

DNAPL SZENNYEZÉSEK TRANSZPORT- MODELLEZÉSI LEHETŐSÉGEI A GMS PROGRAMBAN

Zákányi Balázs

egyetemi tanársegéd

Miskolci Egyetem, Környezetgazdálkodási Intézet, Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai
Intézeti Tanszék, 3515, Miskolc-Egyetemváros, hgzb@uni-miskolc.hu

Összefoglalás

A klórozott szénhidrogének a víznél nagyobb sűrűségű vegyi anyagok közé tartoznak. A klórozott szénhidrogének sorsát a felszín alatti környezetben a földtani közeg sajátosságain kívül az adott vegyi anyag fizikai, kémiai jellemzői befolyásolják, ezek a teljesség igénye nélkül a sűrűség, kinematikai viszkozitás, felületi feszültség, kémiai összetétel, oldhatóság vízben és egyéb oldószerekben, gőznyomás, Henry-állandó, nedvesítő képesség, amelyeket a transzport modellezésnél mind-mind figyelembe lehet venni. Nehézséget az jelent, hogy nehéz a DNAPL-ről ilyen adatokat találni.

Kutatásaink során a Groundwater Modeling System-em (GMS) programcsomagot használtuk. A klórozott szénhidrogének modellezésére a következő két modult használtuk: UTCHEM: Az Utchem a GMS egyik modulja. A Texasi Egyetem (Austin), Olaj és Környezeti rendszerek mérnöki központja fejlesztette ki, eredetileg szénhidrogén szennyeződések modellezésére alkalmazható. SAEAM3D: Reaktív transzport szimulációs kód, mellyel komplex, több szubsztrátumot és elektron akceptort is figyelembe vevő biodegradációs feladatok modellezhetők

Kulcsszavak: *t* transzport modellezés, GMS, DNAPL

Abstract

The chlorinated hydrocarbons belong to denser water-chemicals. Except to the subsurface geological features the behaviour of chlorinated hydrocarbons may be considered their chemical, physical, chemical characteristics, influence, these are not limited to density, kinematic viscosity, surface tension, chemical composition, solubility in water and other solvents, vapor pressure, Henry constant and wetting in the transport modelling. The difficulty is that it is not so easy to find such information from DNAPL.

In our research we used the Groundwater Modelling System (GMS). For modelling we used the next two modules: UTCHEM: Utchem is a module of the GMS. The module was developed at the Center for Petroleum and Geosystems Engineering at the University of Texas at Austin as a chemical flood simulator for enhanced oil recovery design. In recent years, Utchem has been adapted for a variety of environmental applications as well. SAEAM3D: A reactive transport model used to simulate complex biodegradation problems involving multiple substrates and multiple electron acceptors.

Keywords: *transport modelling, GMS, DNAPL*

1. Bevezetés

Napjainkban a környezetvédelem egyik legfontosabb problémaköre a hátrahagyott talaj- és felszín alatti vizek szennyezettsége és elszennyeződésének veszélye. Az ezzel kapcsolatban felmerülő feladatok - mint például egy szennyezőforrás okozta szennyezés felszámolása, víztermelő kutak veszélyeztetettségének kimutatása - megoldásában szinte minden esetben transzportmodellezés is alkalmazásra kerül. A transzportmodellezés a valóságban felszín alatt lejátszódó szennyezőanyag-terjedési folyamatok szimulációja, követése számítással.

Magyarországon az elmúlt évszázadban jelentősen nőtt az előállított és felhasznált kockázatos vegyi anyagok mennyisége. A kockázatos vegyi anyagok közül a klórozott szénhidrogének alkalmazására hazánkban az elmúlt 50-70 évben került sor [1]. A klórozott szénhidrogének környezeti elemekre és az élővilágra kifejtett káros hatásainak felismerése és kezelése körülbelül 30-40 évvel ezelőtt kezdődött a világon, hazánkban 20 évvel ezelőtt.

Felismerték, hogy a környezeti elemek (talaj, földtani közeg, felszín alatti víz, felszíni víz, levegő) tisztasága komoly jelentőséggel bír a földi élet fennmaradása és minősége szempontjából, és a szennyezettség mértéke pénzben is mérhető és kifejezhető.

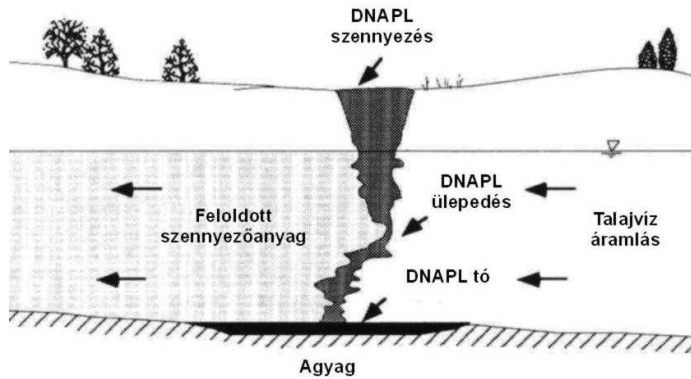
2. A klórozott szénhidrogének és kimutatásuk

A klórozott szénhidrogének általában apolárosak és vízzel nem elegyednek. Lipofil sajátosságuk alkalmassá teszi őket zsírok és olajok oldására. Éghetőségük a halogéntartalom függvénye; azaz minél nagyobb a halogéntartalom, annál kisebb az éghetőség, így pl. a CCl_4 tűzoltó-berendezésekben használt anyag. Kémiai viselkedésük jelentősen eltér a szénhidrogénektől. A C-X kötés ugyanis a halogénezett szénhidrogének könnyen támadható reakciós pontja. Ez teszi például alkalmassá ezeket a vegyületeket, hogy a szerves szintézisekben további származékok előállítására használják fel őket [2].

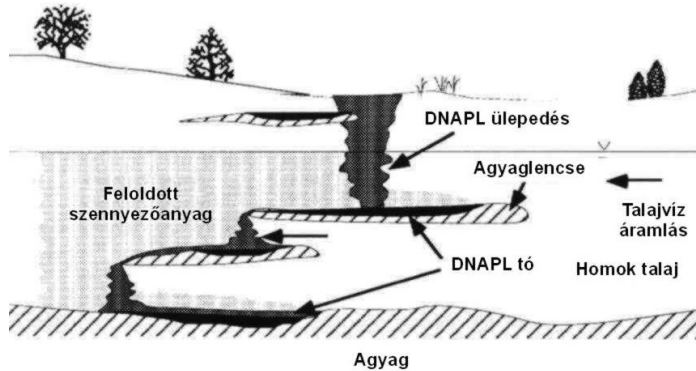
Ezen anyagok kimutatása során a mérési módszerek kialakításánál figyelembe kell venni, hogy a kérdéses vegyületek koncentrációja a vizsgált közegben a természetes hígulás miatt igen kicsi ($\mu\text{g/l}$ tartomány). Ráadásul, többnyire számos rokon származék van jelen egymás mellett [3]. Ezek egyedi meghatározása érzékeny elválasztási és mérési eljárások alkalmazását kívánja meg. Ilyenek a korszerű műszeres analitikai módszerek, melyek folyamatos fejlődésüknek köszönhetően egyre kisebb vizsgált mintamennyiségből, egyre pontosabb meghatározást tesznek lehetővé.

3. A halogéntartalmú szerves vegyületek viselkedése és terjedése a talajban és a felszín alatti vízben

A szerves szennyezések részben a levegő útján, részben, mint folyadékok, pl. szivárgások, kiömlések formájában vagy a szennyvízzel kerülhetnek a talajba, ahol bonyolult megoszlási, lebomlási és transzportfolyamatok alakítják ki mindenkori koncentrációjukat. Ezek a talajba került szerves vegyületek részben a talajvízbe jutnak, részben a talaj szemcséihez kötődnek. A vízzel érintkezésbe kerülő szennyezések egy része, oldott vagy különálló fázisként, a vízzel együtt vándorolhat (1. és 2. ábra).



1. ábra. DNAPL szennyezés mozgása homogén talajban.



2. ábra. DNAPL szennyezés mozgása inhomogén talajban.

A víznél nagyobb sűrűségű és vele nem elegyedő folyadékok (DNAPL-dense, non-aqueous phase liquids) – köztük a legtöbb halogéntartalmú szerves vegyület – kezelhetőségét megnehezíti, hogy hajlamosak a víztől elkülönülve a talaj repedéseiben meghúzódni. Ezek a zárványok nem követik a talajvíz mozgását és eltávolításuk igen nehéz, sokszor lehetetlen feladat. (A szilárd és folyadékfázis

közi megoszlás, a szorpció/desorpció, valamint a DNAPL-zárványok kialakulása fizikai törvényeknek alávetett, egyensúlyi feladat. Az egyensúly helyzete függ a szóban forgó anyagok természetétől és a befogadó közeg fizikai-kémiai sajátosságaitól.) [4].

A nem-vizes folyadékok (NAPL) a talaj repedéshálózatán keresztül jutnak el a talajvízbe, terjedésük irányát e repedésekben kialakuló kapilláris erők és a felhajtóerő viszonya szabályozza.

A klórozott szénhidrogének sorsát a felszín alatti környezetben a földtani közeg sajátosságain kívül az adott vegyi anyag fizikai, kémiai jellemzői befolyásolják, ezek a teljesség igénye nélkül a sűrűség, kinematikai viszkozitás, felületi feszültség, kémiai összetétel, oldhatóság vízben és egyéb oldószerekben, gőznyomás, Henry-állandó, nedvesítő képesség [5].

4. Klórozott szénhidrogének transzportmodellezése

4.1. A Groundwater Modelling System

A Groundwater Modelling System az egyik legátfogóbb szivárgáshidraulikai modellezési rendszer. Olyan átfogó rendszer, mellyel a hidrodinamikai- és transzportmodellezés minden fázisa elvégezhető:

- területjellemzés,
- modellfelépítés,
- optimalizálás,
- utófeldolgozás, és
- megjelenítés.

A GMS véges differencia és véges-elem 2D és 3D modellekkel is együttműködik: MODFLOW 2000, MODPATH, MT3DMS/RT3D, SEAM3D, ART3D, UTCHEM, FEMWATER, PEST, UCODE, MODAEM és SEEP2D [6].

A program moduláris felépítése lehetővé teszi, hogy a felhasználó csak azokat a modellezési képességeket használja, amelyekre szüksége van.

4.2. Az Utchem modul

Az Utchem programot a Texasi Egyetem (Austin), Olaj és Környezeti rendszerekkel foglalkozó mérnöki központja fejlesztette ki. Eredetileg szénhidrogén szennyeződések modellezésére alkalmazták, mára azonban a különböző környezetvédelmi problémák megoldására alakították át. A program önmagában is megvásárolható, de része a Groundwater Modelling System-nek (továbbiakban GMS) is.

A Miskolci Egyetem Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Tanszékén ezzel a program csomaggal (GMS) foglalkozunk, már három éve. Ezek közül most az Utchemet mutatjuk be.

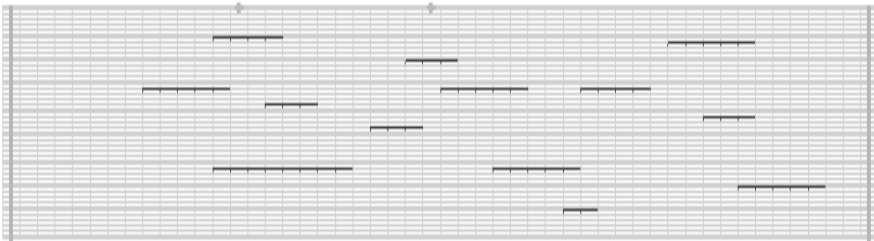
Mire is használható az Utchem? Mint már azt említettük 3-dimenziós több komponensű, több fázisú véges differencia modellt lehet létrehozni. Nagyon jól használható szennyeződésterjedések, és NAPL (Non-Aqueous Phase Liquid) szennyeződéseknek felületaktív anyagokkal elősegített kármentesítésének (*Surfactant Enhanced Aquifer Remediation - SAER*) modellezésére. Ideális eszköze az UTCHEM a pump-and-treat rendszerek szimulációjának.

A következő fejezetben egy esettanulmányt mutatunk be, ahol egy klórozott szénhidrogén szennyezést szimuláltunk.

4.3. Esettanulmány bemutatása az Utchem modul alkalmazásával

Adott területen két pontszerű forrásból 1 ill. 0,75 m³/d főként PCE-t tartalmazó szénhidrogén származék került a talajba 30 napon keresztül. A terület földtanáról elmondható hogy több kisebb nagyobb mikro-rétegzettségű agyag rétegek találhatók a szennyeződések alatt, amelyen az olajszármazék nem tud (vagy csak nagyon kis mértékben tud) áthatolni. A szénhidrogén származék sűrűsége 1,6 g/cm³. A talajvíz áramlási iránya balról jobbra van.

A 3. ábrán a földtani közeg látható, amelyben jól megfigyelhető a mikro-rétegzett agyagrétegek és a modell határfeltételei.



3. ábra. A homokos homoklisztes talajban lévő mikrorétegzet agyagrétegek és a szennyező- források.

Az alábbi ábrán a klórozott szénhidrogén transzport modellje látható, a szennyezést követő 30. napon. Jól látható a PCE koncentrációjának növekedése az agyag rétegeken.



4. ábra. A 30 napos szennyezés után fél évvel kialakult szennyeződés eloszlás.

A 4. ábra a klórozott szénhidrogén eloszlást mutatja a szennyezést követő 3. évben. Megfigyelhető a kvázi vízzáró rétegen való növekvő szennyező anyag koncentráció.



5. ábra. A 3 év elteltével kialakuló szennyeződés.

4.4. A sztochasztikus modellezés és a SEAM3D modul

A GMS program egyik legvonzóbb lehetősége a MODFLOW-hoz, illetve a hozzá kapcsolódó transzportmodellekhez rendelkezésre álló sztochasztikus modellezési eszközök megléte.

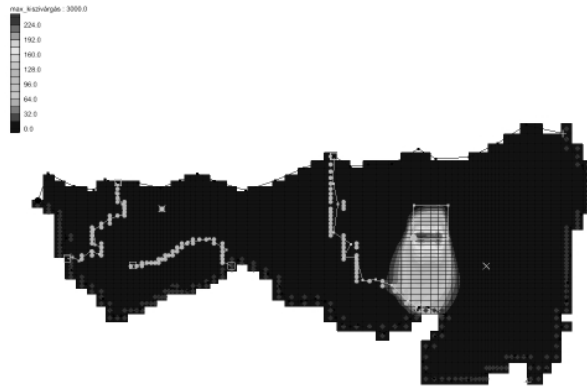
A sztochasztikus szimulációk kétféleképpen építhetők fel: paraméter randomizációs megközelítés és indikátor szimuláció. A paraméter randomizáció a különböző realizációkat véletlen mintavétellel (Monte Carlo), Latin Hypercube mintavétellel, vagy Gauss-mezőkkel hozza létre [7].

A 6. ábra egy hulladéklerakó meghibásodásából adódó maximálisan kiszivárgó csurgalékvíz mennyiségét mutatja 3000 napra vonatkozóan. A modellezés során három paraméter értékét – 1 zóna beszivárgást, 2 zóna beszivárgást és szivárgási tényezőt – becsülni tudtuk, ezért minimum és maximum értékeket állítottuk be, ezzel létrehozva egy-egy intervallumot. A következő lépésben ezeket további három részre (szegmensekre) osztottuk fel és megadtunk egy feltételezhető deviáns értéket. A Modflow ezek után 27 futatást készít (3*3*3), aminek végén különböző eseteket hoz létre az egyes paraméterek kombinációjából és megjeleníthető a legvalószínűbb eset.

Sztochasztikus inverz szimuláció is végezhető, melynek során mindegyik modellfuttatásra elvégezhető a paraméterbecslés az optimális értékek megkeresése érdekében. Továbbá, a sztochasztikus MODFLOW és MT3D megoldásokra statisztikai elemzések végezhetők. Létrehozhatók és megjeleníthetők az átlag, a minimum és maximum, valamint a szórás értékek adatkészletei.

A SEAM3D Reaktív transzport szimulációs kód, mellyel komplex, több szubsztrátumot és elektron akceptort is figyelembe vevő biodegradációs feladatok modellezhetők. A modul alapja a MT3DMS kód. A SEAM3D - az MT3DMS modulhoz képest – tartalmaz egy biodegradációs és egy NAPL típusú

szennyeződések lebomlást szimuláló csomagot. SEAM3D Mark Widdowson fejlesztette ki a Virginia Tech egyetemen.



6. ábra. Egy hulladéklerakóból kiszivárgó csurgalékvíz sztochasztikus modellezésének eredménye

5. Összefoglalás

Munkánk első részében bemutattuk a felszín alatti környezetbe került vízzel nem elegyedő és a víznél nagyobb sűrűségű klórozott szénhidrogének mozgásformáit, azokat befolyásoló tényezőket. Megállapítható, hogy az önálló szerves fázis két megjelenési formája a szivárgáslassító képződmények felszínén az összefüggő folyadéktest, ahol a pórustér nagyrészt szerves fázissal kitöltött, és a cseppek, erek formájában elkülönülő forma, ahol a pórusok szerves fázisú telítettsége alacsony.

A második részben bemutattuk a Groundwater Modeling System programcsomagot és annak moduljait. Ezek közül kiemeltük azt, amely leginkább alkalmas a klórozott szénhidrogének modellezésére, ez pedig az Utchem modul. Részleteztük a program menü rendszerét és felhívtuk a figyelmet arra, hogy, e szennyezőanyagoknál, mennyire fontos a megfelelő és pontos adatok ismerete. Végül egy esettanulmányon keresztül bemutattuk egy klórozott szénhidrogén modellezést.

6. Köszönetnyilvánítás

A tanulmány/kutató munka a TÁMOP-4.2.1.B-10/2/KONV-2010-0001 jelű projekt részeként – az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében – az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg

Irodalomjegyzék

- [1] Nyari Z., Neduczka B., Szucs P., Madarasz T., Halmoczky Sz.: *Non-invsive geophysical methods in environmental diagnostics of contaminated sites*, EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers) 69th Conference and Exhibition – London, UK, 11-14 June 2007, E010, pp. 1-5
- [2] A. Lucianoa, P. Viottib, P. M. Papinic: *Laboratory investigation of DNAPL migration in porous media*, Journal of Hazardous Materials 176 (2010), pp. 1006-1017
- [3] Z. Dokou, G. F. Pinder: *Optimal search strategy for the definition of a DNAPL source*, Journal of Hydrology 376 (2009) 542–556
- [4] Kovács B. (2004): Hidrodinamikai és transzportmodellezés I., Miskolc
- [5] P. Szucs, T. Madarász and A. Toth: *Complex hydrogeological modeling of multifunctional artificial recharge options of the Great-forest park in Debrecen, Hungary*, Intellectual Service for Oil and Gas Industry. Analysis, Solutions, Perspectives, Proceedings, 4th Volume, ISBN: 978-963-661-761-5., University of Miskolc and UFA State Petroleum Technological University, 2007., pp. 140-145.
- [6] Engineering Computer Graphics Laboratory (1998): *Groundwater Modelling System – The department of defense*, Brigham Young University
- [7] P. Szucs, F. Civan, M. Virag: *Applicability of the most frequent value method in groundwater modeling*. Hydrogeology Journal (2006)