φρέατος	14	14	14

Με χρήση του λογισμικού T2VOC, και χρησιμοποιώντας ως αρχικές συνθήκες τα αποτελέσματα της προσομοίωσης από το Στάδιο Α, καθώς επίσης και τις ανωτέρω συνοριακές συνθήκες προσδιορίστηκε η κατανομή της μη υδατικής φάσης στο διδιάστατο πεδίο. Στο Σχήμα 4-4 παρουσιάζεται η κατανομή του TCE σε στιγμιότυπα ανά ένα έτος από την έναρξη ( $t=0$ ) έως το πέρας της διαρροής ( $t=3$  years).



Σχήμα 4-4 Κατανομή Βαθμού Κορεσμού TCE για  $t=1, 2$  και  $3$  χρόνια από την έναρξη της διαρροής. α) Υδροφορέας O1 β) Υδροφορέας O2 γ) Ετερογενής Υδροφορέας

Το Σχήμα 4-4 καθιστά προφανές ότι τα εδαφικά χαρακτηριστικά έχουν σημαντική επίδραση στη κατανομή της μη υδατικής φάσης. Μεταξύ των ομογενών υδροφορέων O1 και O2 παρατηρούμε ότι το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι σημαντικά μικρότερο στον ομογενή υδροφόρα O2, το έδαφος του οποίου χαρακτηρίζεται από μεγαλύτερο παραμένοντα βαθμό κορεσμού  $S_{nr}$  (και μικρότερη υδραυλική αγωγιμότητα) σε σχέση με το έδαφος του ομογενούς υδροφορέα O1. Μεγάλη τιμή του παραμένοντος βαθμού κορεσμού  $S_{nr}$  σημαίνει ότι πρέπει να αποθηκευτεί σημαντική ποσότητα του ρύπου στους πόρους του εδάφους προκειμένου αυτός να μεταβεί από τη θέση A στην αμέσως γειτονική A' και συνεπώς μεγάλη τιμή του παραμένοντος βαθμού κορεσμού συνεπάγεται μικρή κινητικότητα του ρύπου στο έδαφος, και άρα μικρό βάθος ρυπασμένης ζώνης για μηδενική υδραυλική κλίση



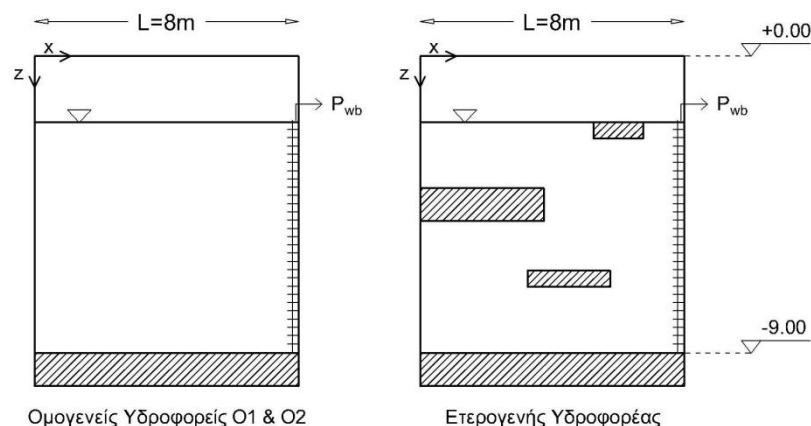
του υδροφορέα. Ο παραμένον βαθμός κορεσμού είναι δηλαδή άρρηκτα συνδεδεμένος με το βάθος της ρυπασμένης ζώνης.

Στον ετερογενή υδροφορέα, τόσο η κατακόρυφη όσο και η οριζόντια κατανομή της μη υδατικής φάσης επηρεάζονται σημαντικά από την ύπαρξη των φακών χαμηλής περατότητας. Η σημαντική πίεση εισόδου που χαρακτηρίζει το αργιλικό έδαφος, σε συνδυασμό με τη μικρή του περατότητα εξαναγκάζουν τη μη υδατική φάση να κινηθεί παράλληλα στη στρώση αυτή, ενώ ένα ποσοστό της μη υδατικής φάσης εισέρχεται τελικώς στο εσωτερικό της αργιλικής στρώσης.

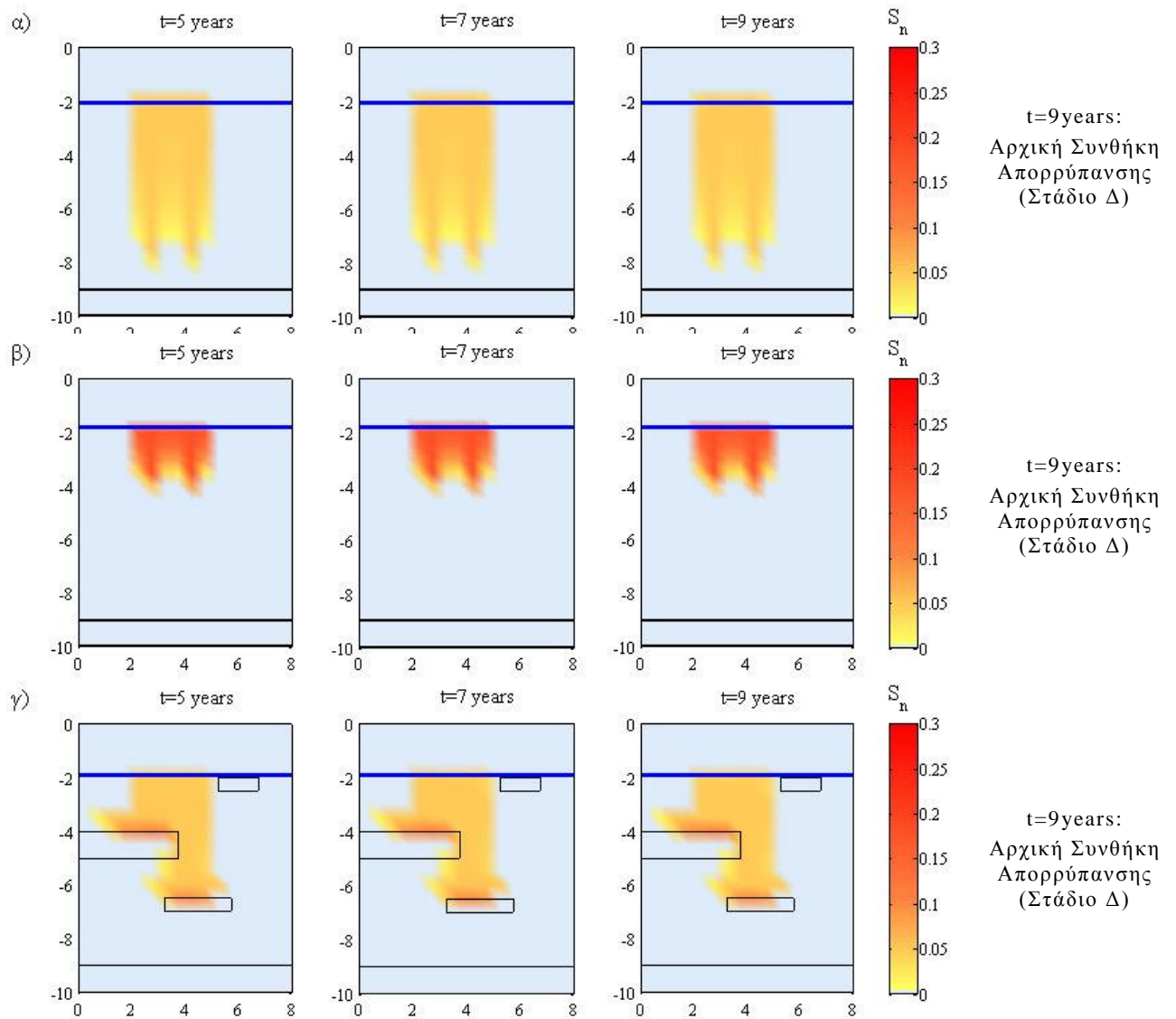
#### 4.2.3 Στάδιο Γ: Ανακατανομή TCE

Προκειμένου να προσομοιώσουμε την εξέλιξη της ρύπανσης μετά το πέρας της διαρροής, δηλαδή την ανακατανομή της μη υδατικής φάσης λόγω της επίδρασης βαρυτικών και τριχοειδών δυνάμεων, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τα δεδομένα εξόδου του λογισμικού T2VOC, όπως αυτά προέκυψαν από το προηγούμενο στάδιο, και συγκεκριμένα για  $t=3\text{years}$ .

Στο Σχήμα 4-5 απεικονίζονται οι συνοριακές συνθήκες για την προσομοίωση της ανακατανομής του TCE. Οι επιμέρους παράμετροι για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς λαμβάνονται από τον Πίνακα 4-6β. Στο στάδιο αυτό, ο ρυθμός ροής μάζας TCE από την υπόγεια δεξαμενή τέθηκε ίσος με μηδέν και ο χρόνος προσομοίωσης ίσος με έξι χρόνια. Στο Σχήμα 4-6 απεικονίζεται η κατανομή της μη υδατικής φάσης 2, 4 και 6 χρόνια μετά το πέρας της διαρροής.



Σχήμα 4-5 Στάδιο Γ: Ανακατανομή TCE. Απεικόνιση Συνοριακών Συνθηκών.



Σχήμα 4-6 Κατανομή Βαθμού Κορεσμού TCE για 2, 4 και 6 χρόνια από το πέρας της διαρροής. α) Υδροφορέας O1 β) Υδροφορέας O2 γ) Ετερογενής Υδροφορέας

Στο Σχήμα 4-6 παρατηρούμε ότι μετά το πέρας της διαρροής, η κατανομή του DNAPL δεν μεταβάλλεται. Αυτό αποδίδεται:

- a) Στη συνοριακή συνθήκη βάσει της οποίας προσομοιώθηκε η διαρροή του TCE στο Στάδιο Β. Πιο συγκεκριμένα, στο Στάδιο Β θεωρήσαμε σταθερή παροχή διαρροής TCE<sup>1</sup> και όχι σταθερό βαθμό κορεσμού TCE/σταθερή πίεση<sup>2</sup> στους πεπερασμένους όγκους που πραγματοποιείται η διαρροή. Στη τελευταία περίπτωση θα αναμέναμε ανακατανομή του TCE μετά το πέρας της διαρροής.

<sup>1</sup> Συνοριακή συνθήκη τύπου Neumann

<sup>2</sup> Συνοριακή συνθήκη τύπου Dirichlet

- b) Στη μικρή πίεση εισόδου των εδαφών. Για τα εδάφη των υδροφορέων θεωρήσαμε καλώς διαβαθμισμένο έδαφος με ιδιαίτερα μικρή πίεση εισόδου, της τάξης των 2.5cm H<sub>2</sub>O σε σύστημα νερού-αέρα <sup>1</sup>. Η μικρή πίεση εισόδου έχει ως αποτέλεσμα την εύκολη μετάβαση του TCE από τον εκάστοτε πεπερασμένο όγκο στον αμέσως γειτονικό του. Αυτό δεν παρατηρείται στο αργιλικό έδαφος το οποίο χαρακτηρίζεται από πίεση εισόδου ίση με 45cm H<sub>2</sub>O.
- c) Στην ανάντη στάθμιση της περατότητας του εδάφους και της κινητικότητας<sup>2</sup> (mobility) των φάσεων. Η ανάντη στάθμιση αυξάνει σημαντικά τη κινητικότητα του TCE, με αποτέλεσμα να καθιστά εύκολη τη μετάβασή του από τον εκάστοτε διαφορικό όγκο στον αμέσως γειτονικό του.

Τα παραπάνω δικαιολογούν γιατί κατά το πέρας της διαρροής (t=3 years) ο βαθμός κορεσμού του TCE είναι ίσος με τον παραμένοντα σε όλη την έκταση της ρυπασμένης ζώνης. Ο παραμένον βαθμός κορεσμού του TCE ακινητοποιεί τον ρύπο ( $k_m=0$ ) με αποτέλεσμα να μην παρατηρείται ανακατανομή μετά το πέρας της διαρροής.

Επιπρόσθετα, έχοντας υποθέσει ότι η υδραυλική κλίση του υδροφορέα είναι μηδενική, δεν συντελείται απομάκρυνση μάζας σε ισορροπία με την υδατική φάση και συνεπώς η μάζα του TCE παραμένει πρακτικώς αμετάβλητη.

Στον Πίνακα 4-7 παρουσιάζεται το βάθος της ρυπασμένης ζώνης καθώς επίσης και η μάζα της μη υδατικής φάσης TCE τη χρονική στιγμή t=9years, οπότε και θεωρούμε ότι ξεκινά η απορρύπανση των υδροφορέων, δηλαδή το Στάδιο Δ των προσομοιώσεων.

**Πίνακας 4-7 Βάθος Ρυπασμένης Ζώνης και Μάζα μη υδατικής φάσης TCE κατά την έναρξη της απορρύπανσης**

Υδροφορέας:	O1	O2	Ετερογενής
Βάθος Ρυπασμένης Ζώνης (m)	8.5	4.5	7.0
Μάζα DNAPL (kg)	416	435	426

Στον Πίνακα 4-7 παρατηρούμε ότι η μάζα της μη υδατικής φάσης είναι διαφορετική σε κάθε υδροφορέα. Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι το λογισμικό T2VOC αγνοεί την υδροδυναμική διασπορά (και άρα τη διάχυση) με αποτέλεσμα η μάζα της μη υδατικής φάσης TCE να είναι μεγαλύτερη στη περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O2, που χαρακτηρίζεται από μικρότερη έκταση ρυπασμένης ζώνης και άρα συγκριτικά λιγότερη μάζα TCE σε διαλυμένη μορφή.

<sup>1</sup> Η θεώρηση αυτή ήταν απαραίτητη για την επίτευξη σύγκλισης στο Στάδιο Δ των προσομοιώσεων.

<sup>2</sup> Με τον όρο κινητικότητα αναφέρεται ο λόγος  $k_{r\beta}/\mu_{\beta}$ , όπου  $k_{r\beta}$  και  $\mu_{\beta}$  η σχετική διαπερατότητα και η δυναμική συνεκτικότητα (ιξώδες) της φάσης β αντίστοιχα (Klerpe, 2012).

## 4.3 Προσομοίωση Απορρύπανσης

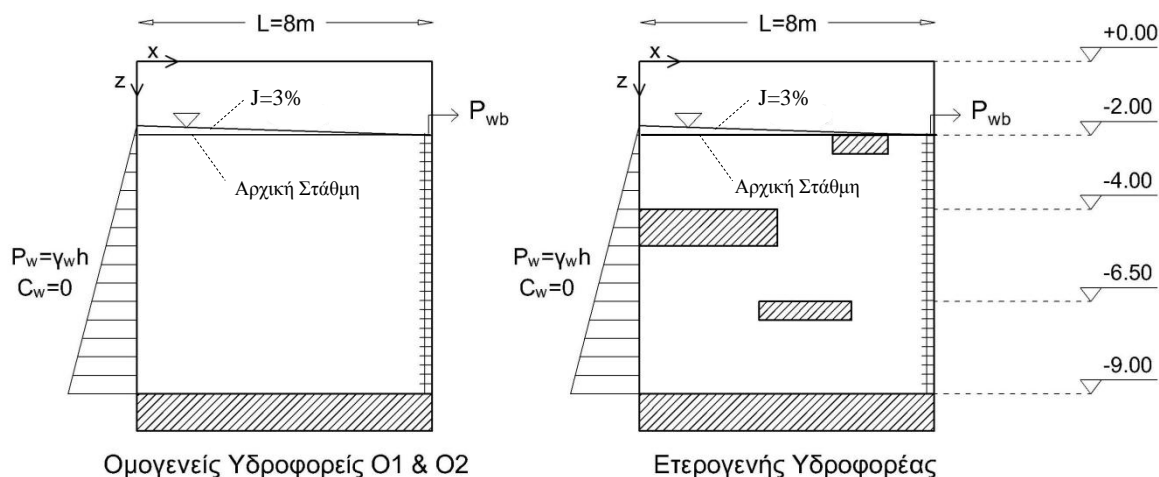
### 4.3.1 Απορρύπανση με άντληση νερού

Για την απορρύπανση του διδιάστατου πεδίου με εισπίεση/άντληση νερού αποφασίσαμε να εφαρμόσουμε υδραυλική κλίση 3%. Αρχικά, και προκειμένου να επιβάλλουμε την ίδια παροχή εισπίεσης νερού καθ' ύψος της κορεσμένης ζώνης του διδιάστατου πεδίου, θεωρήσαμε ότι κάθε οριζόντια συστοιχία πεπερασμένων όγκων συνιστά έναν ανεξάρτητο ροϊκό σωλήνα. Με τον τρόπο αυτό υπολογίστηκε από τον νόμο Darcy, η απαιτούμενη παροχή εισπίεσης σε κάθε πεπερασμένο όγκο που εφάπτεται στην ανάντη παρειά του πεδίου για την επίτευξη υδραυλική κλίσης 3%. Ωστόσο, κατά την αριθμητική προσομοίωση και θεωρώντας τη συνοριακή αυτή συνθήκη (σταθερή παροχή εισπίεσης, συνθήκη Neumann), παρουσιάστηκαν προβλήματα σύγκλισης, ιδιαίτερα στην περίπτωση του ετερογενούς υδροφορέα. Για τον λόγο αυτό, και λαμβάνοντας υπόψη τη θεωρία οριζόντιας ροής (Νάνου & Παπαθανασιάδης, 2010) αποφασίστηκε, αντί της θεώρησης σταθερής παροχής εισπίεσης, η θεώρηση υδροστατικής κατανομής των πιέσεων με μηδενική συγκέντρωση TCE ανάντη του πεδίου<sup>1</sup>. Για τη μόνρφωση της εν λόγω οριακής συνθήκης, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα `UB_Formulation`, το οποίο επισυνάπτεται στο παράρτημα.

Εν συνεχεία, για την ανωτέρω οριακή συνθήκη, πραγματοποιήθηκαν αριθμητικές προσομοιώσεις για δύο διαφορετικές συνοριακές συνθήκες στα κατάντη του πεδίου: φρέαρ πλήρους διείσδυσης και φρέαρ μερικής διείσδυσης βάθους τεσσάρων μέτρων από τη στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα. Από τις δύο αυτές συνοριακές συνθήκες, δυσμενέστερη για την απορρύπανση του υδροφορέα προέκυψε αυτή του φρέατος μερικής διείσδυσης. Πιο συγκεκριμένα, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για τις δύο αυτές διαφορετικές συνοριακές συνθήκες, προέκυψε ότι ο απαιτούμενος χρόνος για την επίτευξη κοινού βαθμού απομάκρυνση μάζας TCE είναι κατά περίπου 8% μεγαλύτερος στην περίπτωση του φρέατος μερικής διείσδυσης. Επειδή η απόκλιση αυτή δεν είναι ιδιαίτερα σημαντική, και προκειμένου να αποφύγουμε τη θεώρηση αδιαπέρατου ορίου στο κατάντη όριο του πεδίου, που είναι αναπόφευκτη στην περίπτωση φρέατος μερικής διείσδυσης, επιλέγουμε ως συνοριακή συνθήκη φρέαρ πλήρους διείσδυσης. Για την απορρύπανση με εισπίεση νερού, οι οριακές συνθήκες απεικονίζονται στο Σχήμα 4-7.

---

<sup>1</sup> Κατά την απορρύπανση με άντληση νερού, η πίεση στους διαφορικούς όγκους που εφάπτονται στην ανάντη παρειά του πεδίου είναι σταθερή (οριακή συνθήκη Dirichlet), όπως επίσης και η συγκέντρωση του TCE ( $C_w=0$ ).



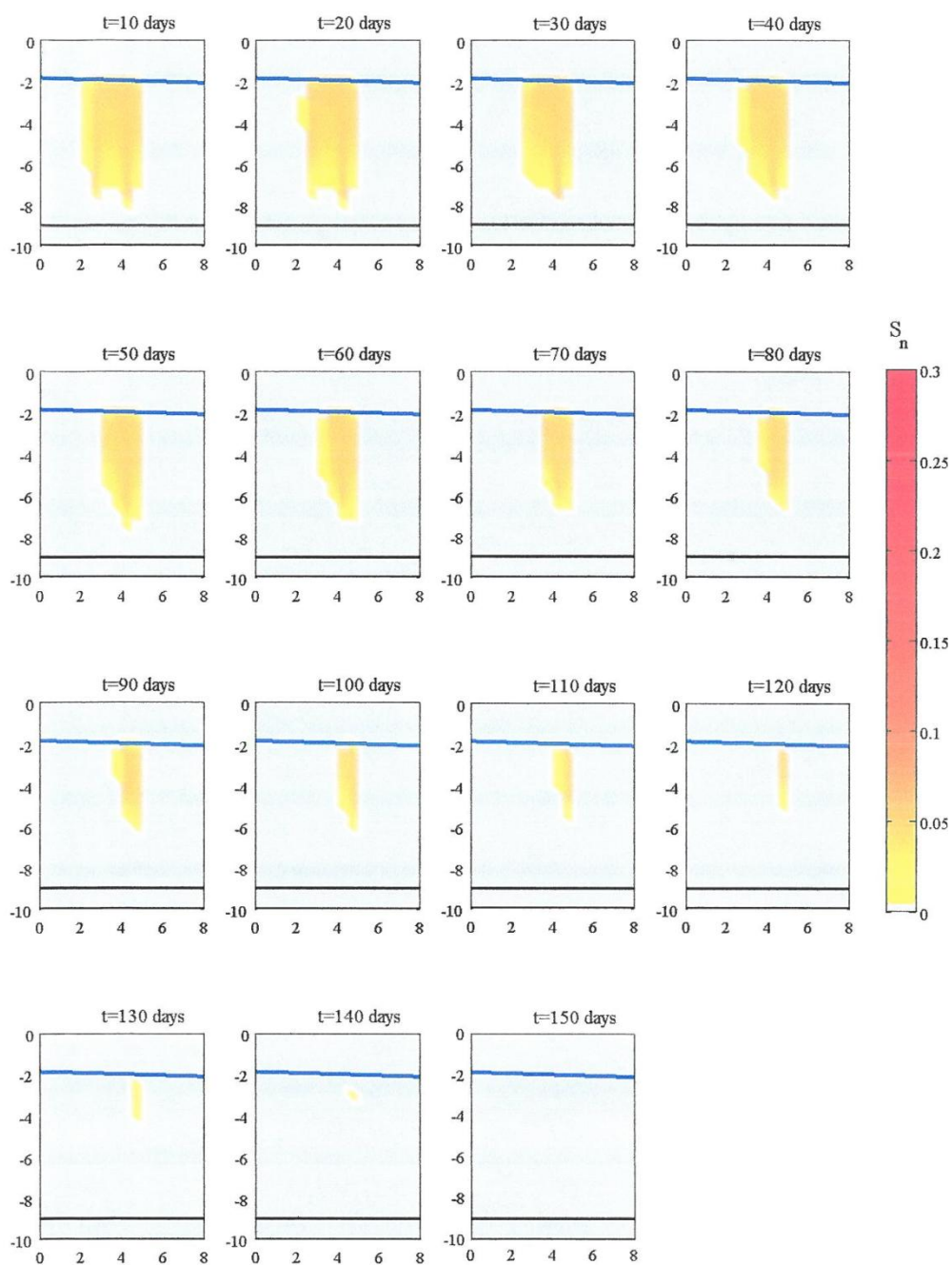
Σχήμα 4-7 Στάδιο Δ1: Απορρύπανση με εισπίεση/άντληση νερού.  
Απεικόνιση συνωριακών συνθηκών.

Σε κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς, κατά τη διάρκεια άντλησης νερού, η στάθμη στο κατάντη όριο του πεδίου (στάθμη φρέατος) θεωρείται ότι παραμένει σταθερή και ίση με τη στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα, όπως αυτή προσδιορίστηκε στο στάδιο Α των προσομοιώσεων (Πίνακας 4-5). Οι τιμές της πίεσης εξόδου  $P_{wb}$ , της παραγωγικότητας των στοιχείων καθώς επίσης και ο αριθμός των πεπερασμένων όγκων του φρέατος λαμβάνονται από τον Πίνακα 4-6β.

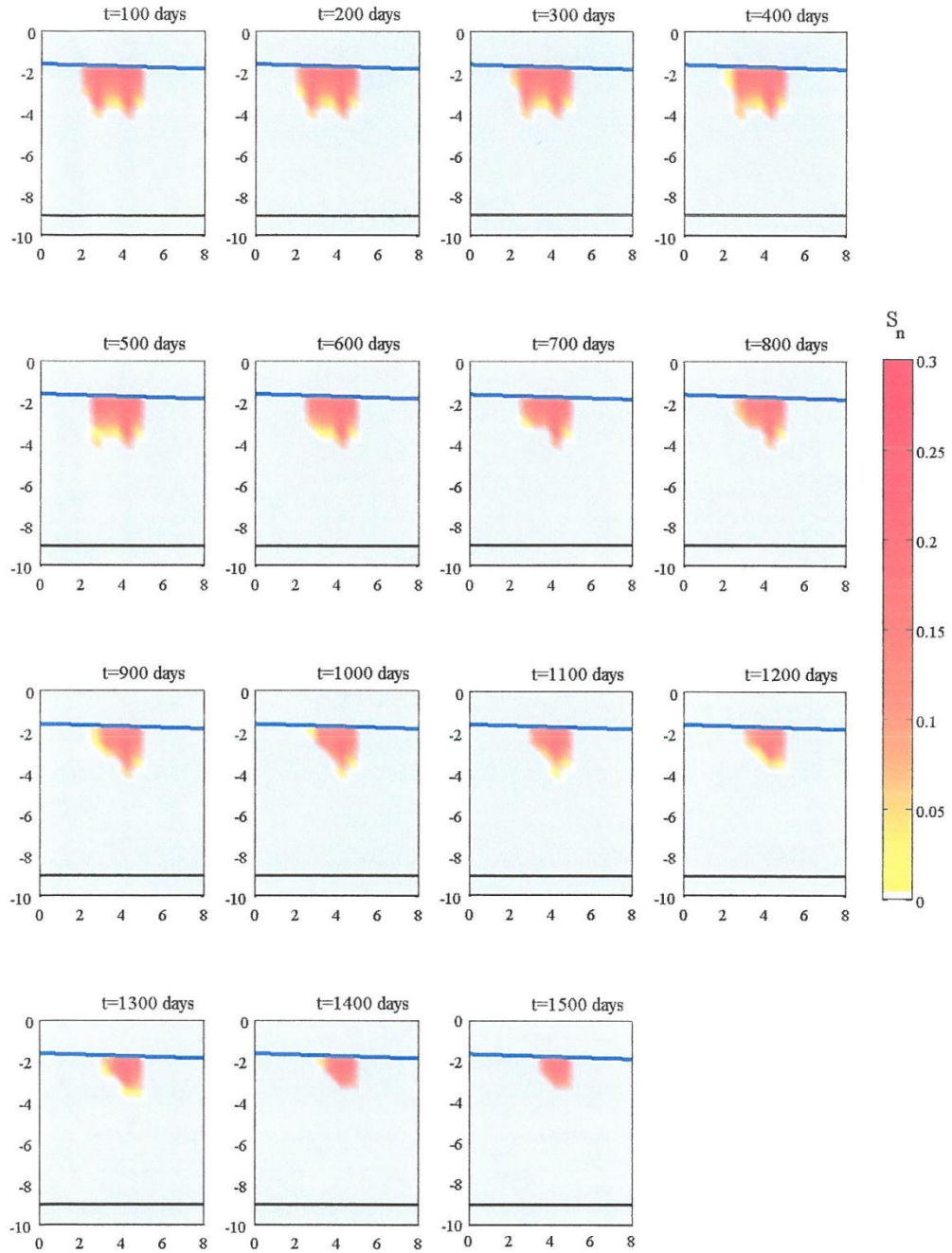
Θα πρέπει στο σημείο αυτό να επισημάνουμε ότι η απομάκρυνση του ρύπου πραγματοποιείται αποκλειστικά σε διαλυμένη μορφή, καθώς ο βαθμός κορεσμού του TCE είναι ίσος με τον παραμένοντα και συνεπώς η κινητικότητα της μη υδατικής φάσης μηδενική ( $k_m=0$ ). Σε ότι αφορά την απομάκρυνση σε διαλυμένη μορφή, το λογισμικό T2VOC θεωρεί στιγμιαία ισορροπία μεταξύ των φάσεων, πράγμα που σημαίνει ότι δεν υφίσταται περιορισμός μεταφοράς μάζας σε ότι αφορά την ταχύτητα διάλυσης (dissolution rate) του ρύπου από τη μη υδατική στην υδατική φάση. Η παραδοχή αυτή μειώνει τον απαιτούμενο χρόνο για την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης και δεν μπορεί να θεωρηθεί συντηρητική. Αγνοήθηκε ακόμα η εισρόφηση στη στερεά φάση, αφενός γιατί εστιάζουμε στην απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης, η οποία συνιστά την κύρια μάζα του ρύπου, και αφετέρου γιατί δεν ενδιαφέρει η συγκέντρωση του ρύπου στο υπόγειο νερό μετά την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης – δεν εξετάζουμε δηλαδή αν θα έχει επιτευχθεί μείωση της συγκέντρωσης του ρύπου σε επίπεδα μικρότερα από το μέγιστο επιτρεπτό όριο στο πόσιμο νερό.

Χρησιμοποιώντας ως αρχικές συνθήκες τα αποτελέσματα από το Στάδιο προσομοίωσης Γ και τις ανωτέρω συνοριακές συνθήκες, προσομοιώθηκε με χρήση του λογισμικού T2VOC, η απορρύπανση των υδροφορέων. Για τον ομογενή υδροφορέα O1, η μέθοδος άντλησης ύδατος επιτυγχάνει, εντός εύλογου χρονικού διαστήματος, την πλήρη απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης από αυτόν, ενώ για τον ομογενή υδροφορέα O2 η μέθοδος άντλησης κατέστη αναποτελεσματική. Στον ετερογενή υδροφορέα, επετεύχθη βαθμός απομάκρυνσης μάζας TCE ίσος με 75%.

Στις σελίδες που ακολουθούν, παρουσιάζεται η κατανομή της μη υδατικής φάσης για διάφορα στιγμιότυπα από την έναρξη της απορρύπανσης.

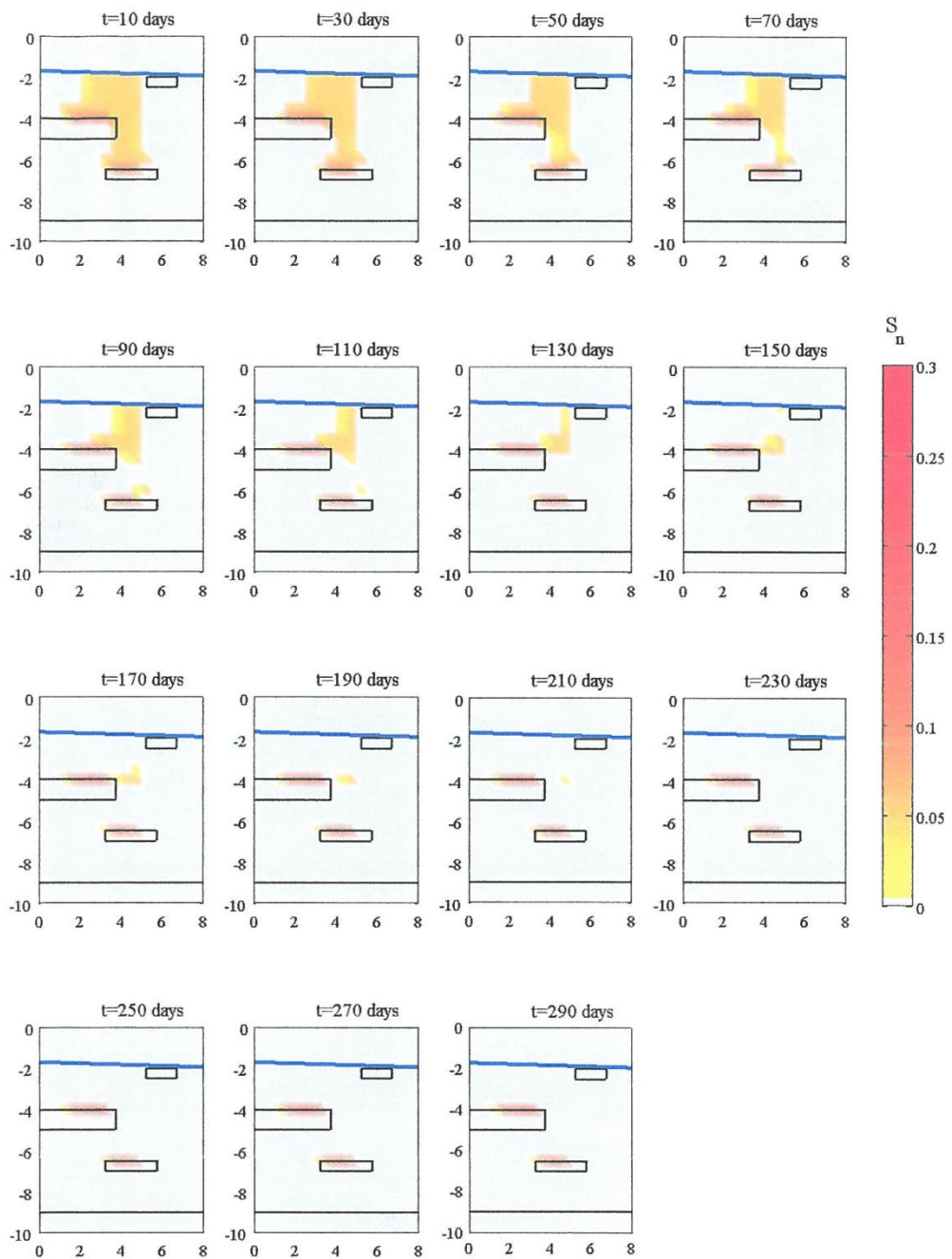


Σχήμα 4-8 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα Ο1 με άντληση νερού:  
Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 10 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης



Σχήμα 4-9 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα  $O_2$  με άντληση νερού:  
Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 100 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης





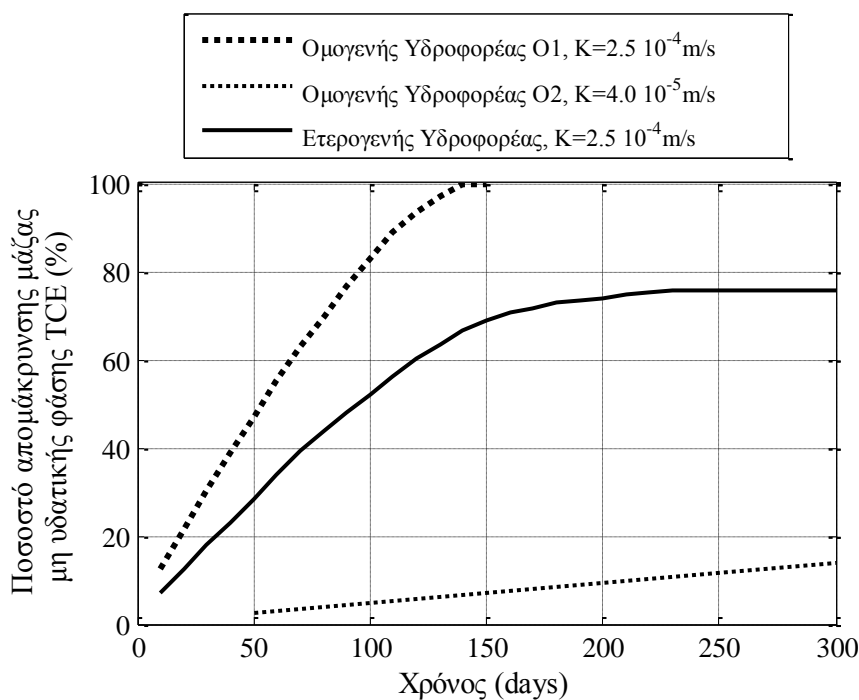
Σχήμα 4-10 Απορρύπανση ετερογενούς υδροφορέα με άντληση νερού:  
Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα 20 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης

Στην περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O1, η μέθοδος απομακρύνει το 100% της μάζας της μη υδατικής φάσης TCE σε χρονικό διάστημα 147 ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης. Στο γεγονός αυτό συμβάλλει καθοριστικά το μεγάλο βάθος  $D_c$  ρυπασμένης ζώνης, το οποίο στην προκειμένη περίπτωση ισούται με 8.5m. Καθώς το βάθος αυτό είναι σημαντικό, το σύνολο σχεδόν της υδατικής φάσης που διέρχεται από το ανάντη προς το κατάντη όριο του θεωρούμενου διδιάστατου πεδίου έρχεται σε επαφή με τη μη υδατική φάση, με αποτέλεσμα τον σημαντικό ρυθμό απομάκρυνσης μάζας TCE σε διαλυμένη μορφή. Στο Σχήμα 4-8 παρατηρούμε ακόμη ότι η ποσότητα της μη υδατικής φάσης που βρίσκεται σε μικρό από τον υδροφόρο ορίζοντα βάθος (0.5-1.5 m) απομακρύνεται με πιο αργό ρυθμό. Βάσει των αποτελεσμάτων του λογισμικού, αυτό αποδίδεται πρωτίστως στη μικρότερη συγκέντρωση του ρύπου (ίση με 0.7 της διαλυτότητας) αλλά και στην ελαφρώς μικρότερη ταχύτητα Darcy στη ζώνη αυτή, με αποτέλεσμα τον μειωμένο ρυθμό απομάκρυνσης μάζας από την εν λόγω ζώνη. Θα πρέπει ακόμα να επισημάνουμε ότι στον ομογενή υδροφορέα O1, η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα (-2.08m) βρίσκεται εντός του πεπερασμένου όγκου στον οποίο πραγματοποιήθηκε η διαρροή (-2.25m) και στον οποίο υπάρχει TCE, με αποτέλεσμα η θεωρούμενη ισοδιάσταση 0.50m να μη δίδει ιδιαίτερος ακριβή αποτελέσματα σχετικά με την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης στη ζώνη πλησίον του υδροφόρου ορίζοντα. Σε κάθε περίπτωση, ο χρόνος για την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης μπορεί να θεωρηθεί αντιπροσωπευτικός.

Για τον ομογενή υδροφορέα O2, η μέθοδος άντλησης και επεξεργασίας είναι αναποτελεσματική καθώς απαιτείται παρατεταμένη εφαρμογή της μεθόδου για την επίτευξη αξιόλογου ποσοστού απομάκρυνσης μάζας. Πιο συγκεκριμένα, για χρόνο 300 ημερών εφαρμογής της μεθόδου, το ποσοστό απομάκρυνσης μη υδατικής φάσης δεν υπερβαίνει το 20% (Σχήμα 4-11). Ο ομογενής υδροφορέας O2 έχει μικρότερη υδραυλική αγωγιμότητα από αυτήν του υδροφορέα O1 και συνεπώς για την από κοινού εφαρμοζόμενη υδραυλική κλίση  $J=3\%$ , η ταχύτητα Darcy είναι σημαντικά μικρότερη στην περίπτωση του πρώτου. Επιπρόσθετα, το σημαντικά μειωμένο βάθος της ρυπασμένης ζώνης ( $D_c=4.5m$ ) περιορίζει την ποσότητα της υδατικής φάσης που έρχεται σε άμεση επαφή με το DNAPL, πράγμα που επιδρά αρνητικά στον ρυθμό απομάκρυνσης μάζας TCE και άρα στην επίδοση της μεθόδου. Στο Σχήμα 4-11 είναι εμφανής η επίδραση του βάθους της ρυπασμένης ζώνης και της υδραυλικής αγωγιμότητας στην επίδοση της μεθόδου (σύγκριση υδροφορέων O1 και O2)

Σε ότι αφορά τον ετερογενή υδροφορέα, καθίσταται εμφανές ότι η μέθοδος άντλησης νερού αδυνατεί να απομακρύνει τη μη υδατική φάση του ρύπου από τους φακούς χαμηλής περατότητας του εδάφους (Σχήμα 4-10). Η μέθοδος άντλησης και επεξεργασίας (pump & treat) επιτυγχάνει τη μείωση της μάζας της μη υδατικής φάσης του ρύπου, μέσω της σταδιακής απομάκρυνσης αυτού σε ισορροπία με την υδατική φάση, δηλαδή σε διαλυμένη μορφή. Κατά συνέπεια, για δεδομένη υδραυλική κλίση, ο ρυθμός απομάκρυνσης μάζας TCE θα είναι σημαντικά μικρότερος σε εδάφη ή στρώσεις εδάφους μικρής περατότητας. Αυτός είναι και ο λόγος που δεν επιτυγχάνεται η απομάκρυνση του DNAPL από τους φακούς μικρής περατότητας του εξεταζόμενου ετερογενούς πεδίου. Η αδυναμία της τεχνολογίας άντλησης και επεξεργασίας (pump & treat) να απομακρύνει τη μάζα των ρύπων από τους φακούς χαμηλής περατότητα είναι *ευρέως* γνωστή στη βιβλιογραφία και ήταν ένας από τους λόγους που κατέστη επιτακτική η ανάγκη ανεύρεσης νέων, πιο αποτελεσματικών μεθόδων αποκατάστασης ρυπασμένων χώρων.

Στον υπό εξέταση ετερογενή υδροφορέα, το μέγιστο ποσοστό απομάκρυνσης μάζας για την περίπτωση άντλησης ύδατος προέκυψε ίσο με 75% ενώ αναμένουμε ότι αύξηση του βαθμού ετερογένειας του εδάφους θα έχει αρνητική επίπτωση (μείωση) στο εν λόγω ποσοστό. Στο Σχήμα 4-11 παρουσιάζεται η επίδοση της μεθόδου για το σύνολο των τριών υδροφορέων.



Σχήμα 4-11 Επίδοση της άντλησης νερού για το σύνολο των τριών υδροφορέων.  $J=3\%$

Από τα όσα αναφέρθηκαν στις προηγούμενες παραγράφους, συμπεραίνουμε ότι η μέθοδος άντλησης νερού είναι αποτελεσματική σε περιπτώσεις ομογενών υδροφορέων οι οποίοι χαρακτηρίζονται αφενός από υδραυλική αγωγιμότητα της τάξεως του  $10^{-4}$  m/s ή και μεγαλύτερη και αφετέρου από σημαντικό βάθος ρυπασμένης ζώνης στο οποίο η μη υδατική φάση απαντάται σε μικρό βαθμό κορεσμού.

Το συμπέρασμα αυτό προέκυψε έχοντας θεωρήσει στιγμιαία ισορροπία μεταξύ των φάσεων. Ωστόσο, στην περίπτωση σημαντικού βάθους ρυπασμένης ζώνης, όπου η επιφάνεια επαφής της υδατικής με τη μη υδατική φάση είναι σημαντική, ο περιορισμός μεταφοράς μάζας από τη μη υδατική στην υδατική φάση αναμένεται να είναι λιγότερο έντονος από ότι στη περίπτωση μικρού βάθους ρυπασμένης ζώνης.

Σε ότι αφορά ακόμα τις συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν, η ροή στο πεδίο είναι πρακτικώς οριζόντια αφενός γιατί στα ανάντη του πεδίου ροής θεωρήσαμε υδροστατική κατανομή των πιέσεων και αφετέρου γιατί η κατακόρυφη συνιστώσα της ροής στο φρέαρ πλήρους διείδυσης δεν επιδρά σημαντικά στις ισορροπικές γραμμές του πεδίου<sup>1</sup>. Με τον τρόπο αυτό καθιστούμε τον υπολογισμό του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης ανεξάρτητο από το μήκος του θεωρούμενου διδιάστατου πεδίου προσομοίωσης, το οποίο λήφθηκε ίσο με 8m. Αυτό είναι επιθυμητό καθώς κατά την εφαρμογή ενός συστήματος άντλησης και επεξεργασίας το μήκος αυτό αναμένεται να είναι μεγαλύτερο.

---

<sup>1</sup> Πιο συγκεκριμένα, βάσει των αποτελεσμάτων του λογισμικού, στο μέσον του πεδίου, η κατακόρυφη συνιστώσα της ροής είναι δύο τάξεις μεγέθους μικρότερη από την οριζόντια συνιστώσα και συνεπώς η ροή μπορεί να θεωρηθεί οριζόντια.

#### 4.3.2 Απορρύπανση με εισπίεση ατμού

Για την απορρύπανση του διδιάστατου πεδίου με εισπίεση ατμού, εφαρμόζουμε ομοιόμορφη παροχή υδρατμών καθ' ύψος του πεδίου στα ανάντη αυτού. Στον ετερογενή υδροφορέα, εξαιτίας της αργλικής στρώσης που συναντάται στην ανάντη παρειά του πεδίου, και λόγω της χαμηλής της περατότητας, δεν εισπνέζεται ατμός καθ' ύψος της στρώσης αυτής. Επιπρόσθετα, τα εδαφικά χαρακτηριστικά του ομογενούς υδροφορέα O1 ταυτίζονται με αυτά του ετερογενούς και για τον λόγο αυτό αποφασίζεται η εισπίεση ίδιας παροχής ατμού (175Kg/day) στους δύο αυτούς υδροφορείς. Το ομογενές πεδίο O2 χαρακτηρίζεται από μικρότερη υδραυλική αγωγιμότητα και συνεπώς η παροχή εισπίεσης θα πρέπει να μειωθεί (Davis, 1998). Στο ομογενές πεδίο O2 θα εφαρμοσθεί παροχή ατμού ίση με 91Kg/day. Ακόμα, η εισπίεση ατμού εφαρμόζεται σε βάθη μεγαλύτερα από 1-1.5m, προκειμένου να αποφευχθεί η αστοχία του εδάφους (Davis, 1998). Δεδομένου του περιορισμού αυτού και λαμβάνοντας υπόψη τη διακριτοποίηση του πεδίου αποφασίζεται η εισπίεση ατμού σε βάθος μεγαλύτερο από 1.25m.

Σε ότι αφορά τις συνοριακές συνθήκες στα κατάντη, στην εισπίεση ατμού, τα φρέατα άντλησης θα πρέπει να είναι πλήρους διείσδυσης (fully screened) προκειμένου να είναι δυνατή η άντληση τόσο της υδατικής όσο και της μη υδατικής φάσης, ακόμα και στις περιπτώσεις όπου απαιτείται σημαντική ταπείνωση της στάθμης του υδροφορέα (Kingston et al., 2010). Στην περίπτωση που εξετάζουμε, θεωρούμε ότι ο υδροφόρος ορίζοντας στο κατάντη όριο βρίσκεται σε βάθος ίσο με αυτό που προσδιορίστηκε στο στάδιο Α των προσομοιώσεων. Ο περιορισμός αυτός εισάγεται όπως ακριβώς στην περίπτωση προσομοίωσης της διαρροής (Στάδιο Β). Θα πρέπει ωστόσο να επισημάνουμε ότι αν η πίεση της αέριας φάσης γίνει μεγαλύτερη από την προκαθορισμένη τιμή της πίεσης εξόδου σε κάποιο σημείο του φρέατος, τότε θα παρατηρηθεί άντληση (και) αέριας φάσης<sup>1</sup>. Σε περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού, το μεγαλύτερο ποσοστό των οργανικών ρύπων απομακρύνεται μέσω της αέριας φάσης, και για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούνται φρέατα άντλησης ατμού/αέριας φάσης (vapor extraction) από την ακόρεστη ζώνη (Battelle, 2003) (Udell & Heron, 2001). Οι McCray & Falta (1996) αναφέρουν ότι σύμφωνα με τους Leonard & Brown, για την άντληση αέριας φάσης από την ακόρεστη ζώνη, η απόλυτη πίεση της αέριας φάσης στα φρέατα άντλησης είναι της

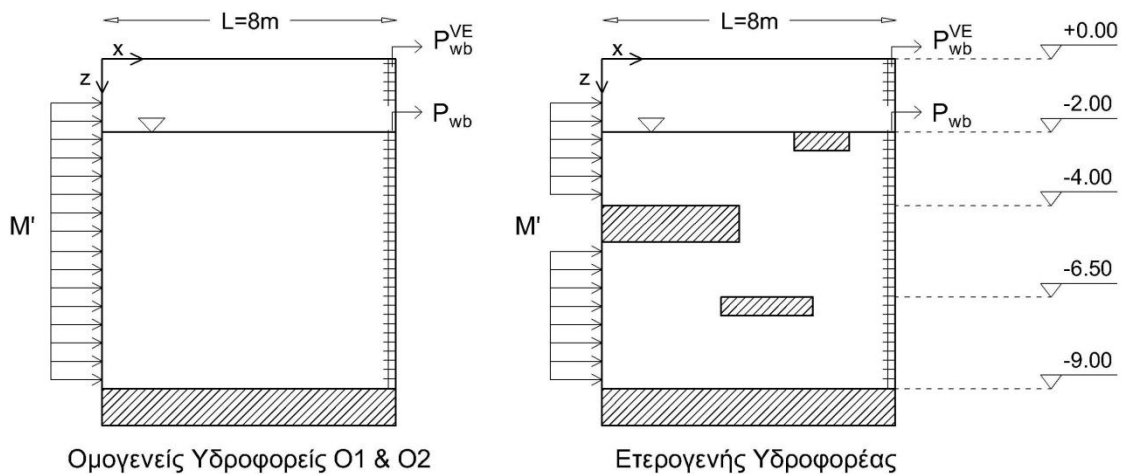
---

<sup>1</sup> Επειδή θεωρείται άντληση αέριας φάσης από την ακόρεστη ζώνη, η άντληση αέριας φάσης από το φρέαρ πλήρους διείσδυσης είναι πρακτικώς αμελητέα. Δηλαδή, η άντληση της αέριας φάσης πραγματοποιείται εξολοκλήρου από την ακόρεστη ζώνη.

τάξης των 0.9 atm. Για το υπό εξέταση πεδίο, η άντληση της αέριας φάσης από την ακόρεστη ζώνη πραγματοποιείται με πίεση εκροής (αέριας φάσης) ίση με αυτήν που υπολογίσθηκε στο Στάδιο Α των προσομοιώσεων (Πίνακας 4-5).

Επιπρόσθετα στην πλειονότητα των περιστατικών εφαρμογής της μεθόδου εισπίεσης ατμού κατασκευάζεται στην επιφάνεια του εδάφους ασφαλτική στρώση ή στρώση σκυροδέματος με σκοπό αφενός τη βελτίωση του συστήματος απαγωγής της αέριας φάσης και αφετέρου τον περιορισμό της διαφυγής των ρύπων στην ατμόσφαιρα. Κατά συνέπεια, το άνω όριο του διδιάστατου πεδίου θεωρείται ως αδιαπέρατο όριο (no-flux boundary).

Οι συνοριακές συνθήκες για την απορρύπανση με εισπίεση ατμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 4-12 και στον Πίνακα 4-8.



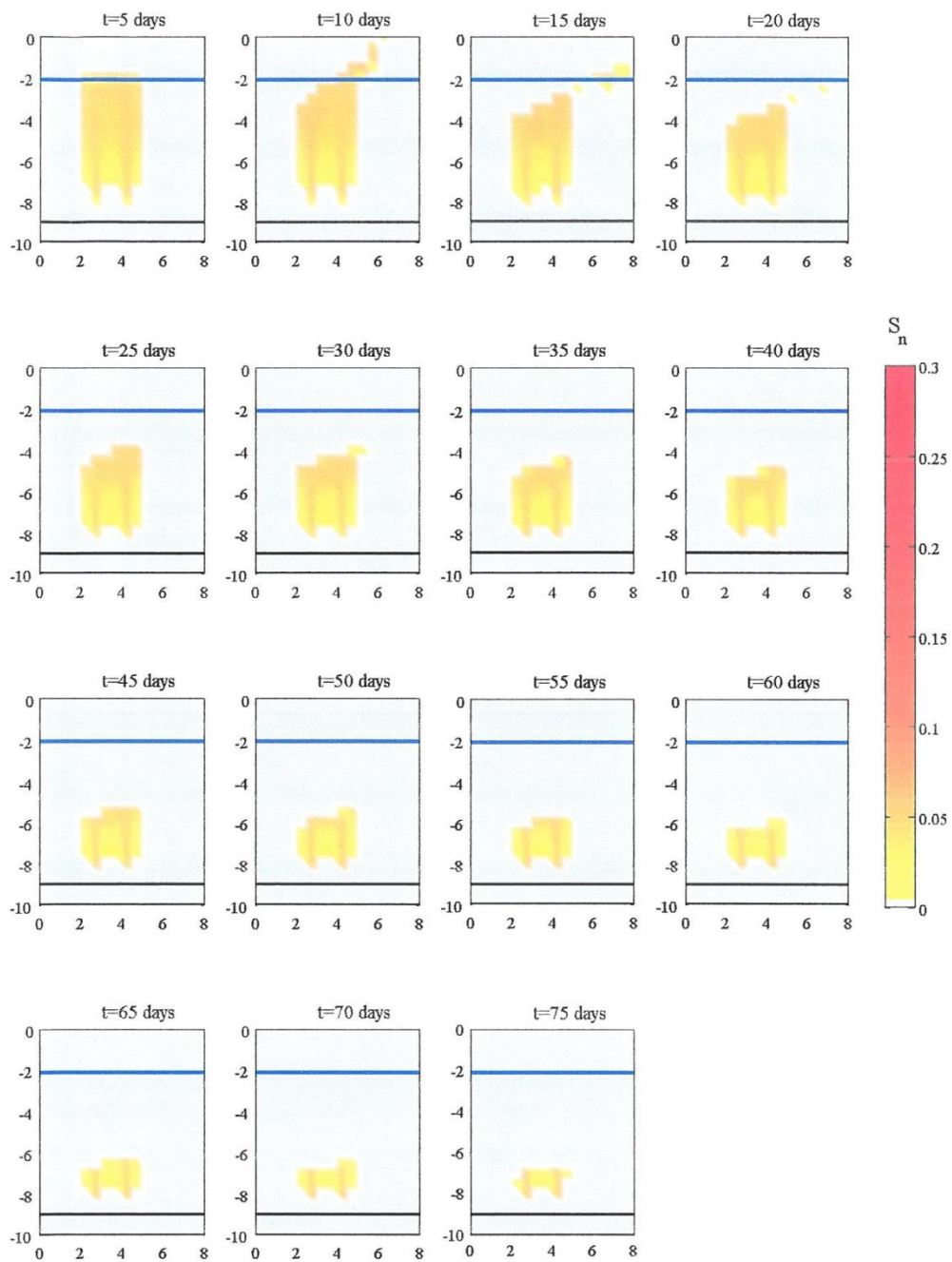
Σχήμα 4-12 Στάδιο Δ2: Απορρύπανση με εισπίεση ατμού. Συνοριακές Συνθήκες

Πίνακας 4-8 Στάδιο Δ2: Απορρύπανση με εισπίεση ατμού. Συνοριακές Συνθήκες.

Παράμετρος	Υδροφορέας O1	Υδροφορέας O2	Ετερογενής
Συνολική Παροχή ατμού $M'$ (kg/day)	175	91	175
Ειδική Ενθαλπία (kJ/kg)	2676	2676	2676
Εκροή Αέρια Φάσης (Vapor Extraction)			
Πίεση Εκροής $P_{wb}$ (Pa)	95410	95830	95290
Δείκτης Παραγωγικότητας ( $m^3$ )	$1.0 \cdot 10^{-10}$	$1.6 \cdot 10^{-11}$	$1.0 \cdot 10^{-10}$
Αριθμός Κατακόρυφων Στοιχείων Φρέατος	3	3	3
Φρέαρ πλήρους διεύθυνσης			
Πίεση Εκροής $P_{wb}$ (Pa)	103200	106000	104700
Δείκτης Παραγωγικότητας ( $m^3$ )	$1.0 \cdot 10^{-10}$	$1.6 \cdot 10^{-11}$	$1.0 \cdot 10^{-10}$
Αριθμός Κατακόρυφων Στοιχείων Φρέατος	14	14	14

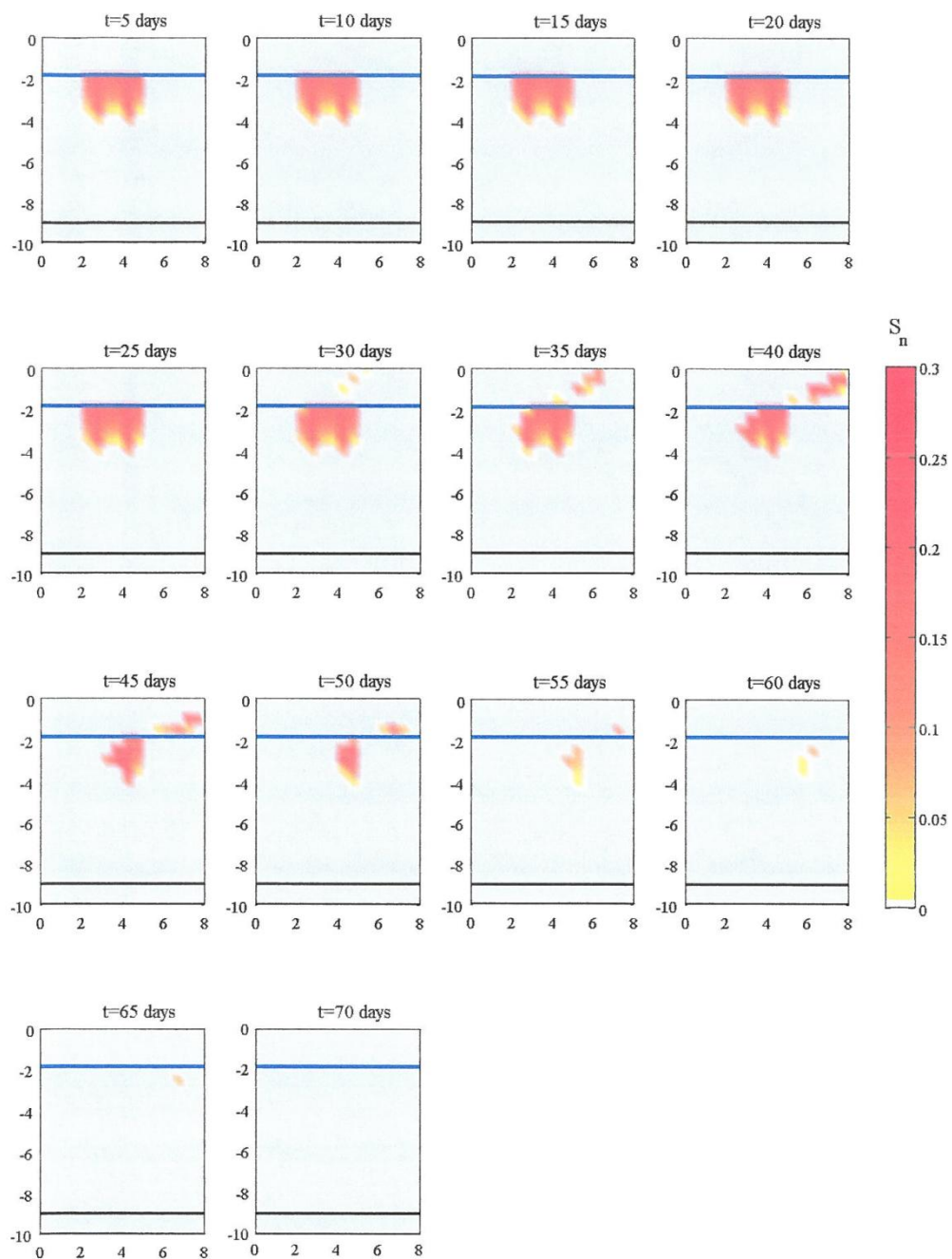
Για την προσομοίωση της εισπίεσης ατμού, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τα αποτελέσματα από το Στάδιο προσομοίωσης Γ και συγκεκριμένα για  $t=9$  χρόνια καθώς επίσης και τα εδαφικά χαρακτηριστικά του Πίνακα 4-2.

Η κατανομή του βαθμού κορεσμού TCE, κατά τη διάρκεια της απορρύπανσης με εισπίεση ατμού παρουσιάζεται, για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς, στις σελίδες που ακολουθούν. Για την περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O1 παρουσιάστηκαν προβλήματα σύγκλισης, η υπέρβαση των οποίων δεν κατέστη δυνατή. Ωστόσο, βάσει των αποτελεσμάτων μπορούν να εξαχθούν κάποια χρήσιμα συμπεράσματα.

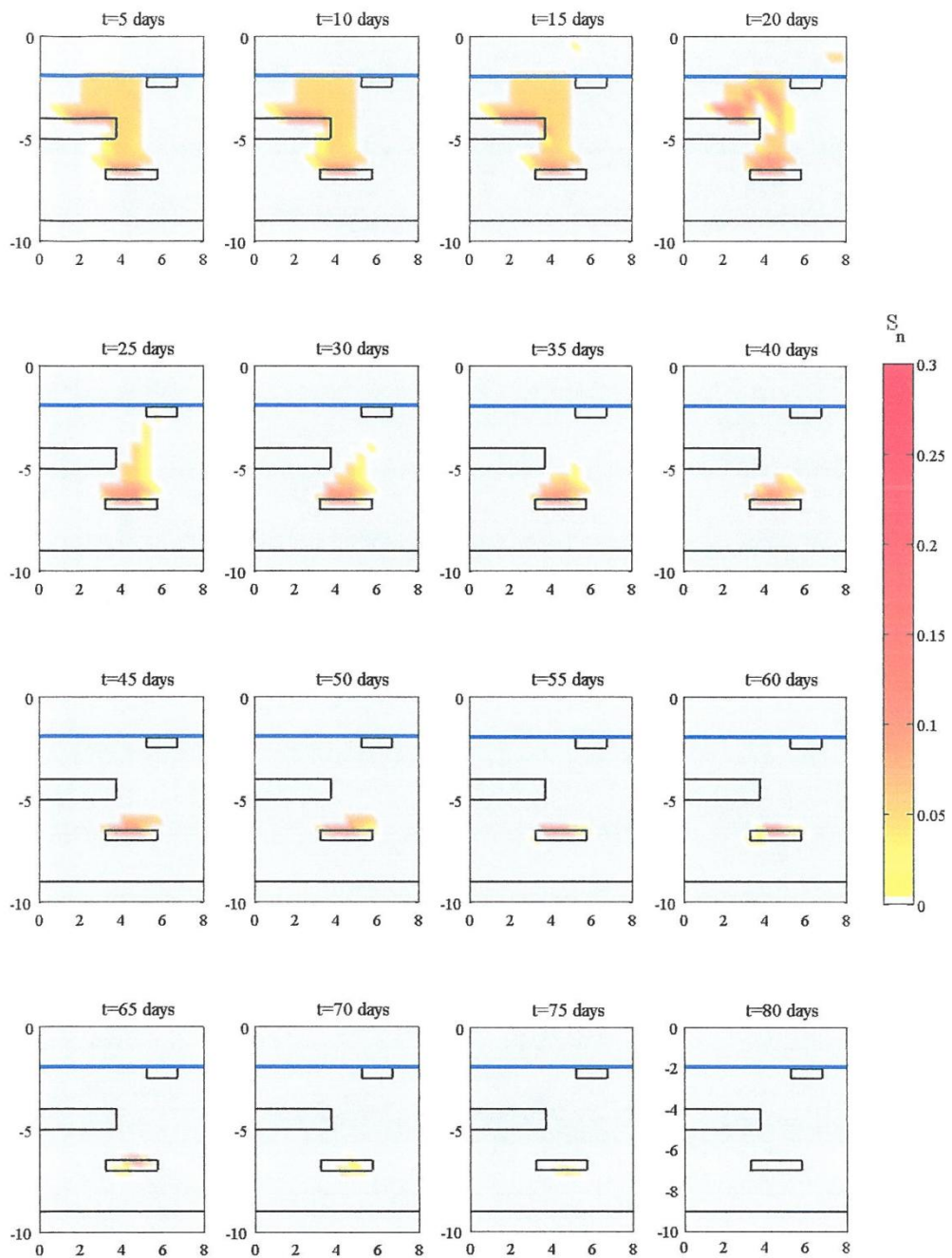


Σχήμα 4-13 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα Ο1 με εισπίεση ατμού: Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης.





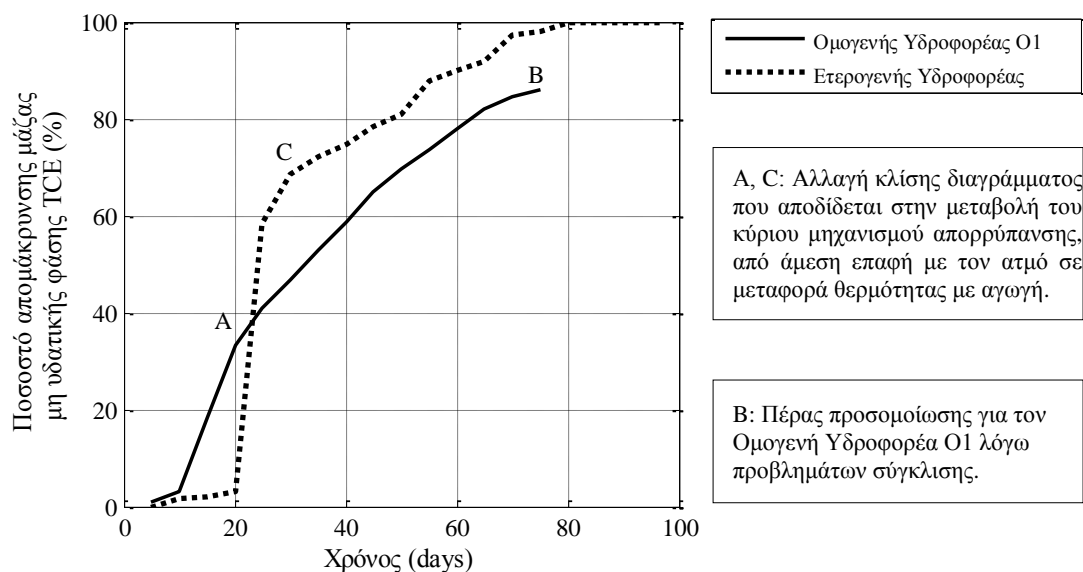
Σχήμα 4-14 Απορρύπανση ομογενούς υδροφορέα O<sub>2</sub> με εισπίεση ατμού:  
Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης



Σχήμα 4-15 Απορρύπανση ετερογενούς πεδίου με εισπίεση ατμού:  
Κατανομή TCE ανά χρονικό διάστημα πέντε ημερών από την έναρξη της απορρύπανσης

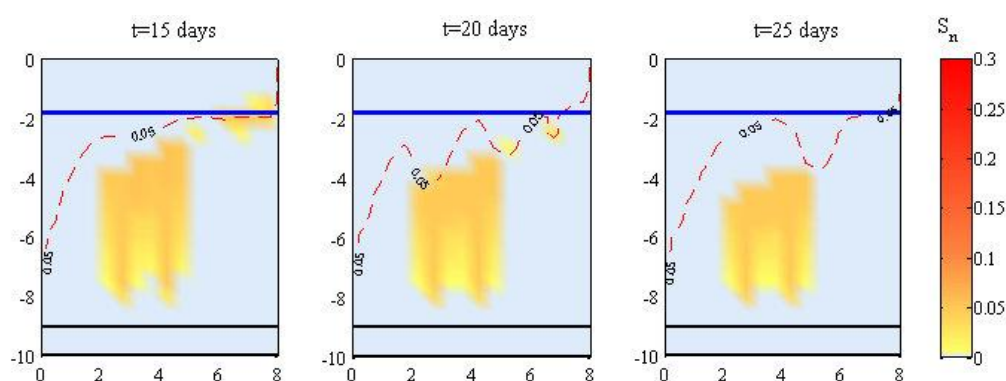
Σύμφωνα τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, η μέθοδος εισπίεσης ατμού απομακρύνει κατά 100% τη μάζα της μη υδατικής φάσης TCE από τον ετερογενή και ομογενή υδροφορέα O2, ενώ στον ομογενή υδροφορέα O1, όπου παρουσιάστηκαν προβλήματα σύγκλισης, τη χρονική στιγμή  $t=75$ days από την έναρξη της απορρύπανσης έχει απομακρυνθεί ποσοστό ίσο με 86%.

Ο ομογενής υδροφορέας O1 παρουσιάζει τα ίδια εδαφικά χαρακτηριστικά με το περατό έδαφος του ετερογενούς υδροφορέα, ενώ η συνολική παροχή ατμού είναι ίδια σε κάθε περίπτωση. Οι δύο υδροφορείς διαφέρουν ως προς την ετερογένεια και το βάθος της ρυπασμένης ζώνης και συνεπώς δύναται να συγκριθούν ως προς αυτό. Στο Σχήμα 4-16 απεικονίζεται το αθροιστικό ποσοστό απομάκρυνσης μάζας συναρτήσει του χρόνου για τους εν λόγω υδροφορείς. Παρατηρούμε ότι η μέθοδος είναι αποδοτικότερη στην περίπτωση του ετερογενούς υδροφορέα, ο οποίος χαρακτηρίζεται από μικρότερο βάθος ρυπασμένης ζώνης.



Σχήμα 4-16 Διάγραμμα Χρόνου-Ποσοστού απομάκρυνσης μάζας DNAPL για την περίπτωση εισπίεσης ατμού στον ομογενή (O1) και ετερογενή υδροφορέα..

Στο Σχήμα 4-16, τη χρονική στιγμή  $t=20$ days, η κλίση του διαγράμματος για την περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O1 μειώνεται σημαντικά (Σημείο A). Για  $t < 20$ days η μη υδατική φάση απομακρύνεται μέσω της άμεσης επαφής αυτής με τον εισπιεζόμενο ατμό (steam stripping), (Σχήμα 4-17,  $t=15$ days). Για  $t > 20$ days, και λόγω της διαφοράς πυκνότητας μεταξύ του ατμού και του νερού, ο ατμός παρακάμπτει (steam override) ένα σημαντικό μέρος της ρυπασμένης από DNAPL ζώνης (Davis, 1998) και συνεπώς για  $t > 20$ days ο κύριος μηχανισμός απομάκρυνσης του DNAPL είναι η μεταφορά θερμότητας με αγωγή που είναι εν γένει μία αργή διαδικασία (Gudbjerg et al., 2004) στην οποία και αποδίδεται η μεταβολή της κλίσης του διαγράμματος. Παρατηρούμε ακόμα ότι στο σημείο B (Σχήμα 4-16) η κλίση του διαγράμματος έχει μειωθεί περαιτέρω.



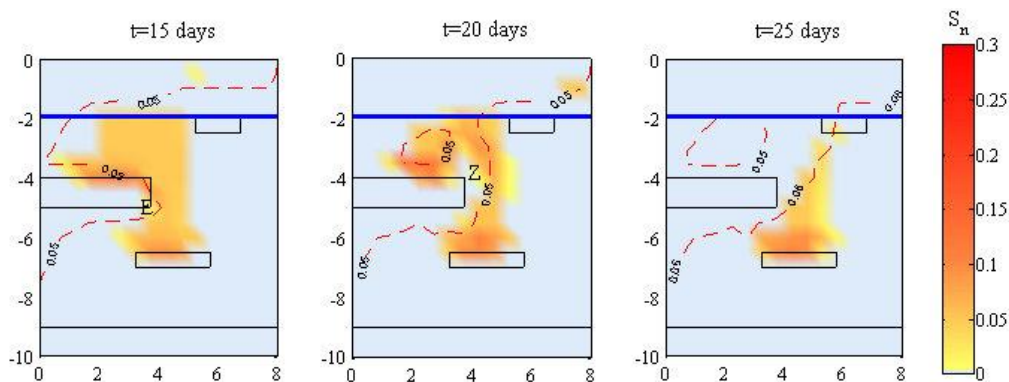
Σχήμα 4-17 Καμπύλες ίσου βαθμού κορεσμού αέριας φάσης (---) για  $t=15, 20$  και  $25$  ημέρες από την έναρξη εισπίεσης ατμού στον ομογενή υδροφορέα O1.

Καθώς αυξάνεται το βάθος της ρυπασμένης ζώνης, ο απαιτούμενος χρόνος απορρύπανσης με θερμική αγωγή, αυξάνεται για δύο λόγους: αυξάνεται αφενός το σημείο βρασμού του DNAPL με την αύξηση του βάθους και αφετέρου η απόσταση από τη ζώνη υψηλής θερμοκρασίας. Σύμφωνα με τον Gudbjerg et al. (2004), η μη υδατική φάση μετατρέπεται σε αέρια όταν η πίεση της αέριας φάσης (άθροισμα των μερικών πιέσεων της μη υδατικής φάσης, του νερού και του αέρα) γίνει μεγαλύτερη από την πίεση της μη υδατικής φάσης προσυαυξημένης κατά τη πίεση εισόδου της αέριας φάσης (η εν λόγω πίεση εισόδου αφορά σύστημα μη υδατικής φάσης – αέρα). Καθώς λοιπόν αυξάνεται το βάθος, η αύξηση της πίεσης του νερού συνεπάγεται αύξηση της πίεσης της μη υδατικής φάσης ( $P_n = P_w + P_c$ ) και άρα του σημείου βρασμού αυτής. Αυτός είναι και λόγος που ο ρυθμός απομάκρυνσης μάζας της μη υδατικής φάσης βαίνει μειούμενος με τη πάροδο του χρόνου, όπως άλλωστε καταδεικνύει και η συνεχής μείωση της κλίσης του διαγράμματος χρόνου – βαθμού απομάκρυνσης μάζας του ομογενούς υδροφορέα O1 (Σχήμα 4-16).

Από τον Πίνακα 2-7, στον οποίο παρουσιάστηκαν συνοπτικά τα περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου, παρατηρούμε ότι στις περιπτώσεις που το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι της τάξεως των 10.5 μέτρων, η μέθοδος εισπίεσης ατμού έχει χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με άλλες τεχνολογίες αποκατάστασης. Πιο συγκεκριμένα, τόσο στο Cape Canaveral FL αλλά και στο DOE Portsmouth, OH όπου εφαρμόστηκε η εν λόγω μέθοδος σε συνδυασμό με εισπίεση αέρα, το ποσοστό απομάκρυνσης δεν υπερέβη το 85%. Στην περίπτωση του Young-Rainey STAR Center, FL η από κοινού εφαρμογή της μεθόδου με άλλες θερμικές μεθόδους αποκατάστασης επέτυχε βαθμό απομάκρυνσης >99% για βάθος ρυπασμένης ζώνης ίσο με 10.7m. Στο A.G. Communications Site, όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης ήταν ίσο με 15 μέτρα, χρειάστηκε παρατεταμένη –τετραετής– εισπίεση ατμού για την επίτευξη βαθμού απομάκρυνσης 90%, που είχε ως αποτέλεσμα την αναποτελεσματική αξιοποίηση των οικονομικών πόρων. Τα παραπάνω καταδεικνύουν ότι η αποκλειστική εφαρμογή της μεθόδου εισπίεσης ατμού δεν είναι ιδιαιτέρως αποτελεσματική για την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης όταν το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι της τάξης των 10 μέτρων ή και μεγαλύτερο.

Στην περίπτωση του Alameda Point, Site 5, CA όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης ήταν ίσο με 6.5m, η εισπίεση ατμού επέτυχε βαθμό απομάκρυνσης μάζας TCE ίσο με 99% ενώ στο διδιάστατο ετερογενές πεδίο που εξετάζεται, επετεύχθη ολική απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης TCE. Στον ομογενή υδροφορέα O<sub>2</sub>, όπου το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι ίσο με 4.5 μέτρα, η απομάκρυνση κατά 100% της μη υδατικής φάσης επιτυγχάνεται σε διάστημα 70 ημερών. Παρατηρούμε ότι η αποκλειστική εφαρμογή της εισπίεσης ατμού συνιστάται σε περιπτώσεις όπου η ρυπασμένη ζώνη εκτείνεται μέχρι 6-7 m από τη στάθμη του εδάφους για στάθμη υδροφόρου ορίζοντα περί τα -2 έως -3m. Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, οι παράγοντες που επηρεάζουν το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι η ύπαρξη ετερογένειας και τα εδαφικά χαρακτηριστικά: υδραυλική αγωγιμότητα, παραμένον βαθμός κορεσμού μη υδατικής φάσης και τριχοειδής πίεση.

Στο Σχήμα 4-16 και συγκεκριμένα για τον ετερογενή υδροφορέα, παρατηρούμε ότι μεταξύ των χρονικών στιγμών  $t=20$ days και  $t=25$ days απομακρύνεται –εντός μικρού χρονικού διαστήματος– σημαντική ποσότητα μη υδατικής φάσης. Προκειμένου να δώσουμε μία ερμηνεία, σχεδιάζονται οι καμπύλες ίσου βαθμού κορεσμού της αέριας φάσης ( $S_g=0.05$ ) για τις χρονικές στιγμές  $t=15$ , 20 και 25 ημέρες. Στο Σχήμα 4-18 απεικονίζονται οι καμπύλες αυτές.



Σχήμα 4-18 Καμπύλες ίσου βαθμού κορεσμού αέριας φάσης (---) 15, 20 και 25 ημέρες από την έναρξη εισπίεσης ατμού στο ετερογενές πεδίο.

Στο Σχήμα 4-18 διαπιστώνουμε ότι η αέρια φάση, και συγκεκριμένα η προερχόμενη από την εισπίεση ατμού σε βάθος μεγαλύτερο των πέντε μέτρων, κινείται παράλληλα στην αργιλική στρώση χαμηλής περατότητας. Αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι η αέρια φάση επιλέγει να κινηθεί στο μέσο που παρουσιάζει τη μεγαλύτερη περατότητα, δηλαδή στην άμμο έναντι της αργίλου. Τη χρονική στιγμή  $t=15$  days, η αέρια φάση έχει φτάσει στο σημείο E, που αντιστοιχεί στο πέρας του μήκους της αργιλικής στρώσης ( $x \sim 4$  m), ενώ τη χρονική στιγμή  $t=20$  days, η αέρια φάση, αφενός λόγω άνωσης και αφετέρου λόγω απουσίας αργιλικής στρώσης για  $x > 4$  m κινείται προς τα άνω (Σημείο Z). Συνεπώς για  $t > 20$  days συνεισφέρει στην απομάκρυνση της κύριας μάζας μη υδατικής φάσης (περιοχή σημείου Z) το σύνολο του εισπιεζόμενου ατμού, και με τον τρόπο αυτό αυξάνεται σημαντικά η ταχύτητα απορρύπανσης. Για  $t > 30$  days η απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης πραγματοποιείται μέσω μεταφοράς θερμότητας με αγωγή, στην οποία και αποδίδεται η αλλαγή της κλίσης του διαγράμματος (Σημείο C, Σχήμα 4-16). Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι η αργιλική στρώση χαμηλής περατότητας έχει ευνοϊκή επίδραση στην επίδοση τη μεθόδου: περιορίζει τη κατακόρυφη κατανομή τη μη υδατικής φάσης και αυξάνει την οριζόντια κινητικότητα της αέριας φάσης. Το φαινόμενο αυτό αναφέρεται από την Davis (1998) τον όρο «Channeling» και σύμφωνα με την ίδια πρωτοπαρατηρήθηκε από τους Farouq Ali & Meldau (1979). Η ίδια αναφέρει ακόμα ότι στην περίπτωση που υπάρχουν ετερογένειες, η αέρια φάση ενδέχεται να παρακάμψει τμήματα του υπεδάφους ρυπασμένα από μη υδατική φάση με αποτέλεσμα τη μείωση της επίδοσης της μεθόδου. Στον εξεταζόμενο ετερογενή υδροφορέα, κάτι τέτοιο δεν παρατηρήθηκε αφενός γιατί η εισπίεση πραγματοποιήθηκε καθ' όλο σχεδόν το ύψος του πεδίου και αφετέρου γιατί η αργιλική στρώση είχε πάχος ενός μόλις μέτρου.

Επιπρόσθετα, αρκετοί ερευνητές (Stroo et al., 2012) πρεσβεύουν την άποψη ότι σε ετερογενή εδάφη, η μέθοδος εισπίεσης ατμού θα πρέπει να χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με άλλες, κυρίως θερμικές, τεχνολογίες αποκατάστασης. Για τον ετερογενή υδροφορέα που εξετάστηκε κάτι τέτοιο δεν επαληθεύτηκε. Αντιθέτως, η εισπίεση ατμού, επέτυχε ολική απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης σε ετερογενές έδαφος με βάθος ρυπασμένης ζώνη επτά μέτρων σε χρονικό διάστημα 80 ημερών, όταν η συνήθης διάρκεια εφαρμογής της μεθόδου κυμαίνεται από δύο έως έξι μήνες για την περίπτωση των πτητικών οργανικών ρύπων (Kingston et al., 2010). Λαμβάνοντας υπόψη τα όσα αναφέρθηκαν προηγουμένως, ο συνδυασμός της μεθόδου με άλλες θερμικές τεχνολογίες αποκατάστασης κρίνεται απαραίτητος όταν η ρυπασμένη ζώνη εκτείνεται σε σημαντικό βάθος από τη στάθμη του εδάφους, της τάξης των 10 ή περισσότερων μέτρων.

### 4.3.3 Έλεγχος τάσεων εδάφους

Κατά την εφαρμογή της μεθόδου εισπίεσης ατμού για την απορρύπανση υδροφορέων, θα πρέπει να πραγματοποιηθεί έλεγχος ως προς τις τάσεις του εδάφους. Ο έλεγχος αυτός πραγματοποιείται προκειμένου να σιγουρευτούμε ότι οι κόκκοι του εδάφους παραμένουν σε επαφή μεταξύ τους κατά την εισπίεση ατμού. Σε περίπτωση που δεν ικανοποιείται η προαναφερθείσα συνθήκη, το έδαφος ρηγματώνεται με αποτέλεσμα τη διαφυγή της αέριας φάσης προς την επιφάνεια του εδάφους Davis (1998).

Προκειμένου οι κόκκοι του εδάφους να παραμένουν σε επαφή, θα πρέπει η ενεργός τάση  $\sigma'$ , η οποία εκφράζει την ορθή δύναμη που μεταφέρεται μεταξύ της επιφάνεια επαφής των κόκκων, να είναι μεγαλύτερη ή ίση του μηδενός (Καββαδάς 2010). Σύμφωνα με την θεμελιώδη αρχή της εδαφομηχανικής, η ενεργός τάση συνδέεται με την ολική τάση  $\sigma$  και την πίεση των πόρων  $u$  μέσω της σχέσης  $\sigma' = \sigma - u$ . Συνεπώς, ο περιορισμός που πρέπει να ικανοποιείται σε κάθε σημείο του εδάφους λαμβάνει τη μορφή:

$$u < \sigma \quad (3.22)$$

Ο έλεγχος αυτός θα πραγματοποιηθεί στα σημεία εισπίεσης ατμού καθώς σε αυτά αναμένεται να σημειωθεί αστοχία του εδάφους. Στα σημεία εισπίεσης ατμού, η παρούσες φάσεις είναι η αέρια και η υδατική. Καθώς η υδατική φάση συνιστά τη διαβρέχουσα φάση, οι πόροι του εδάφους διαβρέχονται από αυτήν και θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ότι η πίεση των πόρων ισούται με τη πίεση της υδατικής φάσης σε κάθε σημείο εισπίεσης. Στο ενδεχόμενο όμως που σε πραγματικές συνθήκες πεδίου δεν ισχύει η προαναφερθείσα παραδοχή, και ιδίως στην περίπτωση που οι τριχοειδείς πιέσεις είναι σημαντικές, η πίεση της αέριας φάσης θα πρέπει να ληφθεί υπόψη. Σύμφωνα με τον Pinder (2008), όταν οι συνυπάρχουσες φάσεις είναι η υδατική και η αέρια, η πίεση των πόρων υπολογίζεται ως ο σταθμισμένος μέσος των πιέσεων της υδατικής και αέριας φάσης. Οι πιέσεις αυτές σταθμίζονται, σύμφωνα με τον ίδιο ερευνητή, με την παράμετρο του *Bishop* ( $w$ ). Σε αυτή την περίπτωση, η πίεση των πόρων  $u$  υπολογίζεται ως εξής:

$$u = wP_w + (1-w)P_g \quad , 0 \leq w \leq 1 \quad (3.23)$$

όπου η παράμετρος  $w$  υπολογίζεται ως το ποσοστό της επιφάνειας της στερεάς φάσης που διαβρέχεται από την υδατική φάση. Επειδή σε κάθε περίπτωση ισχύει ότι  $P_g > P_w$ , θεωρούμε, προς χάριν ευκολίας, ότι  $w=0$  και συνεπώς  $u=P_g$ . Η θεώρηση αυτή είναι υπέρ της ασφαλείας σε ότι αφορά τον έλεγχο των τάσεων (3.22).



Για τον υπολογισμό της ολικής τάσης  $\sigma$  σε κάθε σημείο εισπίεσης (σημείο ελέγχου) θα πρέπει να ληφθεί υπόψη η κατακόρυφη κατανομή του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης από τη στάθμη του εδάφους μέχρι το σημείο ελέγχου. Προς χάριν ευκολίας, θεωρούμε ότι ο βαθμός κορεσμού της υδατικής φάσης από τη στάθμη του εδάφους μέχρι το σημείο ελέγχου είναι μηδενικός και άρα, η ολική τάση στο σημείο ελέγχου θα ισούται με  $\gamma_{\xi}z$ , όπου  $\gamma_{\xi}$  το ειδικό βάρος του ξηρού εδάφους. Βάσει των παραπάνω, και θεωρώντας ότι το πορώδες και η πυκνότητα των στερεών κόκκων δεν μεταβάλλονται με το βάθος  $z$ , ο έλεγχος των τάσεων σε τυχόν σημείο A, λαμβάνει τη μορφή:

$$P_g(z_A) < [(1-n)\rho_s g] \cdot z_A = \sigma(z_A) \quad (3.24)$$

όπου:  $P_g(z_A)$  η πίεση της αέριας φάσης στο σημείο A (Pa)

$n$ : το πορώδες

$\rho_s$ : η πυκνότητα των στερεών κόκκων ( $\text{kg/m}^3$ )

$g$ : η επιτάχυνση της βαρύτητας ( $\text{m/s}^2$ )

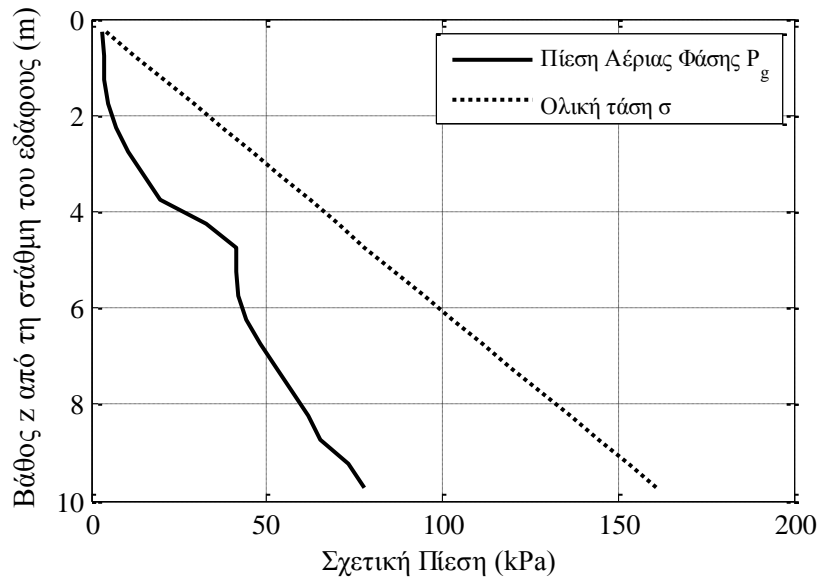
$z_A$ : η απόσταση του σημείου A από την επιφάνεια του εδάφους (m)

Ο έλεγχος των τάσεων πραγματοποιήθηκε για το σύνολο των υδροφορέων που εξετάστηκαν στις προηγούμενες παραγράφους. Συγκεκριμένα, ο έλεγχος των τάσεων πραγματοποιήθηκε για όλους τους πεπερασμένους όγκους που εφάπτονται στην ανάντη παρειά του διδιάστατου πεδίου κατά τη χρονική στιγμή όπου επήλθε απορρύπανση<sup>1</sup>. Προέκυψε ότι ο έλεγχος ικανοποιείται για το σύνολο των περιπτώσεων που εξετάστηκαν, με εξαίρεση τον πεπερασμένο όγκο σε βάθος 0.25 m από την επιφάνεια του εδάφους για την περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O2. Η αστοχία αυτή θεωρείται αποδεκτή και συνεπώς ο έλεγχος των πιέσεων δεν αποτελεί περιοριστικό παράγοντα για την εφαρμογή της μεθόδου εισπίεσης ατμού. Το συμπέρασμα αυτό είναι ουσιώδες καθώς για το σύνολο των περιπτώσεων που εξετάστηκαν η απορρύπανση ολοκληρώθηκε σε χρονικό διάστημα αντίστοιχο με αυτό που απαντάται σε πραγματικά περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου.

---

<sup>1</sup> Για την περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα O1, ο έλεγχος των τάσεων πραγματοποιήθηκε για τη χρονική στιγμή  $t=75\text{days}$ .

Τέλος, στο Σχήμα 4-19 παρουσιάζεται ενδεικτικώς ο έλεγχος των τάσεων για τον ετερογενή υδροφορέα. Παρατηρούμε ότι ο έλεγχος των τάσεων ικανοποιείται ( $P_g < \sigma$ ) για το σύνολο των πεπερασμένων όγκων που εφάπτονται στην ανάντη παρειά του διδιάστατου πεδίου.



Σχήμα 4-19 Έλεγχος τάσεων εδάφους για την περίπτωση εισπίεσης ατμού στον ετερογενή υδροφορέα,  $t=75$ days. Παρατηρούμε ότι  $P_g < \sigma$  και συνεπώς ο έλεγχος ικανοποιείται.

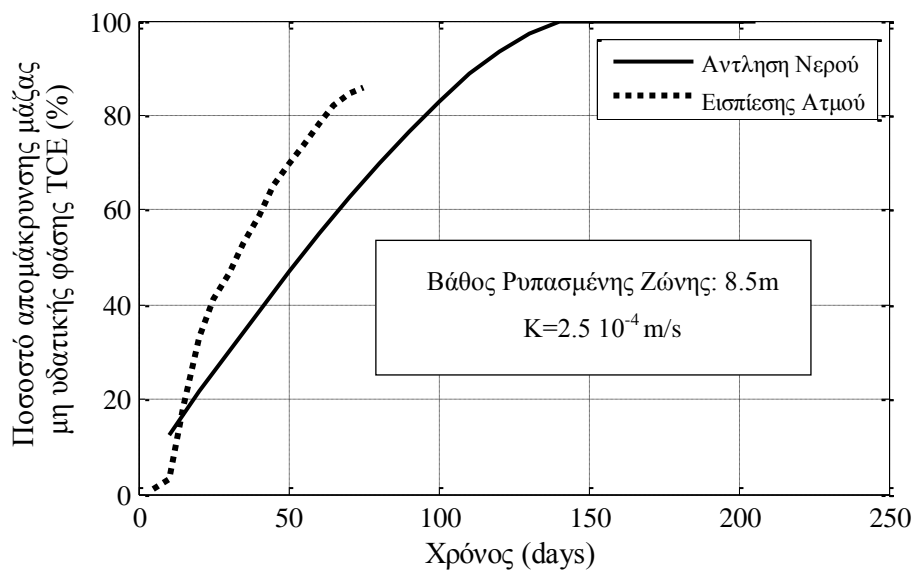
Είναι ακόμα εμφανές ότι για  $z > 6$ m η παροχή του ατμού δύναται να αυξηθεί περαιτέρω και συνεπώς η ομοιόμορφη κατανομή εισπίεσης ατμού που θεωρήθηκε στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας ενδέχεται να μην είναι η βέλτιστη για την απορρύπανση του διδιάστατου πεδίου.

#### 4.3.4 Σύγκριση της επίδοσης των δύο μεθόδων

Στο παρόν εδάφιο πραγματοποιείται σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων άντλησης νερού/ εισπίεσης ατμού για κάθε έναν από τους εξεταζόμενους υδροφορείς.

##### Ομογενής Υδροφορέας O1

Στο Σχήμα 4-20 απεικονίζεται το διάγραμμα χρόνου - ποσοστού απομάκρυνσης μη υδατικής φάσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O1.

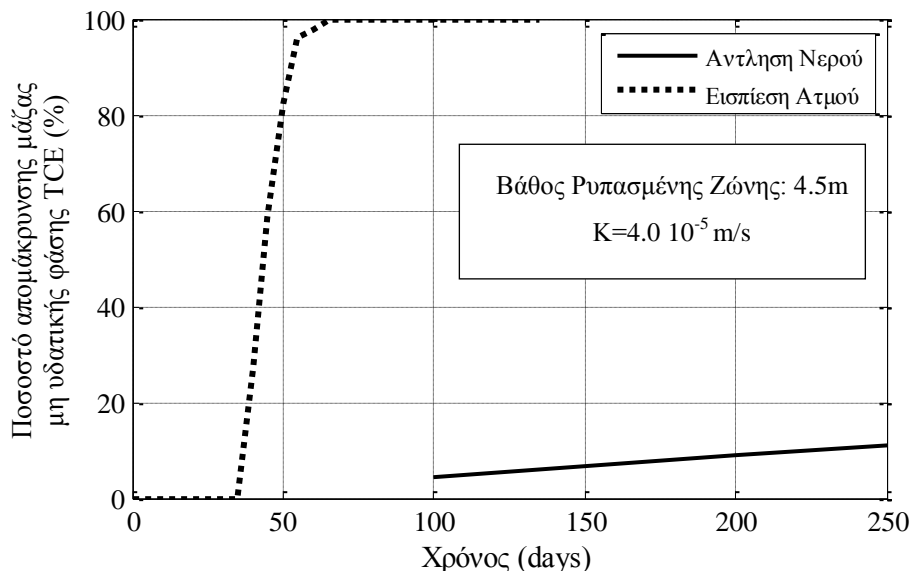


Σχήμα 4-20 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O1.

Στην περίπτωση του ομογενούς υδροφορέα, με βάθος ρυπασμένης ζώνης ίσο με 8.5m, οι δύο τεχνολογίες αποκατάστασης παρουσιάζουν αντίστοιχη επίδοση. Για τον λόγο αυτό η επιλογή της μίας ή της άλλης τεχνολογίας θα πρέπει να βασιστεί σε τεχνοοικονομικά κριτήρια. Θα πρέπει ακόμα να επισημάνουμε ότι η θεώρησης ομογενούς εδάφους είναι εξιδανικευμένη και η ύπαρξη έστω και μικρού βαθμού ετερογένειας αναμένεται να προκαλέσει, ενδεχομένως σημαντική, μείωση της αποτελεσματικότητας της μεθόδου άντλησης και επεξεργασίας. Για τον λόγο αυτό, η άντληση και επεξεργασία συνιστάται όταν δεν υφίσταται ανασφάλεια ως προς την ύπαρξη ετερογενειών, πράγμα που απαιτεί τη δαπάνη σημαντικών οικονομικών πόρων για τον λεπτομερή χαρακτηρισμό του υπεδάφους.

## Ομογενής Υδροφορέας O<sub>2</sub>

Στο Σχήμα 4-21 απεικονίζεται το διάγραμμα χρόνου- ποσοστού απομάκρυνσης μη υδατικής φάσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O<sub>2</sub>.

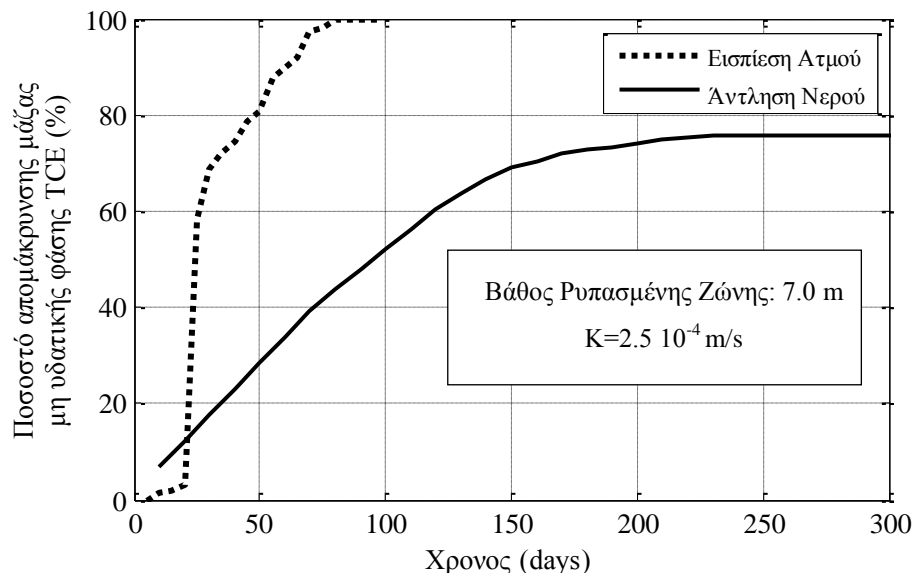


Σχήμα 4-21 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ομογενή υδροφορέα O<sub>2</sub>.

Για την περίπτωση του Ομογενούς υδροφορέα O<sub>2</sub>, είναι εμφανής η υπεροχή της εισπίεσης ατμού έναντι της άντλησης νερού. Η μειωμένη αποδοχή της άντλησης νερού αποδίδεται αφενός στη μικρή υδραυλική αγωγιμότητα του υδροφορέα και αφετέρου στο μικρό βάθος της ρυπασμένης ζώνης, το οποίο επηρεάζεται σημαντικά από τον παραμένοντα βαθμό κορεσμού της μη υδατικής φάσης. Στην περίπτωση που το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι μικρό (<4m) ή/και η υδραυλική αγωγιμότητα του εδάφους μικρή (<10<sup>-4</sup>m/s) συνιστάται η εισπίεση ατμού έναντι της άντλησης και επεξεργασίας. Σε αντίθεση με την άντληση νερού, η επίδοση της εισπίεσης ατμού δεν επηρεάζεται σημαντικά από την υδραυλική αγωγιμότητα, παρά μόνο σε ό,τι αφορά τις πιέσεις των πόρων. Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι όταν το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι μικρό και η πρόσβαση στον ρύπο δεν περιορίζεται από υπέργειες κατασκευές τότε θα πρέπει να εξετασθεί και η εφαρμογή άλλων, πιο οικονομικών τεχνολογιών αποκατάστασης (πχ εκσκαφή και βιοαποκατάσταση). Στην περίπτωση που η πρόσβαση στον ρύπο παρεμποδίζεται από υπέργειες κατασκευές συνιστάται η εφαρμογή της μεθόδου εισπίεσης ατμού (Davis 1997).

### Ετερογενής Υδροφορέας

Στο Σχήμα 4-22 παρουσιάζεται συγκριτικά η επίδοση των δύο τεχνολογιών για τον ετερογενή υδροφορέα.



Σχήμα 4-22 Σύγκριση της επίδοσης των μεθόδων εισπίεσης ατμού/άντλησης νερού για τον ετερογενή υδροφορέα.

Για τον ετερογενή υδροφορέα είναι εμφανής η καταλληλότητα της εισπίεσης ατμού έναντι της άντλησης νερού. Η άντληση νερού επιτυγχάνει μέγιστο βαθμό απομάκρυνσης μάζας μη υδατικής φάσης TCE ίσο με 75%, ενώ αύξηση της ετερογένειας του εδάφους αναμένεται να μειώσει περαιτέρω το εν λόγω ποσοστό. Αντιθέτως, η εισπίεση ατμού επιτυγχάνει ολική απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης εντός χρονικού διαστήματος τριών περίπου μηνών, χωρίς να απαιτείται η από κοινού εφαρμογή της μεθόδου με άλλες τεχνολογίες αποκατάστασης. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η αποκλειστική εφαρμογή της εισπίεσης ατμού συνιστάται σε περιπτώσεις όπου η ρυπασμένη ζώνη εκτείνεται σε βάθος μέχρι 6-7m από τη στάθμη του εδάφους, για στάθμη υδροφόρου ορίζοντα περί τα -2 έως -3m.

#### 4.4 Κύρια σημεία κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάστηκε η απορρύπανση διδιάστατου πεδίου με εφαρμογή των μεθόδων άντλησης νερού και εισπίεσης ατμού. Εξετάστηκαν τρεις υδροφορείς, δύο ομογενείς και ένας ετερογενής, για τους οποίους πραγματοποιήθηκε σύγκριση ως προς την επίδοση των μεθόδων. Τα κύρια σημεία του κεφαλαίου, παρουσιάζονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

Για την απορρύπανση με άντληση νερού εφαρμόστηκε υδραυλική κλίση ίση με 3%. Για την προσομοίωση της άντλησης νερού εφαρμόστηκαν οι παραδοχές της οριζόντιας ροής, δηλαδή υδροστατική κατανομή των πιέσεων και φρέαρ πλήρους διείδυσης στην ανάντη και κατάντη παρειά του πεδίου, αντίστοιχα. Με τη θεώρηση οριζόντιας ροής, το μήκος του θεωρούμενου διδιάστατου πεδίου δεν επηρεάζει τον απαιτούμενο χρόνο για την απομάκρυνση της μη υδατικής φάσης, και αυτό ήταν επιθυμητό καθώς κατά την εφαρμογή ενός συστήματος άντλησης και επεξεργασίας η απόσταση μεταξύ των φρεάτων αναμένεται να είναι μεγαλύτερη από αυτήν που εφαρμόζεται στην εισπίεση ατμού (~8m). Για την απορρύπανση με άντληση νερού υποθέσαμε ακόμα ισορροπία μεταξύ των φάσεων, δηλαδή θεωρήσαμε ότι δεν υπάρχει περιορισμός σε ότι αφορά τον ρυθμό διάλυσης (dissolution rate) της μη υδατικής φάσης.

Για τις ανωτέρω παραδοχές, οι οποίες είναι ευμενείς ως προς τον απαιτούμενο χρόνο απορρύπανσης, προέκυψε ότι **η μέθοδος άντλησης νερού δύναται να απορρυπάνει, σε χρόνο αντίστοιχο με την εισπίεση ατμού, ομογενή και περατά ( $K > 10^{-4}$  m/s ) εδάφη τα οποία χαρακτηρίζονται από σημαντικό βάθος ρυπασμένης ζώνης και μικρό βαθμό κορεσμού μη υδατικής φάσης.** Μείωση της υδραυλικής αγωγιμότητας μειώνει την αποτελεσματικότητα της μεθόδου (σε όρους απαιτούμενου χρόνου εφαρμογής), ενώ η ύπαρξη έστω και μικρού βαθμού ετερογένειας αναμένεται να προκαλέσει, ενδεχομένως σημαντική, μείωση στην επίδοση της μεθόδου. Για την εξάλειψη της ανωτέρω ανασφάλειας απαιτείται λεπτομερής χαρακτηρισμός του υπεδάφους, που συνεπάγεται πρόσθετο κόστος.

Για την απορρύπανση με εισπίεση ατμού θεωρήθηκε ομοιόμορφη καθ' ύψος παροχή ατμού στα ανάντη του πεδίου, ενώ στην κατάντη παρειά του πεδίου φρέαρ πλήρους διείσδυσης και άντληση αέριας φάσης από την κορεσμένη και ακόρεστη ζώνη, αντίστοιχα. Από τους υδροφορείς που εξετάστηκαν, σε συνδυασμό με μελέτη των περιστατικών εφαρμογής της εισπίεσης ατμού προέκυψε ότι **η εισπίεση ατμού δύναται να εφαρμοσθεί αυτόνομα για την απορρύπανση ομογενών ή ετερογενών υδροφορέων με βάθος ρυπασμένης ζώνης μικρότερο ή ίσο των 7 μέτρων από τη στάθμη του εδάφους**. Τόσο στις προσομοιώσεις όσο και στα περιστατικά η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα ήταν περί τα -2m από τη στάθμη του εδάφους. Στην περίπτωση που το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι μικρό (2-4m) και η πρόσβαση στον ρύπο δεν παρεμποδίζεται από υπέργειες κατασκευές, θα πρέπει να εξετασθεί η εφαρμογή άλλων, πιο οικονομικών μεθόδων αποκατάστασης, όπως για παράδειγμα εκσκαφή και βιοαποκατάσταση.

Σε ότι αφορά τον ομογενή υδροφορέα με βάθος ρυπασμένης ζώνης ίσο με 8.5m, η επίδοση της μεθόδου εισπίεσης ατμού παρατηρήθηκε μειωμένη. Εν συνεχεία, μελετώντας τα περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου που χαρακτηρίζονται από σημαντικό βάθος ρυπασμένης ζώνης (>10m) διαπιστώθηκε ότι στην πλειονότητα αυτών η εισπίεση ατμού έχει εφαρμοσθεί σε συνδυασμό με άλλες τεχνολογίες αποκατάστασης. Στις περιπτώσεις σημαντικού βάθους ρυπασμένης ζώνης, όπου εφαρμόστηκε αποκλειστικά η εισπίεση ατμού, απαιτήθηκε παρατεταμένη εφαρμογή της μεθόδου ή επετεύχθη μερική απομάκρυνση μάζας (~80%). Συνεπώς, **στην περίπτωση όπου η ρυπασμένη ζώνη ή/και οι ετερογένειες εκτείνονται σε σημαντικό βάθος από τη στάθμη του εδάφους (>10m), η εισπίεση ατμού θα πρέπει να χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με άλλες, κυρίως θερμικές, τεχνολογίες αποκατάστασης**.

Σε αντίθεση με την άντληση νερού, η υδραυλική αγωγιμότητα δεν επηρεάζει σημαντικά την επίδοση της εισπίεσης ατμού. **Ο έλεγχος των τάσεων του εδάφους εν γένει ικανοποιείται και δεν αποτελεί περιοριστικό παράγοντα για την εφαρμογή της μεθόδου**. Το συμπέρασμα αυτό είναι ουσιώδες καθώς στο σύνολο των περιπτώσεων που εξετάστηκαν, η απορρύπανση του υδροφορέα επήλθε σε χρονικό διάστημα 2-3 μηνών, που αντιστοιχεί σε πραγματικά περιστατικά εφαρμογής της μεθόδου. Παρατηρήθηκε ακόμα ότι η παροχή του ατμού δύναται να αυξηθεί σημαντικά συναρτήσει του βάθους από τη στάθμη του εδάφους.

Στην περίπτωση του ετερογενούς υδροφορέα, η αργλική στρώση είχε θετική επίδραση στην επίδοση της μεθόδου εισπίεσης ατμού γιατί περιόρισε σημαντικά τόσο το βάθος της ρυπασμένης ζώνης όσο και την κατακόρυφη κινητικότητα της αέριας φάσης. Αν το μήκος της θεωρούμενης αργλικής στρώσης ήταν μικρότερο ή η ετερογένεια του υδροφορέα διαφορετική, η αποτελεσματικότητα της μεθόδου – σε όρους απαιτούμενου χρόνου εφαρμογής – δεν θα ήταν η ίδια. Συνεπώς, **η αποτελεσματικότητα της μεθόδου εισπίεσης ατμού (σε ότι αφορά τον απαιτούμενο χρόνο εφαρμογής) εξαρτάται από την εκάστοτε ετερογένεια του υδροφορέα, πράγμα που καταδεικνύει τη σπουδαιότητα της αριθμητικής προσομοίωσης προτού η μέθοδος εφαρμοσθεί τελικώς σε συνθήκες πεδίου.**



## 5 Γενικά Συμπεράσματα

Οι διαπιστώσεις καθώς επίσης και τα συμπεράσματα που προέκυψαν από την απορρύπανση εδαφικής στήλης και διδιάστατου πεδίου, παρουσιάστηκαν ενδελεχώς στις παραγράφους 3.5 και 4.4 αντίστοιχα. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται συνοπτικώς τα γενικά συμπεράσματα της εργασίας.

Από τη μονοδιάστατη ανάλυση που πραγματοποιήθηκε, κατέστη σαφές ότι για τις περιπτώσεις απλής γεωμετρίας - μονοδιάστατων πειραματικών διατάξεων, οι αναλυτικές λύσεις δύναται να προσομοιώσουν, με σημαντική ακρίβεια, τα αποτελέσματα των εργαστηριακών μετρήσεων. Είναι άλλωστε γνωστό από τη βιβλιογραφία ότι η υφιστάμενη αναλυτική λύση Buckley-Leverett παρουσιάζει ικανοποιητική ακρίβεια, η οποία, όπως διαπιστώθηκε στην παρούσα διπλωματική εργασία, αυξάνει σημαντικά με αύξηση της παροχής εισπίεσης νερού. Σε ότι αφορά την εισπίεση ατμού, η προτεινόμενη αναλυτική λύση παρουσιάζει μικρή απόκλιση από τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης και συνεπώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον ακριβή υπολογισμό του απαιτούμενου χρόνου απορρύπανσης, για οποιοδήποτε επιθυμητό ποσοστό απομάκρυνσης μάζας.

Για την απορρύπανση υδροφορέων από μη υδατική φάση, το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι τελικώς το κριτήριο εκείνο που καθορίζει αν η εισπίεση ατμού θα πρέπει να εφαρμοσθεί αυτόνομα ή σε συνδυασμό με άλλες, κατά προτίμηση θερμικές, τεχνολογίες αποκατάστασης. Όταν το βάθος της ρυπασμένης ζώνης είναι σημαντικό ( $\geq 10\text{m}$ ), ο συνδυασμός των μεθόδων κρίνεται επιβεβλημένος, ενώ για τις περιπτώσεις ιδιαιτέρως μικρού βάθους ρυπασμένης ζώνης (πχ 2-3m) θα πρέπει να εξετασθεί και η εφαρμογή άλλων, πιο οικονομικών μεθόδων αποκατάστασης (π.χ. εκσκαφή και βιοαποκατάσταση).

Σε αντίθεση με την άντληση νερού, η υδραυλική αγωγιμότητα δεν επηρεάζει σημαντικά την επίδοση της εισπίεσης ατμού. Ο έλεγχος των τάσεων του εδάφους εν γένει ικανοποιείται και δεν αποτελεί περιοριστικό παράγοντα για την απορρύπανση υπόγειων υδροφορέων με εισπίεση ατμού. Προέκυψε ακόμα ότι η παροχή ατμού δύναται να αυξηθεί σημαντικά συναρτήσει του βάθους από τη στάθμη του εδάφους και συνεπώς η ομοιόμορφη καθ' ύψος κατανομή ατμού που θεωρήθηκε στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας ενδέχεται να μην είναι η βέλτιστη.

Τέλος, διαπιστώθηκε ότι η μέθοδος άντλησης νερού δεν υστερεί πάντα σε επίδοση σε σχέση με την εισπίεση ατμού. Συγκεκριμένα, στην περίπτωση αμμώδους και ομογενούς υδροφορέα, ο οποίος χαρακτηρίζεται από σημαντικό βάθος ρυπασμένης ζώνης και μικρό βαθμό κορεσμού μη υδατικής φάσης, η απορρύπανση της πηγής μέσω διάλυσης μπορεί να επιτευχθεί σε λογικό χρονικό ορίζοντα, της τάξης των μερικών μηνών. Ωστόσο, επειδή η ύπαρξη ετερογένειας αναμένεται να έχει αρνητική επίδραση στην επίδοση της μεθόδου άντλησης και επεξεργασίας, κρίνεται απαραίτητος ο λεπτομερής χαρακτηρισμός του εδάφους, που συνεπάγεται πρόσθετο κόστος. Το κόστος αυτό αντισταθμίζεται, στην περίπτωση της εισπίεσης ατμού, από τα αυξημένα λειτουργικά και ενεργειακά κόστη.

## Βιβλιογραφία

Adamsky, M., Kremesec, V. & Charbeneau, R.J., 2005. *Residual Saturation: What is it? How is it Measured? How Should We Use it?* [Online] Available at: <http://info.ngwa.org/gwol/pdf/031977527.pdf>.

Adenakan, A.E. & Patzek, T.W., 1993. Modeling of Multiphase Transport of Multicomponent Organic Contaminants and Heat in the Subsurface: Numerical Model Formulation. *Water Resources Research*, 29, pp.3727-40.

Ahmed, T., 2006. *Reservoir Engineering Handbook*. 3rd ed. Burlington, MA, USA: Elsevier.

Al-Suhaili, R. & Faisal, A., 2012. Two-Phase Capillary Pressure-Saturation Relationship for Kerosene in Iraqi Sand. *Jordan Journal of Civil Engineering*, 6, pp.385-93.

Atkins, P. & Jones, L., 2009. *Chemical Principles*. 5th ed. W. H. Freeman.

Battelle, 2003. *Demonstration of Steam Injection/Extraction Treatment of a DNAPL Source Zone at Launch Complex 34 in Cape Canaveral Air Force Station*. Final Innovative Technology Evaluation Report. Columbus, OH: EPA, DOD.

Battelle, 2004. Successful Field-Scale in Situ Thermal NAPL Remediation at the Young-Rainey STAR Center. In *Remediation of Chlorinated and Recalcitrant Compounds - 2004*. Monterey, CA, 2004. Battelle Press.

Carsel, F. & Parrish, S., 1998. Developing joint probability distributions of soil and water retention characteristic. *Water Resources Publications*, 24(5), pp.755-69.

Cermak, V. & Rybach, L., 1982. Thermal Conductivity and Specific Heat of Minerals and Rocks. In *Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. 1st ed. Berlin: Springer. pp.305-43.

Chen, S.X., 2008. Thermal conductivity of sands. *Heat and Mass Transfer*, 44, pp.1241-46.

Class, H., Helmig, R. & Bastian, P., 2002. Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. 1. An efficient solution technique. *Advances in Water Resources*, 25, pp.533-50.

Clauser, C., 2011. *Thermal Storage and Transport Properties of Rocks, I: Heat Capacity and Latent Heat (preprint)*. Dordrecht, Germany.

Clu-in, 2013. *In Situ Thermal Treatment Site Profile Database*. [Online] Available at: [http://www.clu-in.org/products/thermal/usersearch/thermal\\_search.cfm](http://www.clu-in.org/products/thermal/usersearch/thermal_search.cfm).

Corey, A.T., 1994. *Mechanics of Immiscible Fluids in Porous Media*. Highlands Ranch, CO: Water Resources Publications.

Dane, J.H., Oostrom, M. & Missildine, B.C., 1994. *Determination of Capillary Pressure-Saturation Curves Involving TCE, Water and Air for a Sand and a Sandy Clay Loam*. Ada,OK: EPA.

Davis, E.L., 1997. *How heat can enhance in-situ soil and aquifer remediation: Important chemical properties and guidance on choosing the appropriate technique*. Ada, Oklahoma: Robert S. Kerr, Environmental Research Laboratory.

Davis, E.L., 1998. *Steam Injection for Soil and Aquifer Remediation*. Ada, Oklahoma: Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory.

EPA, 2000. *Hydrous Pyrolysis Oxidation/Dynamic Underground Stripping*. Visalia, California: EPA.

EPA, 2004. *In situ Thermal Treatment of Chlorinated Solvents: Fundamentals and Field Applications*. EPA 542-R-04-010. EPA.

EPA, 2012. *Technical Factsheet on: TRICHLOROETHYLENE*. [Online] Available at: <http://www.epa.gov/safewater/pdfs/factsheets/voc/tech/trichlor.pdf> [Accessed 2013].

Falta, R.W., Pruess, K., Finsterle, S. & Battistelli, A., 1995. *T2VOC User's Guide*. University of California, Berkeley: Lawrence Berkeley Laboratory Report.

Falta, R.W., Pruess, K., Javandel, I. & Witherspoon, P.A., 1992. Numerical Modeling of Steam Injection for the Removal of Nonaqueous Phase Liquids From the Subsurface 2. Code Validation and Application. *Water Resources Research*, 28, pp.451-65.

Farouki, O.T., 1981. *Thermal Properties of Soils*. Hanover, New Hampshire, USA: U.S. Army Corps of Engineers.

Gudbjerg, J., 2003. *Remediation by steam injection*, PhD Thesis. [http://www.fiva.dk/doc/thesis/gudbjerg\\_dissertation.pdf](http://www.fiva.dk/doc/thesis/gudbjerg_dissertation.pdf): DTU, Denmark.

Gudbjerg, J., Sonnenborg, T.O. & Jensen, K.H., 2004. Remediation of NAPL below the water table by steam-induced heat conduction. *Journal of Contaminant Hydrology*, 72, pp.207-25.

Heron, G., 2006. Heat it All the Way - Mechanisms and Results Achieved using In-Situ Thermal Remediation. In *Remediation of Chlorinated and Recalcitrant Compounds: Proceedings of the Fifth International Conference*. Columbus, OH, 2006.

Heron, G., Carroll, S. & Nielsen, S., 2005. Full-Scale Removal of DNAPL Constituents Using Steam-Enhanced Extraction and Electrical Resistance Heating. *GroundWater Monitoring & Remediation*, 25, pp.92-107.

Heron, G., Carroll, S. & Sowers, H., 2001. Steam Stripping/Hydrous Pyrolysis Oxidation for In-Situ Remediation of a TCE DNAPL Spill. In *2001 International Containment & Remediation Technology Conference and Exhibition*. Orlando, Florida, 2001.

Heron, G., Christensen, T. & Enfield, C., 1998. Henry's Law Constant for Trichloroethylene between 10 and 95°C. *Environmental Science and Technology*, 32, pp.1433-37.

Heron, G., Kingston, J. & Dahlen, P., 2010. *Critical Evaluation of State-of-the-Art In Situ Thermal Treatment Technologies for DNAPL Source Zone Treatment*. ESTCP.

Kaslusky, S.F. & Udell, K.S., 2002. A theoretical model of air and steam co-injection to prevent the downward migration of DNAPLs during steam-enhanced extraction. *Journal of Contaminant Hydrology*, 55, pp.213-32.

Kaslusky, S.F. & Udell, K.S., 2005. Co-injection of air and steam for the prevention of the downward migration of DNAPLs during steam enhanced extraction: An experimental

evaluation of optimum injection ration predictions. *Journal of Contaminant Hydrology*, 77, pp.325-47.

Kavanaugh, M. & Rao, S., 2003. *The DNAPL Remediation Challenge: Is there a case for Source Depletion?* Ada, Oklahoma: EPA.

Kingston, J. et al., 2010. *Critical Evaluation of State-of-the-Art In Situ Thermal Treatment Technologies for DNAPL Source Zone Treatment*. ESTCP.

Kleppe, J., 2012. *Reservoir Recovery Techniques 2012, Buckley-Leverett Analysis*. [Online] Available at: <http://www.ipt.ntnu.no/~kleppe/TPG4150/BL.pdf> [Accessed 2013].

Knauss, K. et al., 2000. The aqueous solubility of trichloroethylene (TCE) and tetrachloroethylene (PCE) as a function of temperature. *Applied Geochemistry*, 15, pp.501-12.

Kukkonen, I. & Lindberg, A., 1998. *Thermal properties of rocks at the investigation sites: measured and calculated thermal conductivity, specific heat capacity and thermal diffusivity*. Helsinki, Finland: Posiva Posiva.

Lenhard, R.J. & Parker, J.C., 1987. Measurement and prediction of saturation-pressure relationships in three-phase porous media systems. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1, pp.407-24.

Lindsey, D.A., Taggart, J.E. & Meeker, G.P., 1998. *Gravel Deposits of the South Platte River valley north of Denver, Colorado Part C: Description, composition and origins of clay lenses*. USGS.

Lin, C., Pinder, G. & Wood, E., 1982. *Water resources program report 83-WR-2*. Princeton, NJ: Princeton University.

McCray, J.E. & Falta, R.W., 1996. Defining the air sparging radius of influence for groundwater remediation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 24, pp.25-52.

McGuire, M., McDade, M. & Newell, C., 2006. Performance of DNAPL Source Depletion Technologies at 59 Chlorinated Solvent-Impacted Sites. *GroundWater Monitoring & Remediation*, 26, pp.73-84.

- Mercer, J.W. & Cohen, R.M., 1990. A review of immiscible fluids in the subsurface: Properties, models, characterization and remediation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 6, pp.107-63.
- Nield, D.A. & Bejan, A., 2013. *Convection in Porous Media*. 4th ed. New York: Springer Science.
- Oren, P.E. & Pinczewski, W.V., 1995. Fluid Distribution and Pore-Scale Displacement Mechanisms in Drainage Dominated Three-Phase Flow. *Transport in Porous Media*, 20, pp.105-33.
- Pantazidou, M., 1991. *Migration of Nonaqueous Liquids in Partly Saturated Granular Media*. PhD Dissertation, University of California, Berkeley.
- Parker, B.L., Chapman, S.W. & Guilbeault, M.A., 2008. Plume persistence caused by back diffusion from thin clay layers in a sand aquifer following TCE source-zone hydraulic isolation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 102, pp.86-104.
- Parker, J.C. & Lenhard, R.J., 1990. Determining Three-Phase Permeability-Saturation Relations from Two-Phase System Measurements. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 4, pp.57-65.
- Parker, J.C., Lenhard, R.J. & Kuppsamy, T., 1987. A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media. *Water Resources Research*, 23, pp.618-24.
- Pinder, G.F. & Gray, W.G., 2008. *Essentials of Multiphase Flow and Transport in Porous Media*. Hoboken, NJ: Wiley.
- Russell, H. & Matthews, J., 1992. TCE Removal from Contaminated Soil and Ground Water. *EPA, Ground Water Issue*.
- Salarashayeri, A.F. & Siosemarde, M., 2012. Prediction of Soil Hydraulic Conductivity from Particle-Size Distribution. *World Academy of Science, Engineering and Technology*, 61, pp.454-58.
- Sale, T. et al., 2008. *Frequently Asked Questions Regarding Management of Chlorinated Solvents in Soil and Groundwater*. ESTCP.

- Schmidt, E., 1982. *Πίνακες Ιδιοτήτων νερού-υδρατμού*. Αθήνα: Εκδόσεις Φούντας.
- Schwille, F., 1988. *Dense Chlorinated Solvents in Porous and Fractured Media*. Lewis Publishers.
- SERDP & ESTCP, 2001. *Expert Panel Workshop on Research and Development Needs for Cleanup of Chlorinated Solvent Sites*. Leesburg, Virginia: SERDP; ESTCP.
- Stamper, E. & Koral, R., 1979. *Handbook of Air Conditioning, Heating, and Ventilating*. 3rd ed. Industrial Press.
- Stroo, H. et al., 2012. Chlorinated Ethene Source Remediation: Lessons Learned. *Environmental Science and Technology*, 46, pp.6438–47.
- T N & Associates, I., 2004. *Final Feasibility Study Report, Pemaco Superfund Site*. EPA.
- Udell, K.S. & Heron, G., 2001. Field Demonstration of Steam Enhanced Extraction at Alameda Point, California. In *2001 International Containment and Remediation Technology Conference and Exhibition*. Orlando, 2001.
- US Army Corps of Engineers, 2009. *Design: In situ Thermal Remediation*. Washington, DC: USACE.
- Wyllie, J. & Gardner, G., 1958. The Generalized Kozeny–Carman Equation: Part II. *World Oil*, 5, pp.210-28.
- Καββαδάς, Μ. & Πανταζίδου, Μ., 2007. *Στοιχεία Περιβαλλοντικής Γεωτεχνικής*. Αθήνα: Ε.Μ.Π.
- Κουμούτσος, Ν. & Λυγερού, Β., 1991. *Μεταφορά Θερμότητας*. Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ.
- Νάνου, Α. & Παπαθανασιάδης, Τ., 2010. *Υδραυλική Υπόγειων Νερών*. Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ.
- Νουτσόπουλος, Γ. & Χριστοδούλου, Γ., 1996. *Μαθήματα μηχανικής των ρευστών για πολιτικούς μηχανικούς*. Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ.
- Παπαϊωάννου, Α.Θ., 2007. *Θερμοδυναμική. Βασικές Αρχές και Νόμοι - Καθαρές Ουσίες*. Αθήνα: Εκδόσεις Κοράλι.



Σταματάκη, Σ., 2006. *Σημειώσεις Μαθήματος Μηχανικής Πετρελαίων*. Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ.

Στάμου, Α., 2009. *Εφαρμοσμένη Υδραυλική*. Αθήνα: Εκδόσεις Παπασωτηρίου.

Χαλικιά, Η., 2004. *Βασικές Αρχές Θερμοδυναμικής*. Αθήνα: Έκδόσεις ΕΜΠ.



## Παράρτημα Α: Παρατηρήσεις σχετικά με την ακρίβεια της λύσης Buckley-Leverett

Σε τυχούσα θέση  $x$  κατά μήκος της εδαφικής στήλης ισχύει ότι:

$$q_w = -\frac{k_{rw}k_s A}{\mu_w} \frac{\partial P_w}{\partial x} = -k_{rw} A \frac{k_s \rho_w g}{\mu_w} \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_w}{\partial x} = -k_{rw} K A \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_w}{\partial x} \quad (7.1)$$

Ακόμα, λαμβάνοντας υπόψη τις τριχοειδείς πιέσεις, έχουμε:  $P_{cww} = P_n - P_w$ , η σχέση (7.1) γράφεται:

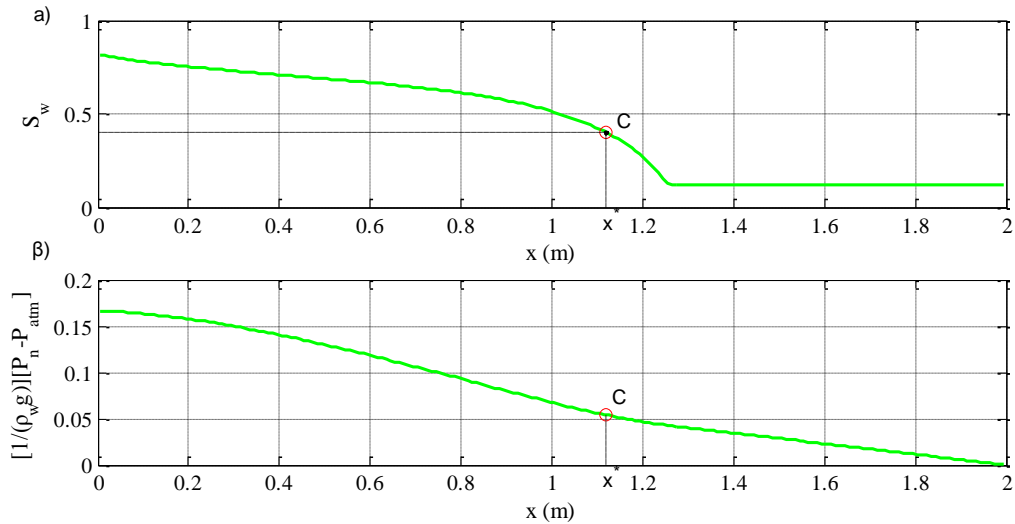
$$q_w = -k_{rw} K A \left[ \left[ \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} - \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x} \right] \right] \quad (7.2)$$

Ο όρος  $\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x}$  εκφράζει την υδραυλική κλίση της μη υδατικής φάσης σε όρους ύψους στήλης  $H_2O$ . Πιο συγκεκριμένα, εκφράζει τη μεταβολή της πίεσης της μη υδατικής φάσης σε όρους ύψους στήλης  $H_2O$  ανά μονάδα μήκους εδαφικής στήλης. Ο όρος  $\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x}$  εκφράζει τη μεταβολή της τριχοειδούς πίεσης σε όρους ύψους στήλης  $H_2O$  ανά μονάδα μήκους εδαφικής στήλης

Εν συνεχεία, θεωρούμε ένα σημείο C της καμπύλης  $S_w = S_w(x,t)$  το οποίο τη χρονική στιγμή  $t^*$  βρίσκεται στη θέση  $x = x^*$  και ο έχει βαθμό κορεσμού ίσο με  $S^* = S_w(x^*, t^*)$ . Για το σημείο C, η σχέση (7.2) γράφεται:

$$q_{w(x=x^*)} = -k_{rw}^{S_w=S^*} K A \left[ \left. \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \right|_{x=x^*} - \left. \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x} \right|_{x=x^*} \right] \quad (7.3)$$

Η κατανομή του βαθμού κορεσμού καθώς και η πίεση της μη υδατικής φάσης τη χρονική στιγμή  $t^*$  απεικονίζονται στο Σχήμα A-1. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζεται και το σημείο C. Θεωρούμε ότι το σημείο C έχει βαθμό κορεσμού 0.2-0.5.



Σχήμα A-1 α) Κατανομή βαθμού κορεσμού υδατικής φάσης και β) Πίεση μη υδατικής φάσης σε όρους ύψους στήλης H<sub>2</sub>O για το καλώς διαβαθμισμένο έδαφος. Παροχή εισπίεσης 50L/day, t=5.5h.

Στο σχήμα Σχήμα A-1 παρατηρούμε ότι για x=2m η σχετική πίεση της μη υδατικής φάσης είναι ίση με 0 ή ισοδύναμα ίση με 1atm (απόλυτη πίεση), ίση δηλαδή με τη συνοριακή συνθήκη. Ακόμα παρατηρούμε ότι η υδραυλική κλίση της μη υδατικής φάσης στο σημείο C είναι περίπου ίση με την υδραυλική κλίση της μη υδατικής φάσης στην έξοδο της στήλης. Συνεπώς, μπορούμε να γράψουμε:

$$\left. \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \right|_{x=x^*} = \left. \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \right|_{x=L} \quad (7.4)$$

Η υδραυλική κλίση της μη υδατικής φάσης στην έξοδο της στήλης, μπορεί να υπολογισθεί από την εξίσωση Darcy. Για τη μη υδατική φάση στην έξοδο της στήλης έχουμε:

$$q_{n(x=L)} = q_{inj}^w = -\frac{k_s k_m^{x=L} A}{\mu_n} \frac{\partial P_n}{\partial x} \Big|_{x=L} = -k_m^{x=L} A \frac{k_s \rho_w g}{\mu_n} \frac{\mu_w}{\rho_w g} \frac{1}{\mu_w} \frac{\partial P_n}{\partial x} \Big|_{x=L} = -K k_m^{x=L} A \frac{\mu_w}{\mu_n} \left[ \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \Big|_{x=L} \right] \quad (7.5)$$

Από την σχέση (7.5), και λύνοντας ως προς  $\left. \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \right|_{x=L}$ , έχουμε

$$\left[ \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_n}{\partial x} \Big|_{x=L} \right] = -\frac{q_{inj}^w}{A K k_m^{x=L}} \frac{\mu_n}{\mu_w} \quad (7.6)$$

Από τις σχέσεις (7.4) και (7.6), σχέση (7.3) γράφεται

$$q_{w(x=x^*)} = -k_{rw}^{S_w=S^*} KA \left[ -\frac{q_{inj}^w}{AKk_m^{x=L}} \frac{\mu_n}{\mu_w} - \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \right] = \frac{k_{rw}^{S_w=S^*}}{k_m^{x=L}} \frac{\mu_n}{\mu_w} q_{inj}^w + k_{rw}^{S_w=S^*} KA \frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \quad (7.7)$$

Ακόμα, γνωρίζουμε ότι η τριχοειδής πίεση σε σύστημα νερού-μη υδατικής φάσης είναι συνάρτηση μόνο του βαθμού κορεσμού της υδατικής φάσης. Θεωρώντας ότι η καμπύλη τριχοειδούς πίεσης είναι παραγωγίσιμη ως προς  $S_w$  και ότι η συνάρτηση  $S_w=S_w(x,t)$  παραγωγίσιμη ως προς  $x$ , εφαρμόζουμε τον κανόνα της αλυσίδας:

$$\frac{1}{\rho_w g} \frac{\partial P_c}{\partial x} \Big|_{x=x^*} = \frac{1}{\rho_w g} \frac{dP_c}{dS_w} \Big|_{S_w=S^*} \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \quad (7.8)$$

Εισάγωντας την σχέση (7.8) στην (7.7) και διαιρώντας με τη παροχή εισπίεσης προκύπτει:

$$f_w(S_w = S^*) = \frac{q_{w(x=x^*)}}{q_{inj}^w} = \frac{k_{rw}^{S_w=S^*}}{k_m^{x=L}} \frac{\mu_n}{\mu_w} + \frac{k_{rw}^{S_w=S^*}}{\rho_w g} \left[ \frac{KA}{q_{inj}^w} \frac{dP_c}{dS_w} \Big|_{S_w=S^*} \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \right] \quad (7.9)$$

Οι όροι  $\frac{\partial P_c}{\partial S_w} \Big|_{S_w=S^*} = \frac{dP_c}{dS_w} \Big|_{S_w=S^*}$  και  $\frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{x=x^*}$  είναι αρνητικοί καθώς τόσο οι τριχοειδείς πιέσεις

όσο και ο παραμένων βαθμός κορεσμού μειώνεται αυξανόμενου του  $S_w$  του  $x$  αντίστοιχα. Οι όροι αυτοί, καθώς είναι και οι δύο αρνητικοί, μπορούν να αντικατασταθούν με τις απόλυτες τιμές τους στη σχέση (7.9). Στην εξίσωση (7.9) το αριστερό μέλος εξαρτάται από τη τιμή του  $S^*$ , ενώ ο πρώτος όρος στο δεύτερο μέλος εξαρτάται από τη τιμή του  $S^*$ , τον λόγο της συνεκτικότητας των δύο υγρών και την σχετική διαπερατότητα. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι για τυχόν  $S^*$ , ισχύει:

$$\left[ \frac{KA}{q_{inj}^w} \right] \cdot \left| \frac{dP_c}{dS_w} \Big|_{S_w=S^*} \right| \cdot \left| \frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \right| = \text{σταθερο} \quad (7.10)$$

Σε δεδομένο έδαφος (γνωστή υδραυλική αγωγιμότητα  $K$  και παράγωγος  $\frac{dP_c}{dS_w}$  για το έδαφος αυτό), για τυχόν βαθμό κορεσμού  $S^*$ , αύξηση της παροχής  $q_{inj}^w$  θα έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση κατά απόλυτη τιμή του όρου  $\frac{\partial S_w}{\partial x} \Big|_{x=x^*}$  που ισοδυναμεί με αύξηση της κλίσης του μετώπου και αύξηση της ακρίβειας της μεθόδου Buckley-Leverett.

Επιπλέον, από τη σχέση (7.10), για δεδομένη υδραυλική αγωγιμότητα και παροχή εισπίεσης, αύξηση του ρυθμού μεταβολής της τριχοειδούς πίεσης σε ολόκληρο το εύρος των βαθμών κορεσμού (καλύτερα διαβαθμισμένο έδαφος) θα έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της κλίσης του μετώπου και συνεπώς την αύξηση της απόκλισης της αναλυτικής λύσης Buckley-Leverett.

Τέλος, προκειμένου να ερμηνευτεί η ταύτιση της κατανομής του βαθμού κορεσμού για τη περίπτωση της χονδρόκοκκης (I) και μέσης άμμου(III), εφαρμόσαμε την σχέση (7.10) για τα εδάφη αυτά επιλέγοντας  $S^*=0,40$ . Τα δύο αυτά εδάφη έχουν την ίδια καμπύλη σχετικής διαπερατότητας και συνεπώς:

$$\left[ \frac{K^I A}{q_{inj}^w} \right] \cdot \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40} \cdot \left. \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^I} = \left[ \frac{K^{III} A}{q_{inj}^w} \right] \cdot \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40} \cdot \left. \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^{III}} \quad (7.11)$$

οπότε:

$$\frac{\left. \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^I}}{\left. \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^{III}}} = \frac{\left[ \frac{K^{III} A}{q_{inj}^w} \right] \cdot \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}}{\left[ \frac{K^I A}{q_{inj}^w} \right] \cdot \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}} = \frac{K^{III} \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}}{K^I \left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}} \quad (7.12)$$

Για τα εδάφη I και III ισχύει ότι  $K^{III}/K^I=1/5$ . Οι υπόλοιποι όροι του Β' μέλους της εξίσωσης (7.12) υπολογίστηκαν ίσοι με:

- $\left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}^{III} = 3716 \text{ Pa}$
- $\left. \frac{dP_c}{dS_w} \right|_{S_w=0.40}^I = 745 \text{ Pa}$

Τα παραπάνω υπολογίστηκαν παραγωγίζοντας ως προς  $S_w$  τη σχέση τριχοειδούς πίεσης Van Genuchten και χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες παραμέτρους των εδαφών από τον Πίνακα 3-2.

Συνεπώς, για  $S^*=0.40$ , έχουμε:

$$\frac{\left| \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^I}}{\left| \frac{\partial S_w}{\partial x} \right|_{x=X^{III}}} = \frac{1}{5} \cdot \frac{3716}{745} = 0.9975 = 1 = 0.9975$$

Δηλαδή οι κλίσεις των καμπύλων βαθμού κορεσμού – απόστασης  $x$  για τα εδάφη I και III, για βαθμό κορεσμού ίσο με 0,40 θα είναι ίσες, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3-6 και Σχήμα 3-7.

## Παράρτημα Β1 : Πηγαίοι κώδικες σε FORTRAN

### PROGRAM CONVERT

Το πρόγραμμα αυτό αναπτύχθηκε προκειμένου να ανακτηθούν τα απαραίτητα δεδομένα από το αρχείο εξόδου του λογισμικού T2VOC. Με τη χρήση του εν λόγω προγράμματος αποφεύγεται η «χειροκίνητη» επιλογή των αποτελεσμάτων, μειώνοντας έτσι δραστικά τον απαιτούμενο χρόνο για την επεξεργασία των δεδομένων. Το πρόγραμμα CONVERT δέχεται ως δεδομένα εισόδου:

- Το αρχείο εισόδου στο λογισμικό T2VOC, το όνομα του οποίου μπορεί να είναι οποιοσδήποτε αριθμός από το 1 μέχρι το 9999 (έστω **X**)
- Το αρχείο με τα αποτελέσματα του λογισμικού T2VOC, το οποίο φέρει το όνομα του προαναφερθέντος αρχείου ακολουθούμενο από την κατάληξη “.out” (**X.out**)

Το πρόγραμμα δημιουργεί τρία νέα αρχεία, το περιεχόμενο των οποίων παρουσιάζεται στον πίνακα που ακολουθεί.

**Πίνακας Β-1 Αρχεία Εξόδου από το Πρόγραμμα CONVERT και περιεχόμενο αυτών**

Όνομα Αρχείου	Περιεχόμενο
<b>X_T1</b>	Πίεση αέριας φάσης, Θερμοκρασία, Βαθμός Κορεσμού των φάσεων, και Τριχοειδείς Πιέσεις για το σύνολο των πεπερασμένων όγκων, υπό μορφή πίνακα
<b>X_T2</b>	Συγκέντρωση του ρύπου στην υδατική και αέρια φάση, πυκνότητα και σχετική διαπερατότητα για κάθε μία από τις τρεις φάσεις για το σύνολο των πεπερασμένων όγκων υπό μορφή πίνακα
<b>X TIMES</b>	Περιλαμβάνει υπό μορφή πίνακα στήλης το σύνολο των χρονικών στιγμών για τα οποία είναι διαθέσιμα τα δεδομένα των παραπάνω αρχείων.

Το πρόγραμμα CONVERT καλείται από το πρόγραμμα iTOUGH-MATLAB LINK, ο πηγαίος κώδικας του οποίου παρουσιάζεται στο Παράρτημα Β2. Με τον συνδυασμό των δύο αυτών προγραμμάτων επιτυγχάνεται η αποθήκευση των αποτελεσμάτων σε βάση δεδομένων και καθίσταται πλέον εύκολη η επεξεργασία των δεδομένων αλλά και η παραγωγή διαγραμμάτων, απεικονίσεων κτλ.



```

1  PROGRAM CONVERT
2  IMPLICIT NONE
3  CHARACTER      CHAR1*1, CHAR4*4, OUTP*17, AA64*64, AA80*80, SFILENM*4, AB80*80,
4  CHARACTER      AA40*40, SNEWEXP*3 ,AA75*75, ROCK*5, COPR1*30, COPR2*20, PARA*5,
5  CHARACTER      GENE*5,A10*10, C1*4, AB12*12, AB64*64, AB40*40
6  CHARACTER      AA5*5, AA3*3, AA2*2, AA25*25, AB5*5, AA30*30,AA20*20,ACA1*1,ACA2*1
7  INTEGER*4      ICOUNTER_1, ICOUNTER_2, D_RECORDS, FLAG, INDEX, INT9, FILENM, IRP
8  INTEGER*4      ERROR, I, J, MAXI, TIMES1, AAST, ANSWER, CHECK, INTV, NEWTIMESTEP,
9  INTEGER*4      C3, C4, C5, ANSWER2, N1,N2,N3,N4, N2C, ANSWER3, NEWEXP, CHANGET
10 INTEGER*4      TSI
11 DOUBLE PRECISION TO_1, SO, SW, SG, PVOC, PAIR, PSATO, PSATW, PCO, PCW, TIMEST,
12 DOUBLE PRECISION CVOCAQ, CVOAQ, DGAS, DNAPL, VISGAS, VISNAPL,DIFFO, DIFFW, KRGAS,
13 DOUBLE PRECISION KRAQ, KRNAPL, CHR1, CHR2, TIMELAST, FTIMES, NEWPER, INJ,
14 DOUBLE PRECISION RP1, RP2, RP3, RP4, RP5, RP6, RP7
15 DOUBLE PRECISION TSTART, TIMAX, DELTEN, DELTMX, DLT, OLDT, NEWT, NEWTIMAX, OLDPER,
16 DOUBLE PRECISION NEWINJ, PORO, CWET, SPHT,ENTHL, NEWTIMEMAX, TM, TM1,TM2, NTIMEMAX,
17 !*****
18 !* INITIALIZATION AREA
19 !*****
20 ICOUNTER_1 = 0
21 ICOUNTER_2 = 0
22 !*****
23 !* OPEN FILES
24 !*****
25 WRITE ( 6, 2000)
26 READ  ( 5, 3001) FILENM
27 !! TRANSFORM INTEGER TO CHARACTER!!
28 WRITE(SFILENM,'(i4)') FILENM
29 SFILENM=TRIM(SFILENM)
30 OPEN  (10, FILE=SFILENM//'.OUT', STATUS='OLD')
31
32 ! OPEN OUTPUT DATA FILE_1
33 OPEN  (20, FILE=SFILENM//'_T1', STATUS='NEW')
34
35 ! OPEN OUTPUT DATA FILE_2
36 OPEN  (30, FILE=SFILENM//'_T2', STATUS='NEW')
37
38 ! OPEN OUTPUT DATA FILE_3
39 OPEN  (40, FILE=SFILENM//' TIMES', STATUS='NEW')
40
41 ! OPEN OUTPUT DATA FILE_4
42 OPEN  (50, FILE=SFILENM//' FINAL', STATUS='NEW')
43
44 OPEN  (60, FILE=SFILENM//'RPCAP',STATUS='NEW')
45 OPEN  (70, FILE=SFILENM, STATUS='OLD')
46 OPEN  (80, FILE=SFILENM//' FLOWS',STATUS='NEW')
47
48 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
49     READ(10,2068) AB80
50 END DO
51
52 REWIND(10)
53
54 !*****
55 * MAIN PROGRAM
56 !*****
57
58 ! START READING THE INPUT DATA FILE FROM THE BEGINING TO LAST RECORD
59 ! WRITE THE RECORDS TO OUTPUT DATA FILE_1
60 ! STOP READING WHEN REACH TO THE LAST RECORD OF THE INPUT DATA FILE
61 !*****
62 ! WRITE DATA TO THE OUTPUT DATA FILE_1

```

```

63 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
64     READ(10, 2030, IOSTAT=ERROR) CHAR1, CHAR4, INDEX, INT9, TO_1, SO, SW, SG, PVOC,
65     PAIR, PSATO,PSATW, PCO, PCW
66     IF ((ERROR.EQ.0) .AND. (INDEX.GT.0) .AND. (INT9.GT.10000)) THEN
67         WRITE(20, 2031) INDEX, INT9, TO_1, SO, SW, SG, PVOC, PAIR, PSATO,
68         PCO, PCW
69         2031 FORMAT ( 2X, I5,2X, F10.0, F9.3, 3(E12.4), 6(F10.0) )
70         ICOUNTER_1 = ICOUNTER_1 + 1
71     ELSE
72         CONTINUE
73     ENDIF
74 END DO
75 WRITE (6,8010) ICOUNTER_1
76
77 !*****
78 ! REWIND THE INPUT DATA FILE - START RE-READING THE RECODRS FROM THE INPUT DATA FILE
79 *
80 ! SKIP ALL WRITTEN RECORD TO THE OUTPUT DATA FILE_1
81 ! STOP READING WHEN LAST LINE REACHED *
82 !*****
83 REWIND (10)
84 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
85     READ(10, 2030, IOSTAT=ERROR) CHAR1, CHAR4, INDEX, INT9, TO_1, SO, SW, SG, PVOC,
86     PAIR, PSATO,PSATW, PCO, PCW
87     IF ((ERROR.EQ.0) .AND. (INDEX.GT.0) .AND. (INT9.GT.10000)) THEN
88         ICOUNTER_2 = ICOUNTER_2 + 1
89         IF ( ICOUNTER_1 .EQ. ICOUNTER_2) THEN
90             EXIT
91         ENDIF
92     ELSE
93         WRITE (6, 9020)
94         WRITE (6, 9025) ERROR
95         EXIT
96     ENDIF
97 END DO
98 WRITE (6,8020) ICOUNTER_1
99 !*****
100 ! START READING FROM THE PREVIOUS RECORD POSITION - CHANGE THE READING FORMAT
101 ! START WRITING THE RECORDS TO THE OUTPUT DATA FILE_2
102 !*****
103 ICOUNTER_2 = 0
104 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
105     READ(10, 2040, IOSTAT=ERROR) CHAR1, CHAR4, INDEX, CVOCAQ, CVOAQ, DGAS, DNAPL,
106     VISGAS, VISNAPL, DIFFO, DIFFW, KRGAS, KRAQ, KRNAPL
107     IF ((ERROR.EQ.0) .AND. (INDEX.GT.0) .AND. (CVOCAQ.LE.50000) .AND.
108     (KRGAS.LE.1) .AND. (KRAQ.LE.1.5) .AND. (KRNAPL.LE.2)) THEN
109         WRITE(30, 2054) INDEX, CVOCAQ, CVOAQ, DGAS, DNAPL, VISGAS,
110     VISNAPL, DIFFO, DIFFW, KRGAS, KRAQ, KRNAPL
111         2054 FORMAT (2X, I5,2X, 11(1X, E11.4))
112         ICOUNTER_2 = ICOUNTER_2 + 1
113     ELSE
114         CONTINUE
115     ENDIF
116 END DO
117
118
119
120 WRITE (6,8030) ICOUNTER_2
121 !*****
122 ! ICOUNTER_2 IS THE NUMBER OF PRINTED TIMESTEPS AT THE CURRENT EXPERIMENT
123 ! WE CALCULATE THIS NUMBER
124 !*****

```

```

125 ICOUNTER_2=0
126 REWIND (10)
127 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
128     READ(10, 2050, IOSTAT=ERROR) OUTP, TIMEST
129     IF (ERROR.EQ.0 .AND. OUTP.EQ.'OUTPUT DATA AFTER') THEN
130         WRITE(6,*) OUTP, TIMEST
131         WRITE(40, 2060) TIMEST
132         ICOUNTER_2=ICOUNTER_2+1
133     ENDIF
134 END DO
135 J=1
136 I=1
137 !*****
138 !             ICOUNTER_1 IS THE TOTAL NUMBER OF RECORDS PER TABLE
139 !             THUS, ICOUNTER_1/ICOUNTER_2 GIVES US THE NUMBER OF ELEMENTS
140 !*****
141 MAXI=ICOUNTER_1/ICOUNTER_2
142 REWIND (10)
143 REWIND (20)
144 REWIND (30)
145 REWIND (40)
146 !*****
147 ! NOW WE ADHERE THE TIME VARIABLE AT THE END OF FILE X_T1 THUS CREATING THE THE
148 !XFINAL FILE *
149 !*****
150 DO WHILE (J.LE.ICOUNTER_2)
151     READ(40,2060) TIMEST
152     I=1
153     DO WHILE (I.LE.MAXI)
154         READ(20,2030)          CHAR1, CHAR4, INDEX, INT9, TO_1, SO, SW, SG, PVOC,
155 PAIR, PSATO, PSATW, PCO, PCW
156         WRITE(50,2070) CHAR1, INDEX, INDEX, INT9, TO_1, SO, SW, SG, PVOC, PAIR,
157 PSATO, PSATW, PCO, PCW, TIMEST
158         I=I+1
159     END DO
160     J=J+1
161 END DO
162 !*****
163 ! WE CALCULATE THE TIME OF LAST PRINT OUT, WHICH EQUALS TO THE LAST RECORD OF
164 !VARIABLE TIMEST (TIME IN SECONDS)
165 !*****
166 TIMELAST=TIMEST*86400
167 REWIND(10)
168 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
169     READ(70,2062) AA5, AA75
170     IF (AA5.EQ.'RPCAP') THEN
171         READ(70,9999) IRP, RP1, RP2, RP3, RP4, RP5, RP6, RP7
172         WRITE(60,2001) IRP, RP1, RP2, RP3, RP4, RP5, RP6, RP7
173         READ(70,9999) IRP, RP1, RP2, RP3, RP4, RP5, RP6, RP7
174         WRITE(60,2001) IRP, RP1, RP2, RP3, RP4, RP5, RP6, RP7
175         9999 FORMAT (I5,5X,7(E10.4))
176         2001 FORMAT (I5,5X, E10.4, 2X,E10.4, 2X,E10.4, 2X,E10.4, 2X,E10.4,
177 2X,E10.4, 2X,E10.4)
178         !1111 FORMAT (I5, 5X, 7((E10.4))
179         EXIT
180     ENDIF
181 END DO
182 REWIND(50)
183 REWIND(60)
184 REWIND (50)
185 REWIND (60)
186 REWIND(10)

```

```

187 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
188     READ(10,2076)  ACA1,ACA2,CHR1,CHR2
189     IF          ((ACA1.EQ.'A' .OR. ACA1.EQ.'B') .AND. (ACA2.EQ.'A' .OR. ACA2.EQ.'B'))
190 THEN
191     WRITE(80,2077) CHR1,CHR2
192     ENDIF
193 END DO
194 !***** FORMAT AREA *****
195 2076 FORMAT (3X,A1,6X,A1,33X,E12.4,E12.4)
196 2077 FORMAT (1X,E12.4,4X,E12.4)
197 2000 FORMAT (//, ' TYPE THE NAME OF THE FILE WHICH CONTAINS THE INPUT DATA: ',\ )
198 2030 FORMAT (1X, A1, A4, I5, F10.0, F9.3, 3(E12.4), 6(F10.0) )
199 2070 FORMAT (1X, A1, I5, 1X, I5, F10.0, F9.3, 3(E12.4), 6(F10.0), 2X, E11.5 )
200 3001 FORMAT (I4)
201 2068 FORMAT (A80)
202 2040 FORMAT (1X, A1, A4, I5, 11(E11.4))
203 2047 FORMAT (A30, E10.4,20X, A20)
204 2048 FORMAT (A30, 3(E10.4),A20)
205 2050 FORMAT (10X, A17, 89X, E11.5)
206 2052 FORMAT (A20, F10.4, E10.4,20X, 2(F10.4))
207 2053 FORMAT (A5,A3,A2,A25,A5,E10.4,A30)
208 2055 FORMAT (A4,3(I4),A64)
209 2056 FORMAT (E10.4, 2X, E10.4, 2X, E10.4, 2X, F10.4)
210 2057 FORMAT (A12,I4,A64)
211 2060 FORMAT (E11.5)
212 2061 FORMAT (E10.4)
213 2062 FORMAT (A5,A75)
214 2064 FORMAT (F10.1)
215 2065 FORMAT (I2)
216 2066 FORMAT (F10.1)
217 2067 FORMAT (I4)
218 2068 FORMAT (A80)
219 8010 FORMAT (5(/), ' ***** RESULTS ***** ',
220 2(/), ' NO OF RECORDS WRITTEN IN OUTPUT_1 FILE =',I5 )
221 8020 FORMAT (' NO OF RECORDS SKIPPED =',I5 )
222 8030 FORMAT (' NO OF RECORDS WRITTEN IN OUTPUT_2 FILE =',I5,/ )
223 8040 FORMAT (' ***** DATA HAS BEEN WRITTEN TO FILES ***** ',
224 2(/), ' ***** SUCCESSFUL END OF PROCESS ***** ')
225 9010 FORMAT (' ! LOGIC ERROR - POSITION 1 !')
226 9015 FORMAT (' ! ERROR ISOSTAT - POSITION 1 !', I5)
227 9020 FORMAT (' ! LOGIC ERROR - POSITION 2 !')
228 9025 FORMAT (' ! ERROR ISOSTAT - POSITION 2 !', I5)
229 9030 FORMAT (' ! LOGIC ERROR - POSITION 3 !')
230 9035 FORMAT (' ! ERROR ISOSTAT - POSITION 3 !', I5)
231 CLOSE(10)
232 CLOSE(20)
233 CLOSE(30)
234 CLOSE(40)
235 CLOSE(50, STATUS='DELETE')
236 CLOSE(60)
237 CLOSE(80)
238 STOP
239 END
1

```

## *PROGRAM STRATIGRAPHY*

Το πρόγραμμα αυτό δημιουργεί τη στρωματογραφία των εδαφών σε δεδομένο διδιάστατο πεδίο. Το πρόγραμμα δέχεται ως αρχείο εισόδου το αρχείο MESH, το οποίο περιγράφει τη διακριτοποίηση του διδιάστατου πεδίου. Ο χρήστης εισάγει τον αριθμό των επιθυμητών εδαφικών στρώσεων (πχ για την περίπτωση άμμου – αργίλου – άμμου, οι στρώσεις είναι τρεις), τον συνολικό αριθμό των οριζόντιων πεπερασμένων όγκων, τον συνολικό αριθμό των πεπερασμένων όγκων κατά τη κατακόρυφο καθώς επίσης και τον αριθμό των πεπερασμένων όγκων κατά τη κατακόρυφο ανά εδαφική στρώση.

Το πρόγραμμα δημιουργεί το αρχείο LAYERED\_ELEMENTS στο οποίο έχει εισαχθεί πλέον η στρωματοποίηση του υδροφορέα.

```

1 PROGRAM STRATIGRAPHY
2
3 !*****DECLATATION AREA*****
4 IMPLICIT NONE
5 CHARACTER SFILENM*4, AA19*19,AA60*60
6 INTEGER*4 I,J,NYLAYER(9),K,NX,NY,LAYERS, FILENM
7 !*****
8 !* OPEN FILES
9 *****
10 WRITE ( 6, 1990)
11 1990 FORMAT('Give file name:  ')
12 READ ( 5, 1991) FILENM
13 1991 FORMAT (I5)
14 !! TRANSFORM INTEGER TO CHARACTER!!
15 WRITE(SFILENM,'(i4)') FILENM
16 SFILENM=TRIM(SFILENM)
17 OPEN (10, FILE=SFILENM, STATUS='OLD')
18 OPEN (20, FILE='LAYERED_ELEMENTS', STATUS='NEW')
19
20 WRITE(6,2000)
21 2000 FORMAT (//,'Give number of layers:  ')
22 READ(5,2001) LAYERS
23 2001 FORMAT (I1)
24
25 WRITE(6,2002)
26 2002 FORMAT (//,'Give number of horizontal elements:  ')
27 READ(5,2003) NX
28 2003 FORMAT (I3)
29
30 WRITE(6,2004)
31 2004 FORMAT (//,'Give number of vertical elements :  ')
32 READ(5,2005) NY
33 2005 FORMAT (I3)
34
35 K=1
36 DO K=1, LAYERS
37 WRITE(6,2006) K
38 2006 FORMAT (//,'Give number of vertical elements, layer:  ',I2)
39 READ(5,2007) NYLAYER(K)
40 2007 FORMAT (I3)
41 END DO
42 J=1
43 I=1
44 DO J=1,NX
45 DO K=1, LAYERS
46 DO I=1,NYLAYER(K)
47 READ(10,2008) AA19,AA60
48 2008 FORMAT(A19,1X,A60)
49 WRITE(20,2009) AA19,K,AA60
50 2009 FORMAT(A19,I1,A60)
51 END DO
52 END DO
53 END DO
54
55 CLOSE(10)
56 CLOSE(20)
57 STOP
58 END

```

## PROGRAM UB\_FORMULATION

```
1
1 *****
2 !Υπολογισμός ανάντη συντοριακών συνθηκών για την περίπτωση εισπίεσης νερού σε
3 !διδιάστατο πεδίο
4 *****
5 !*****Declaration Area*****
6 IMPLICIT NONE
7 CHARACTER          SFILENM*4, AA5*5, NAME*3, DELV*4,
8 CHARACTER          AA40*40, HEIGHT*10
9 INTEGER*4          ICOUNTER_1, ICOUNTER_2, NAMENUMBER, FILENM
10 DOUBLE PRECISION  PRESSURE, INCR, ESW, TOCHANGE, TEMP, TOCHANGE2
11 *****
12 !* INITIALIZATION AREA
13 *****
14 ICOUNTER_1 = 0
15 ICOUNTER_2 = 0
16 *****
17 !* OPEN FILES
18 *****
19 WRITE ( 6, 1990)
20 1990 FORMAT ('Give the name of the SAVE file (has to be a number):   ')
21 READ ( 5, 1991) FILENM
22 1991 FORMAT (I5)
23 WRITE (6, 7777)
24 7777 FORMAT ('Give increase of pressure in Pa:   ');
25 READ (5, 7778) INCR
26 7778 FORMAT (F10.3)
27 WRITE (6, 7710)
28 7710 FORMAT ('Give variable X3:   ');
29 READ (5, 7711) TOCHANGE
30 7711 FORMAT (D19.13)
31 !! TRANSFORM INTEGER TO CHARACTER!!
32 WRITE(SFILENM, '(i4)') FILENM
33 SFILENM=TRIM(SFILENM)
34 OPEN (10, FILE=SFILENM, STATUS='OLD')
35 OPEN (20, FILE='INITIAL_COND_NEW', STATUS='NEW')
36 ICOUNTER_1=0
37 DO WHILE (.NOT.EOF(10))
38     READ(10, 2030) AA5
39     2030 FORMAT (A5)
40     READ(10, 2035) PRESSURE, ESW, TOCHANGE2, TEMP
41     2035 FORMAT (1X, D19.13, 1X, D19.13, 1X, D19.13, 1X, D19.13)
42     ICOUNTER_1=ICOUNTER_1+1
43 END DO
44 REWIND(10)
45 ICOUNTER_2=1
46 DO WHILE (ICOUNTER_2.LT.ICOUNTER_1)
47     READ(10, 2030) AA5
48     READ(10, 2035) PRESSURE, ESW, TOCHANGE2, TEMP
49     PRESSURE=PRESSURE+INCR
50     WRITE(20, 2032) AA5
51     2032 FORMAT (A5)
52     WRITE(20, 2035) PRESSURE, ESW, TOCHANGE, TEMP
53     ICOUNTER_2=ICOUNTER_2+1
54 END DO
55 CLOSE(10)
56 CLOSE(20)
57 STOP
58 END
```

## Παράρτημα B2 : Πηγαίοι κώδικες σε MATLAB

### *iTOUGH2-MATLAB LINK*

Περιγραφή: Στο παρόν πρόγραμμα πραγματοποιείται σύνδεση του iTOUGH2 με το MATLAB. Ο χρήστης αρχικά θα πρέπει να αντιγράψει τα εκτελέσιμα αρχεία του iTOUGH2 στον φάκελο του MATLAB. Το πρόγραμμα καλεί μέσω του MATLAB το iTOUGH2, επεξεργάζεται τα αποτελέσματα με χρήση του προγράμματος CONVERT που παρουσιάστηκε προηγουμένως και εν συνεχεία αποθηκεύει τα δεδομένα στη βάση δεδομένων Data.mat. Το πρόγραμμα απαλλάσσει τον χρήστη από τη χειροκίνητη επεξεργασία των αποτελεσμάτων του iTOUGH2 και διευκολύνει τα μέγιστα τη γραφική απεικόνιση.

```
1  exp1=input('Give simulation to start with:   ');
2  exp2=input('Give simulation to end with:     ');
3
4  for i=exp1:exp2
5      si=num2str(i);
6      eval=[si, ' TIMES']
7      exi=exist(eval)
8      if exi~=0
9          delete(eval)
10         eval=[si, '_T1']
11         delete(eval)
12         eval=[si, '_T2']
13         delete(eval)
14         eval=[si, ' FINAL']
15         delete(eval)
16         eval=[si, 'RPCAP']
17         delete(eval)
18     end
19     eval=[si, '_T3']
20     exi=exist(eval)
21     if exi~=0
22         delete(eval)
23     end
24 end
25
26 for i=exp1:exp2
27     expstr=num2str(i);
28     expstr=strjust(expstr, 'left');
29     expstr=strtrim(expstr);
30     eval1=[expstr, '_help1'];
31     eval2=[expstr, '_help2'];
32     fid = fopen(eval1, 'w');
33     fprintf(fid, '%s', 'dumi')
34     fprintf(fid, '\n')
35     fprintf(fid, '%s', expstr)
36     fclose(fid);
37     system(['itough2.exe<' eval1])
38     fid = fopen(eval2, 'w');
```



```

39     fprintf(fid, '%i', i')
40     fclose(fid);
41     %%% NOW WE RUN PROGRAM CONVERT. WE CALL THE EXE FILE %%%
42     system(['console7.exe<' eval2])
43 end
44
45 %%% Data.mat is the database %%%
46 load Data.mat
47
48 first=exp1
49 last=exp2
50
51 for i=first:last
52     si=num2str(i);
53     eval=[si, '_T1'];
54     importdata(eval);
55     C=ans;
56     Data{i,1}=C;
57
58
59     eval=[si, '_T2'];
60     importdata(eval);
61     D=ans;
62     Data{i,2}=D;
63
64     eval=[si, ' TIMES'];
65     importdata(eval);
66     E=ans;
67     Data{i,3}=E;
68
69     eval=[si, 'RPCAP'];
70     importdata(eval);
71     F=ans;
72     Data{i,4}=F;
73 end
74
75 clear si eval C D i ans first last E
76
77 %%% we now save the results in the database%%
78 savefile = 'Data.mat';
79 save(savefile, 'Data')
80
81 load Data.mat
82 load MP.mat
83 tp1=exp1
84 tp2=exp2
85 for exp=tp1:tp2
86 A=Data{exp,1};
87 B=Data{exp,2};
88 C=Data{exp,3};
89 timesteps=length(C);
90 nx=length(A)/timesteps;
91 SOA{exp,1}=A(:,4);
92 SWA{exp,1}=A(:,5);
93 SOLA{exp,1}=B(:,3);
94 SAA{exp,1}=A(:,6);
95 TTT{exp,1}=A(:,3);
96 savefile = 'MP.mat';
97 save(savefile, 'SOA', 'SWA', 'SOLA', 'SAA', 'TTT');
98 end

```

## VG\_Parameter\_estimation

```
1 myfun = @(x,xdata) 998/100*9.8060/x(3)*(((xdata-x(1))/(1-x(1))).^(-1/(1-
2 1/x(2)))-1).^(1/x(2));
3 % xdata is the Sw
4 % ydata is the capillary pressure
5 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
6 load xdata.mat
7 load ydata.mat
8 x0=(Sm,n, a)
9 x0 = [0.11; 3; 3];
10 lb=[0.119 1.5 1.5]
11 ub=[0.12 30 20]
12 options = optimset('DiffMinChange',0.001,'Tolfun',0.01);
13 [x] = lsqcurvefit(myfun,x0,xdata,ydata,lb,ub);
14
15 S=0.12:0.01:0.9;
16 f=998/100*9.8060/x(3)*(((S-x(1))/(1-x(1))).^(-1/(1-1/x(2)))-1).^(1/x(2));
17 plot(S,f)
1
```

## *water\_front*

```
1
2 clear
3 clc
4 load Data.mat
5 load MP.mat
6 exps=input('Give Simulation: ');
7 Swr=input('Give Swr: ');
8 inc=input('Give increment x: ');
9
10 A=Data{exps,1};
11 times=Data{exps,3};
12
13 nx=length(A)/length(times);
14 for step=1:length(times)
15     format longeng
16     SW=A(:,5)
17     SW=SW((step-1)*nx+1:step*nx,1);
18     found=0;
19     counter=1;
20     while found==0 && counter<=nx
21         if SW(counter)==Swr
22             found=1;
23         else
24             counter=counter+1;
25         end
26     end
27     % The frontdata table includes data regarding the position of the
28     %front for different timesteps
29
30     frontdata(step,1)=times(step);
31     if counter<=200
32         frontdata(step,2)=inc/2+(counter-1)*inc;
33     else
34         frontdata(step,2)=-99999;
35     end
36 end
37
38 for i=1:length(frontdata)
39     if frontdata(i,2)>=0
40         frontdata2(i,1)=frontdata(i,1)
41         frontdata2(i,2)=frontdata(i,2)
42     end
43 end
44
45 h=frontdata2(:,2)
46
47 scatter(frontdata2(:,1),frontdata2(:,2),'filled');
48 v=polyfit(frontdata2(:,1),frontdata2(:,2),1);
49 vf=v(1)
50
51 r2=corrcoef(frontdata2);
52 R2=r2(1,2)
```

### *steam\_front*

```
1 clear
2 clc
3 load Data.mat
4 load MP.mat
5
6 exps=input('Give Simulation: ');
7 inc=0.02;
8
9 A=Data{exps,1};
10 times=Data{exps,3};
11
12 nx=length(A)/length(times);
13 pp=1
14
15 for step=1:length(times)
16     format longeng
17     SO=A(:,4)
18     SO=SO((step-1)*nx+1:step*nx,1);
19     SW=A(:,5)
20     SW=SW((step-1)*nx+1:step*nx,1);
21     found=0;
22     counter=1;
23     if SO(1)==0
24         while found==0 && counter<=nx
25             if SO(counter)~0
26                 found=1;
27                 counter=counter-1
28             else
29                 counter=counter+1;
30             end
31         end
32     else
33         counter=500
34     end
35     sumsw(step)=0;
36
37     if counter<100000
38         for countersw=1:counter
39             sumsw(pp)=sumsw(pp)+SW(countersw)
40         end
41         aversw(pp)=sumsw(pp)/counter
42         pp=pp+1
43     end
44
45
46
47
48     % The frontdata table includes data regarding the position of the
49     front
50     % for different timesteps
51     frontdata(step,1)=times(step);
52     if counter<=nx
53         frontdata(step,2)=inc/2+(counter-1)*inc;
54     else
55         frontdata(step,2)=-99999;
56     end
57 end
58 for i=1:length(frontdata)
```

```
59     if frontdata(i,2)>=0
60         frontdata2(i,1)=frontdata(i,1)
61         frontdata2(i,2)=frontdata(i,2)
62     end
63 end
64 scatter(frontdata2(:,1),frontdata2(:,2),'filled');
65
66 r2=corrcoef(frontdata2);
67 R2=r2(1,2)
68
69 v=polyfit(frontdata2(:,1),frontdata2(:,2),1);
70 vf=v(1)
71
72 avsw=sum(aversw)/(pp-1)
```

## 2D Graphics

```
1  opengl software
2  load CMAPPLOTS.mat
3  load Data.mat
4
5  exp=input('Give 2D experiment: ');
6  step1=input('Give first timestep you want to print: ');
7  interv=input('Give interval between timesteps: ');
8  step2=input('Give last timestep you want to print: ');
9  printT=input('Do you want to print isothermal lines? 1-YES 0-NO ');
10 ina=input('Are there inactive elements in the first column 1-YES 0-NO ?')
11 if ina==1
12     ny1=input('Number of active elements in the first column:')
13 end
14 if printT==1
15     isoTe=input('Give isotemp numbers: ');
16 end
17 printSA=input('Do you want to pring iso-gas lines? 1-YES 0-NO ');
18 if printSA==1
19     isogas=input('Give isogas number: ');
20 end
21
22 xmaxaxis=input('Give length x-axis: ');
23 ymaxaxis=input('Give maximum depth (negative): ');
24 dx1=input('Give dx1 which is the dx of the first and last column: ');
25 dx=input('Give the dx of the intermediate columns: ');
26 ny=input('Give number of vertical elements: ');
27 MASSININITIAL=input('Give initial mass of DNAPL: ');
28 hydro=input('Give level of groundwater surface (negative): ')
29
30 axi=input('Give axi: ');
31 ayi=input('Give ayi: ');
32 nii=input('Give porosity: ');
33
34 nx=2+(xmaxaxis-2*dx1)/dx
35 dy=ymaxaxis/ny;
36
37 counter=1
38
39 for step=step1:interv:step2
40
41     [SWprint, SOprint, SAprint, Krwprint, Krnprint, Kraprint, PCOO, PCWW, TTT, CVOCGAS,
42     CVOCAQ, Pair]=RETURNsteam2D(exp, step, nx, ny)
43
44     SUMOFSO(step)=sum(SOprint)
45     MASSIN(step,2)=sum(SOprint)*0.5*0.5*1*nii*1460
46
47     if ina==1
48         SOprint=inactive(SOprint,ny1,ny)
49     end
50
51     [SSOO]=normman(SOprint,nx,ny)
52
53     x=[0 dx1 (dx1+dx2):dx:(xmaxaxis-dx1-dx2) (xmaxaxis-dx1) xmaxaxis]
54     y=[0:dy:ymaxaxis]
55
56     [x,y]=meshgrid(x,y)
57
58     SSOO(:,end+1)=0;
```

```

59  SSO0(end+1,:)=0;
60  SSO0(end,end)=0;
61
62  figure(1)
63  subplot(axi,ayi,counter)
64  pcolor(x,y,SSO0);
65  colormap(MAPSO)
66  caxis([0 0.3])
67  set(gca,'fontsize',9,'fontname','times new roman')
68  hold on
69
70  timestpp=Data{exp,3}
71  if timestpp(step)>=100
72      timestpp(step)=timestpp(step)/365;
73      unit_time=' years'
74  else
75      unit_time=' days'
76  end
77  MASSIN(step,1)=timestpp(step)
78  MASSIN(step,3)=(MASSINNINITIAL-MASSIN(step,2))/MASSININITIAL*100
79
80  tims=num2str(timestpp(step))
81  eval=['t=',tims,unit_time]
82  text(3.1,+1,eval,'fontsize',11,'fontname','times new roman')
83
84  shading interp
85
86  [SWprint,SOprint,SAprint,Krwprint,Krnprint,Kraprint,PCOO,PCWW,TTT,CVOCGAS,
87  CVOCAQ,Pair]=RETURNsteam2D(exp,step,nx,ny)
88
89  if printT==1
90      [TTT]=normman(TTT,nx,ny)
91      TTT(:,end+1)=0;
92      TTT(end+1,:)=0;
93      TTT(end,end)=0;
94      v=isoTe
95      [C,h]=contour(x,y,TTT,v,'linewidth',1,'linestyle','--')
96      set(h,'ShowText','on')
97      set(h,'Color','black')
98      clabel(C,h,'FontSize',6)
99  end
100
101  if printSA==1
102      [SAprint]=normman(SAprint,nx,ny)
103      SAprint(:,end+1)=0;
104      SAprint(end+1,:)=0;
105      SAprint(end,end)=0;
106      v=[isogas]
107      [C,h]=contour(x,y,SAprint,v,'linewidth',1,'linestyle','--')
108      set(h,'ShowText','on')
109      set(h,'Color','red')
110      clabel(C,h,'FontSize',6)
111  end
112
113
114
115  axis equal
116  ylim([ymaxaxis 0])
117  xlim([0 xmaxaxis])

```

```

118 hold on
119 subplot(axi,ayi,counter)
120 ylim([-10 0])
121 plot([0 xmaxaxis],[hydro1 hydro2], 'linewidth',2)
122 counter=counter+1
123 end
124
125 figure(1)
126 hold off
127 h=colorbar;
128 set(h, 'Position', [.94 .339 .0281 .358])
129
130 %%%%%%%%% FUNCTION NORMAN %%%%%%%%%
131
132 function [oned2d]=normman(inputtable,nx,ny)
133 j=1
134 for i=1:nx
135     for k=1:ny
136         oned2d(k,i)=inputtable(j);
137         j=j+1;
138     end
139 end
140
141
142 %%%%%%%%% FUNCTION RETURN_STEAM2D %%%%%%%%%
143
144
145 Function
146 [SWprint,SOprint,SAprint,Krwprint,Krnprint,Kraprint,PCOO,PCWW,TTT,CVOCGAS,
147 CVOCAQ,Pair]=RETURNsteam2D(exptest,timestep,nx,ny)
148
149 load Data.mat
150
151 A=Data{exptest,1};
152 B=Data{exptest,2};
153
154 nn=nx*ny;
155
156 TTT=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,3);
157 Pair=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,2);
158 SOprint=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,4);
159 SWprint=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,5);
160 SAprint=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,6);
161 PCOO=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,11);
162 PCWW=A((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,12);
163
164 Kraprint=B((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,10);
165 Krwprint=B((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,11);
166 Krnprint=B((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,12);
167
168 format shorteng
169 CVOCGAS=B((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,2);
170 CVOCAQ=B((timestep-1)*nn+1:timestep*nn,3);
171
172 end
173
174 %%%%%%%%% END %%%%%%%%%

```