

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

蒸汽注入法去除地下水中含氯有機物之研究(III)

The removal of chlorinated organic compounds in groundwater by steam injection system (III)

計畫編號：NSC 90-2621-Z-002-033

執行期限：90 年 8 月 1 日至 91 年 7 月 31 日

主持人：駱尚廉 教授

國立台灣大學環境工程學研究所

摘要

本研究是針對過去在現地以蒸汽注入法進行整治試驗後，以數值模式模擬現地試驗結果。在熱傳模擬部分，模擬結果顯示滲透係數在垂直方向上比水平方向的影響為高，垂直滲透係數高，則蒸汽較容易向上竄升，使得土壤或地下水溫度急遽升高。熱傳模擬結果顯示在高溫蒸汽部分，熱傳導之效應不若熱對流大，與現地試驗之討論結果相同。而熱對流則會受到滲透係數之影響，熱傳導則受到熱傳導係數之影響，因此熱傳導係數之敏感度也比滲透係數低。但若考慮中間溫度之分佈範圍，則熱傳導將是主要之熱量傳送機制，此時熱傳導係數相形之下也就變得重要。此外以 T2VOC 模式模擬污染物傳輸，顯示土壤中五氯酚高濃度區在經過蒸汽注入後，已有重大之改變。在 100°C 等溫線之內的五氯酚濃度已相當低，顯示原有土壤中的五氯酚已經由吸附相轉變至水中溶解相，與現地試驗之討論結果相同。T2VOC 模式模擬結果顯示地下水濃度分佈曲線與 100°C 溫度分佈曲線之形狀相當類似，正可說明蒸汽可對五氯酚產生推移作用。且若場址垂直方向之滲透係數較高，蒸汽容易向上移動，使得高污染區也隨之向上移動。而污染物 Koc 值也會影響含水層中污染物濃度之分佈，Koc 值高會使污染物較不易向上移動。而由敏感度分析結果研判，垂直方向之滲透係數比 Koc 值對於五氯酚分佈之

影響為高。而蒸汽注入量則為最重要的操作參數，增加蒸汽注入量一倍可使本研究場址之影響圈半徑由 12 公尺增加 3 公尺以上。因此在設計蒸汽注入系統時，應依據所欲之影響圈半徑規劃設計適當的蒸汽注入量。

關鍵字：五氯酚、熱脫附動力模式、蒸汽注入、加熱抽除地下水

前言

本計畫延續上年度之蒸汽注入現場模型試驗，以數值模式模擬蒸汽注入地下水後，地下水溫度之變化趨勢及五氯酚在土壤地下水的重新分佈。

Pruess (1987, 1991) 所發展之 TOUGH2 模式具有模擬氣相、液相之空氣、水等物種熱傳現象之功能，主要用於放射性核種之熱傳模擬。

Ronald Falta 等學者(Falta *et al.*, 1995)則以 TOUGH2 模式為藍本，自 1990 年起開始改寫 TOUGH2 模式，在該模式中加入污染物質傳輸之功能，使得該模式可於模擬地下水流及溫度分佈時，同時計算污染物質之分佈，改寫後之模式稱為 T2VOC。其中 T2 代表本模式之前身 TOUGH2，VOC 是指 Volatile Organic Compounds。T2VOC 將污染物質視為一個單獨的相，可在地下水中流動、溶解、揮發、及被土壤吸附，因此可應用於目前國內外所常見到之 NAPL 污染場址之物質傳輸問題。

且由於 T2VOC 具有模擬氣相、液

相、NAPL 相等三相變化之功能，因此近年來也有學者 (McCray, 1997; Mortensen, 2000) 應用 T2VOC 模擬 Air Sparging 等現地整治系統處理 NAPL 或其他有機物，其模擬結果也與試驗結果相符。

本研究也以 T2VOC 為工具，進行地下水溫度及五氯酚傳輸之現場試驗模式模擬工作。

概念模式設定

依據現場試驗設備之設置情形，試驗區半徑為 15m，上部含水層深約 10~12m，因此主要模擬區域之範圍設為長寬各 30m，深 11m，蒸汽注入井設於模擬區域中央。模擬區域之座標系統採用三維卡氏座標 (Cartesian System)，主要模擬區域分為 1100 個區塊 (grid)，每個區塊長寬各 3m，高 1m，因此在 X 及 Y 軸上各有 10 個區塊，在 Z 軸上共有 11 個區塊。

但一般在進行地下水流或是物質傳輸數值模擬時，整個模擬區域必須大於計算影響範圍，如此計算結果才不至於產生邊界效應。因此本研究將主要模擬區域之四個邊界向外再延伸兩個區塊，每個區塊長寬各 30m，因此整個模擬區域長寬各 153m，長寬各有 15 個區塊，在 Z 軸上共有 11 個區塊，總計整個模擬區域共有 2475 個區塊。

而蒸汽之比熱焓 (specific enthalpy) 在壓力為 1.2 kg/cm^2 時，比熱焓為 $2.2 \times 10^6 \text{ J/kg}$ (Burghardt, 1993)。土壤顆粒密度則為 2.65 g/cm^3 ，孔隙率依據過去實驗結果，設為 0.5。而含水層透水係數依據過去在本研究場址之實測結果顯示為 $2.484 \times 10^{-3} \text{ cm/sec}$ 至 $5.903 \times 10^{-3} \text{ cm/sec}$ ，再換算為絕對滲透係數 (k, absolute permeability) 為 $2.54 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \sim 6.03 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ 之間。

土壤之熱傳導係數 (thermal conductivity) 一般為 $0.25 \sim 8.8 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ (Ross, 1989; Jury et al., 1991; Domenico,

1998)，通常乾燥未飽和砂土之熱傳導係數較低，而石英熱傳導係數最高，黏土則大約在 $2.9 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ 左右。

土壤比熱為 $800 \sim 1920 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$ (Ross, 1989; Jury et al., 1991)，砂土之比熱較低，而土壤有機質含量高者比熱會較高。

上述這些參數必須在模擬時進行參數校正。而模擬之時間依據現場試驗之期程為六週，也就是 42 日。

模擬區域四周之邊界為定水頭邊界，也就是假設邊界上之水位不會產生變化，因此屬於 Dirichlet boundary condition。由於本模擬區域相當大，遠大於蒸汽注入之實際影響範圍，因此這種假設應可成立。模擬區上下兩層之區塊則設為無通量邊界。

模擬結果

● 地下水溫度分佈

圖 1 為模擬現場蒸汽注入地下水後之溫度分佈結果， 60°C 之等溫線約距蒸汽注入井 13m，而 100°C 之等溫線約距蒸汽注入井 10m。相對應於這項模擬結果之輸入參數值列於表一中，各參數值均在現場實測結果或是過去文獻記載之範圍內，這也證明本模擬所採用之參數均在合理範圍中。

為瞭解主要參數對於地下水溫分佈之影響，將 X 軸絕對滲透係數、Y 軸絕對滲透係數、Z 軸絕對滲透係數、土壤熱傳導係數、土壤比熱等五個參數進行敏感度分析。分析的方式是將這些參數逐一調整，每次調整為數值增加一倍，或是減少一倍，再以現場溫度計位置之模擬溫度結果為差異計算基準，計算其相對誤差百分比。

將縱軸之滲透係數增加為標準值的二倍，也就是 $1.6 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ ，注入蒸汽 42 日後所得到之溫度分佈如圖 2 所示，此時 100°C 之等溫度線大致與標準模擬結果相似，但是 80°C 及 60°C 之等溫度線則比標準結果大許多，甚至地表上 7m 半徑範圍內之土壤溫度

均達到 80°C，這顯然與實際溫度分佈狀況不符。但由此可看出當垂直方向的滲透係數過大，垂直方向及水平方向的滲透係數變得很小，只有 1:2.5 時，蒸汽相當容易向上移動，造成地表溫度之急遽上升。

表 1 為部分參數之敏感度分析結果。其中垂直方向滲透係數 k_z 之敏感度較高，當降低一倍時，累積相對誤差達到 304%；增加一倍時，累積相對誤差也有 277.8%。而水平方向滲透係數 k_x 及 k_y 之敏感度較低，當降低一倍時，累積相對誤差為 97.8%；增加一倍時，累積相對誤差為 132.5%。

● 五氯酚濃度分佈

經過多次反覆計算後，最後得到如圖 3 所示之試驗區地下水五氯酚濃度分佈模擬圖，圖中 GM2-S 之五氯酚濃度仍為 19.5 mg/L，與現場試驗結果相同；而 GM2-D 之五氯酚濃度為 0.26 mg/L，與現場試驗結果相同也是相當低，證明模擬結果與現場試驗結果類似。由圖 3 可明顯看出蒸汽注入後會對五氯酚產生向上推移之動作，原先較低濃度之上層區經過蒸汽注入後濃度已經上升，且蒸汽注入井附近之高污染區濃度也明顯下降。整個濃度分佈曲線與 100°C 溫度分佈曲線之形狀相當類似，正可說明蒸汽之存在可對五氯酚產生推移作用。

由於 K_{oc} 值在 T2VOC 中被設定為定值，而無法隨溫度改變而變化，因此模式參數敏感度分析首先針對 K_{oc} 值進行。將 K_{oc} 由標準參考值之 100 L/kg 增加一倍為 200 L/kg，五氯酚上移的現象仍然很明顯，但是大於 15mg/L 之污染帶上升位置已不若標準參考值之結果多。這是由於所輸入之 K_{oc} 值高，五氯酚比較容易吸附在土壤中，而無法經由水溫上升作用而移除，這也與過去實驗室試驗及現場試驗所做之推論相符。

在進行熱傳模式模擬時，曾發現

垂直方向之滲透係數對於地下水溫之敏感度最高，因此為瞭解是否對於五氯酚濃度分佈也有重大影響，也將此參數由標準參考值之 $8.0 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ 增加一倍為 $1.6 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ 。結果如預期般，由於垂直方向之滲透係數增加，蒸汽容易向上移動，使得高污染區也隨之向上移動，顯示垂直方向之滲透係數對於五氯酚分佈之影響也相當高。

而蒸汽注氣量為重要操作參數，因此針對該參數進行敏感度分析，當注氣量減少一半，會受到影響的五氯酚濃度範圍明顯小了許多，影響圈小了約 3 公尺，如圖 4 所示。因此在設計蒸汽注氣量時，應先考慮所需要之影響圈半徑為何，才可設計符合需要之蒸汽注入系統。

將各敏感度分析之結果進行累積相對誤差之計算，可得表 2。垂直方向之滲透係數對於五氯酚分佈之影響最高，數值增加一倍，累積相對誤差達到 52.3%。

結論

熱傳模擬結果顯示滲透係數在垂直方向上比水平方向的影響為高，垂直滲透係數高，則蒸汽較容易向上竄升，使得土壤或地下水溫度急遽升高，這對於蒸汽注入是否可達到良好效果有決定性的影響。

且熱傳模擬結果顯示在高溫蒸汽部分，熱傳導之效應不若熱對流大，與現地試驗之討論結果相同。而熱對流則會受到滲透係數之影響，熱傳導則受到熱傳導係數之影響，因此熱傳導係數之敏感度也比滲透係數低。但若考慮中間溫度之分佈範圍，則熱傳導將是主要之熱量傳送機制，此時熱傳導係數相形之下也就變得重要。

T2VOC 模式模擬顯示地下水濃度分佈曲線與 100°C 溫度分佈曲線之形狀相當類似，正可說明蒸汽之存在可對五氯酚產生推移作用。且由於垂直方向之滲透係數增加，蒸汽容易向上

移動，使得高污染區也隨之向上移動，其移動趨勢比 Koc 值降低所造成之影響還明顯，顯示垂直方向之滲透係數比 Koc 值對於五氯酚分佈之影響為高。

計畫成果自評

本計畫延續過去兩年之現場試驗，針對蒸汽注入法進行模式模擬。研究結果顯示模式可有效模擬現場蒸汽注入之過程，且對許多可能影響蒸汽注入成效的因子逐一加以檢討，因此使蒸汽注入法之技術更為成熟，對於未來在現場進行大規模之整治工作將有相當大之助益。本研究成果正在改寫中，將投稿至國際期刊。

參考文獻

1. Falta, R; K. Pruess; I. Javandel; P. Witherspoon, *Water Resources Research*, Vol.25, No.10, pp2159 – 2169 (1989)
2. Falta, R; K. Pruess; I. Javandel; P. Witherspoon, *Water Resources Research*, Vol.28, No.2, pp433 – 449 (1992)a
3. Falta, R; K. Pruess; I. Javandel; P. Witherspoon, *Water Resources Research*, Vol.28, No.2, pp451 – 465 (1992)b
4. Falta, R.; K. Pruess; S. Finsterle; A. Battistelli, *T2VOC User's Guide*, Report No. LBL-36400, US Department of Energy (1995)
5. Pruess, K., *TOUGH User's Guide*, Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC (1987)
6. Pruess, K., *TOUGH2 – A General Purpose Numerical Simulator for Multiphase Fluid and Heat Flow*, Report No. LBL-29400, Lawrence

Berkeley Laboratory, Berkeley, CA (1991)

7. Reid, R. C.; J. M. Prausnitz; B. E. Poling, *The Properties of Gases & Liquids*, 4th Ed., McGraw-Hill Book Company, New York, NY (1987)
8. Tse, Ken K. C.; Shang-Lien Lo; Jerry W. H. Wang, *Environmental Science & Technology*, Vol.35, No.24, pp4910-4915 (2001)

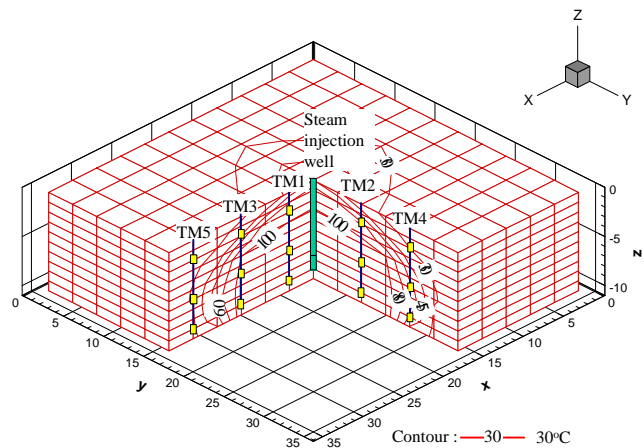


圖 1 蒸汽注入之溫度分佈模擬結果

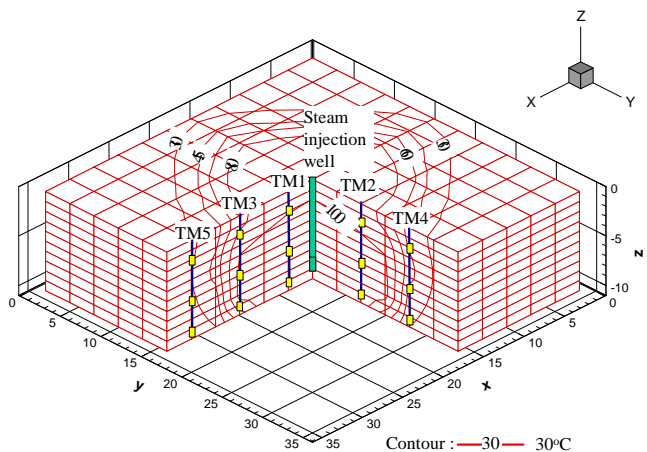
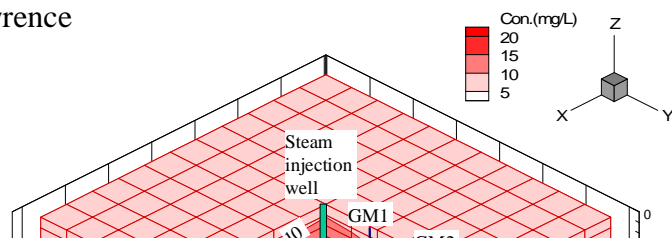


圖 2 垂直滲透係數增加一倍後之溫度分佈模擬結果



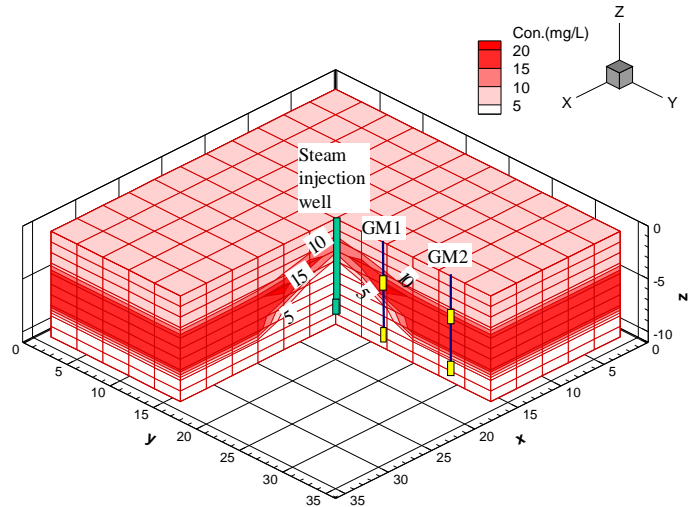


圖 3 蒸汽注入地下水後五氯酚濃度分佈模擬結果

圖 4 蒸汽注入量減少一半後五氯酚濃度分佈

表 1 水文參數對溫度分佈影響之敏感度分析

	標準參考值	kz減少一倍		kz增加一倍		kx及ky減少一倍		kx及ky增加一倍	
		溫度(°C)	相對誤差	溫度(°C)	相對誤差	溫度(°C)	相對誤差	溫度(°C)	相對誤差
TM1-S	95.5	47.0	50.7%	99.3	4.0%	100.0	4.7%	74.7	21.7%
TM1-M	110.0	109.4	0.5%	109.8	0.2%	112.3	2.1%	107.9	1.8%
TM1-D	118.5	120.0	1.3%	116.8	1.4%	119.9	1.2%	117.2	1.1%
TM2-S	86.6	36.4	57.9%	97.1	12.2%	97.1	12.2%	55.1	36.3%
TM2-M	108.3	108.1	0.2%	107.5	0.7%	109.8	1.3%	106.9	1.3%
TM2-D	114.9	116.5	1.4%	113.1	1.6%	115.5	0.5%	114.3	0.6%
TM3-S	45.9	29.0	36.9%	86.0	87.2%	58.8	28.0%	37.2	19.0%
TM3-M	106.3	106.1	0.1%	105.0	1.3%	106.8	0.5%	105.5	0.7%
TM3-D	112.1	113.8	1.5%	91.6	18.3%	112.1	0.0%	112.0	0.1%
TM4-S	29.9	26.0	13.2%	42.7	42.7%	32.4	8.1%	28.5	4.9%
TM4-M	66.4	72.2	8.7%	43.5	34.4%	57.7	13.1%	73.4	10.6%
TM4-D	57.7	111.1	92.4%	31.7	45.1%	46.8	18.9%	69.8	20.9%
TM5-S	25.8	25.2	2.4%	28.3	9.8%	26.0	0.9%	25.7	0.4%
TM5-M	31.0	34.8	12.4%	27.0	12.9%	29.6	4.5%	34.2	10.3%
TM5-D	27.1	33.7	24.2%	25.5	6.1%	26.7	1.6%	27.9	2.7%
累積相對誤差			304.0%		277.8%		97.8%		132.5%

表 2 地下水中五氯酚濃度分佈影響之參數敏感度分析

	標準參考值	Koc增加一倍		kz增加一倍		kz減少一倍	
	濃度 (mg/L)	濃度 (mg/L)	相對誤差	濃度 (mg/L)	相對誤差	濃度 (mg/L)	相對誤差
GM1-S	16.2	19.7	21.6%	9.23	43.0%	20.4	25.9%
GM2-S	19.5	19.3	1.0%	17.7	9.2%	19.2	1.5%
累積相對誤差		22.6%		52.3%		27.5%	

	標準參考值	蒸汽注氣量減少一倍		土壤比熱增加一倍	
	濃度 (mg/L)	濃度 (mg/L)	相對誤差	濃度 (mg/L)	相對誤差
GM1-S	16.2	22.2	37.0%	18.9	16.8%
GM2-S	19.5	19.2	1.5%	19.2	1.6%
累積相對誤差		38.6%		18.4%	