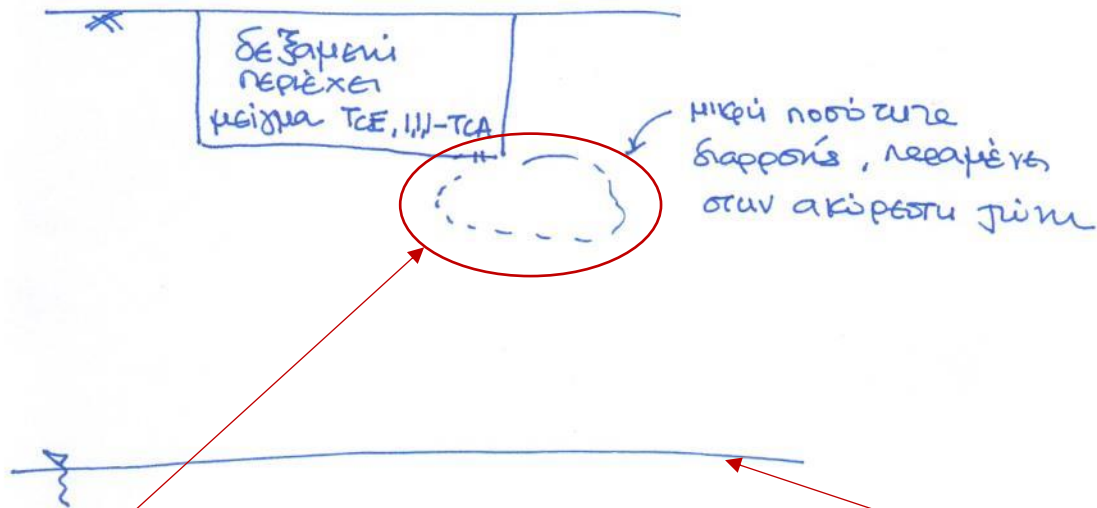


Παράδοση: 25 Νοεμβρίου 2020

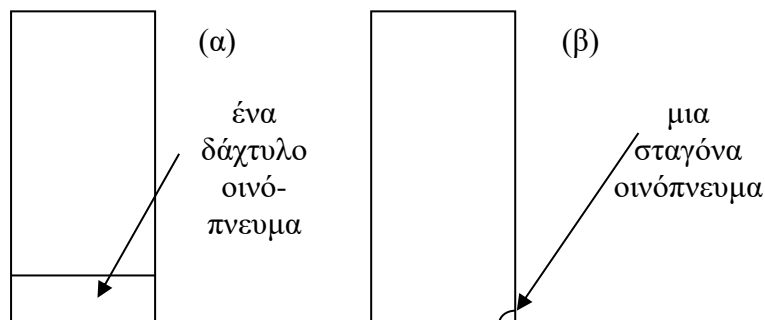
1. [Σε αυτό το ερώτημα εξασκείστε να συνοδεύετε περιγραφές και λύσεις προβλημάτων με σχήματα.] Φτιάξτε ένα σκίτσο διαρροής στο υπέδαφος που να αντιστοιχεί στην εκφώνηση του μικρού προβλήματος εξάσκησης Νο 2 από την ιστοσελίδα του μαθήματος: http://users.ntua.gr/mpanta/EG/AllilepidrasiFasewn_MikraProblimataEksaskisis.pdf



Φτιάχνω μια εικόνα που δείχνει ένα σενάριο διαρροής συμβατό με την εκφώνηση και την περιοχή όπου έχω κυρίως δύο φάσεις, NAPL και αέρα (καθώς είμαι μακριά από τον Υ.Ο.) και έτσι έχει πρακτικό ενδιαφέρον η απάντηση στο μικρό πρόβλημα εξάσκησης Νο 2.

2. [Ερώτημα από παλιά πρόοδο.] Το Σχήμα 1 απεικονίζει το ξεκίνημα ενός πειράματος που μπορείτε να κάνετε στο σπίτι. Στο αριστερό ποτήρι, (α), βάζετε ένα δάχτυλο οινόπνευμα και καλύπτετε το ποτήρι με ένα κομμάτι μεμβράνης (για να κολλήσει καλά στα τοιχώματα του ποτηριού) και ένα κομμάτι αλουμινοχαρτο (για να μην ξεφύγουν ατμοί οινοπνεύματος από τους πόρους της μεμβράνης). Στο δεξί ποτήρι, (β), βάζετε μια σταγόνα οινόπνευμα και το καλύπτετε με τον ίδιο τρόπο. Αφήνετε τα δυο ποτήρια στον πάγκο της κουζίνας και πάτε για ύπνο. Αν την επόμενη μέρα μπορούσατε να μετρήσετε τη συγκέντρωση του οινοπνεύματος στον αέρα των ποτηριών, τι θα περιμένατε να μετρήσετε στο κάθε ποτήρι;

Σημείωση: Αν και το οινόπνευμα αποτελείται κυρίως από αιθανόλη (C_2H_6O), η ερώτηση δεν θέλει να βρείτε νούμερα (χωρίς όμως και να απαγορεύεται).



Σχήμα 1. Πείραμα αλληλεπίδρασης φάσεων στην κουζίνα μας: αρχικές συνθήκες (πριν πάμε για ύπνο).

Μια πρώτη απάντηση είναι: και οι δύο συγκεντρώσεις είναι ίδιες, ίσες με τη συγκέντρωση που αντιστοιχεί στην τάση ατμών του οινοπνεύματος στη θερμοκρασία του σπιτιού μας, ας πούμε 20°C, που είναι η μέγιστη δυνατή συγκέντρωση στον αέρα (για τη συγκεκριμένη θερμοκρασία). Έχοντας υπολογίσει αυτήν τη συγκέντρωση και, επειδή ξέρουμε ότι το οινόπνευμα είναι πτητικό, αναρωτιόμαστε πόση μάζα αντιστοιχεί στα 250 cm³ του ποτηριού και, πώς συγκρίνεται αυτή η μάζα με την μάζα που φανταζόμαστε ότι έχει μια σταγόνα. Ανάλογα με την υπόθεση που θα κάνουμε για τον όγκο της σταγόνας (από τον οποίον θα βρούμε τη μάζα της σταγόνας οινοπνεύματος), η σταγόνα ή θα έχει αρκετή μάζα για να γεμίσει το ποτήρι με ατμούς στη συγκέντρωση που αντιστοιχεί στην τάση ατμών ή, αν δεν έχει αρκετή μάζα, το ποτήρι με τη σταγόνα θα έχει συγκέντρωση μικρότερη από τη μέγιστη.

3. [Οι πράξεις που απαιτούνται για να απαντηθεί αυτό το ερώτημα είναι παρόμοιες με αυτές του λυμένου παραδείγματος στις σημειώσεις.] Ας υποθέσουμε ότι θέλετε να προσδιορίσετε ανώτατα όρια για περιστατικά διαρροών οργανικών μη υδατικών ρύπων σε κορεσμένο έδαφος, έχοντας αποφασίσει ότι μπορείτε να επιτρέψετε κάποιον μικρό (παραμένοντα) βαθμό κορεσμού, αφού λόγω των τριχειδών δυνάμεων η μη υδατική φάση είναι ακινητοποιημένη. Με αυτό το σκεπτικό, υπολογίστε τη μέγιστη συγκέντρωση σε έδαφος που περιέχει 1,1,1-τριχλωροαιθάνιο (1,1,1-trichloroethane – TCA) με μέσο παραμένοντα βαθμό κορεσμού 5%, χρησιμοποιώντας τις εξής παραμέτρους για το έδαφος: πορώδες 0.3 και ειδική πυκνότητα εδαφικών κόκκων 2.65. Αν κάνετε επιπλέον παραδοχές για να ολοκληρώσετε τους υπολογισμούς σας, να τις αναφέρετε σαφώς. Αν χρειαστείτε τις τιμές επιπλέον παραμέτρων, επιλέξατε κάποιες λογικές τιμές: συνιστάται να αναζητάτε τιμές που έχουν μετρηθεί σε πραγματικά περιστατικά. Σε κάθε περίπτωση, αναφέρατε τις πηγές σας (δηλ. δώστε όποια πληροφορία χρειάζεται για να μπορεί ένας τρίτος να βρει αυτό που βρήκατε εσείς). [Σε ποια εφαρμογή αντιστοιχεί αυτό το πρόβλημα: κατά τον χαρακτηρισμό ενός ρυπασμένου χώρου, παίρνω εδαφικά δείγματα και προσδιορίζω τη συγκέντρωση του τριχλωροαιθανίου στο έδαφος: στην περιοχή όπου ξεπερνιέται το ανώτατο όριο που έχω προσδιορίσει με τους υπολογισμούς μου, λαμβάνω κάποια δραστικά μέτρα αποκατάστασης, ενώ για μικρότερες τιμές επιλέγω πιο ήπια μέτρα. Ανάλογο σκεπτικό συναντήσαμε στο περιστατικό ρύπανσης με ορυκτέλαια σε χώρο αποθήκευσης της ΔΕΗ.]

Σχόλιο: το έδαφος παραμένει κορεσμένο, δηλ. χωρίς αέρα, απλά το TCA έχει διώξει (αντικαταστήσει) το 5% του νερού.

Συμβουλή: όταν δουλεύω με συγκεντρώσεις μόνο, επιλέγω εγώ έναν βολικό όγκο αναφοράς, ας πούμε 1 cm³.

Σύμφωνα με το λυμένο παράδειγμα στο Κεφάλαιο 4 (Ενότητα 4.7):

$$V = 1 \text{ cm}^3$$

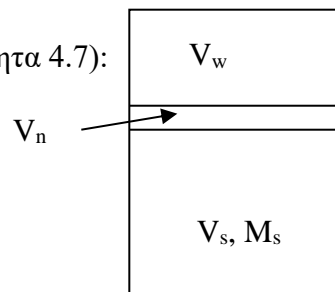
$$V_v = V n = 0.3 \text{ cm}^3$$

$$V_s = V - V_v = 0.7 \text{ cm}^3$$

$$M_s = G_s \rho_w V_s = 2.65 \times 1 \text{ g/cm}^3 \times 0.7 \text{ cm}^3 = 1.855 \text{ g}$$

$$V_w = V_v \times S_w = 0.3 \text{ cm}^3 \times 0.95 = 0.285 \text{ cm}^3$$

$$V_n = V_v \times S_n = 0.3 \text{ cm}^3 \times 0.05 = 0.015 \text{ cm}^3$$



Μάζα στην υδατική φάση = συγκέντρωση στο νερό x όγκος νερού

- Η συγκέντρωση στο νερό είναι ίση με τη διαλυτότητα (600 mg/l)⁽¹⁾ αφού έχουμε ξεχωριστή μη υδατική φάση.

$$M_1 = V_w \times C_{TCAw} = 0.285 \text{ cm}^3 \times 0.6 \text{ mg/cm}^3 = \mathbf{0.171 \text{ mg}}$$

Μάζα (ροφημένη) στη στερεά φάση = συγκέντρωση στη στερεά φάση x ξηρή μάζα στερεάς φάσης

- Για να βρω τη συγκέντρωση στη στερεά φάση πρέπει να εκτιμήσω τον συντελεστή διαχωρισμού K_p . Από τους LaGrega et al. (1994) βρίσκω για το TCA $K_{oc} = 152 \text{ ml/g}^{(2)}$. Για το ποσοστό οργανικού άνθρακα (ή οργανικό κλάσμα), ψάχνω μια τιμή που να έχει μετρηθεί σε πραγματικό έδαφος.

Ψάχνω στη βιβλιογραφία με λέξεις-κλειδιά organic carbon και sorption και βρίσκω το άρθρο των Allen-King et al. (1997)⁽³⁾. [Σημ: έτσι γράφουμε τις βιβλιογραφικές αναφορές μέσα σε κείμενο: Επίθετο Συγγραφέα (έτος), ή Επίθετο Πρώτου Συγγραφέα και άλλοι (έτος) (= et al., συντομογραφία για το «και άλλοι» στα λατινικά), ή Επίθετο Πρώτου Συγγραφέα και συνεργάτες (έτος) (για ελληνική αναφορά), ενώ παραθέτουμε την πλήρη αναφορά στο τέλος, σε ξεχωριστή ενότητα.] Οι Allen-King et al. (1997) μελετούν σε λεπτομέρεια την ρόφηση τριχλωροαιθενίου σε ένα παγετογενές έδαφος (till) πλούσιο σε άργιλο. (Συγκεκριμένα, υπολογίζουν πειραματικά τον συντελεστή διαχωρισμού K_p , μετρούν το οργανικό κλάσμα f_{oc} , κι έτσι μπορούν να υπολογίσουν τον συντελεστή διαχωρισμού K_{oc} που αντιστοιχεί στο οργανικό υλικό του χώρου που μελετούν, αντί να τον πάρουν από την βιβλιογραφία, όπως εμείς.) Δίνουν αποτελέσματα για δύο εδαφικά δείγματα, με τιμές $f_{oc} = 0.68\%$ και 1.95% , δηλ. πρόκειται για ένα έδαφος με σημαντικό ποσοστό οργανικού άνθρακα. Θα κάνω τους υπολογισμούς μου με τον μέσο όρο αυτών των τιμών, δηλ. $f_{oc} = 1.3\%$.

Γι' αυτές τις τιμές υπολογίζω $K_p = K_{oc} \times f_{oc} = 152 \text{ ml/g} \times 0.013 = 1.98 \text{ ml/g} = 1.98 \text{ l/kg}$.

Συγκέντρωση στη στερεά φάση

$$C_{TCA_s} = K_p C_{TCA_w} = 1.98 \text{ l/kg} \times 600 \text{ mg/l} = 1186 \text{ mg/kg} = 1.19 \text{ mg/g}$$

Μάζα στη στερεά φάση

$$M_2 = M_s \times C_{TCA_s} = 1.855 \text{ g} \times 1.19 \text{ mg/g} = \underline{\underline{2.2 \text{ mg}}}$$

Τέλος, **μάζα τριχλωροαιθενίου στη μη υδατική φάση**

$$M_3 = V_n \times d_{TCA}^{(4)} \times \rho_w = 0.015 \text{ cm}^3 \times 1.339 \times 1 \text{ g/cm}^3 = 0.02 \text{ g} = \underline{\underline{20 \text{ mg}}}$$

Άρα, η οριακή συγκέντρωση που ψάχνουμε είναι ίση με:

$$C_{TCA_{\text{χόμα}}} (\text{mg/kg}) = M_{PCE} / M_s = (M_1 + M_2 + M_3) / M_s = 22.37 \text{ mg} / 1.855 \text{ g} \\ = 12.06 \text{ mg/g} = \underline{\underline{12060 \text{ mg/kg} \approx 12 \text{ g/kg}}}$$

Σύμφωνα με τις παραδοχές της άσκησης, σε όποια περιοχή του ρυπασμένου χώρου βρίσκουμε τιμή μικρότερη από αυτήν την οριακή συγκέντρωση στο έδαφος, δεν απαιτείται αποκατάσταση.

Παράμετροι - Πηγές

⁽¹⁾**Διαλυτότητα:** $S_{TCA} = 4400 \text{ mg/l}$ (LaGrega et al., 1994) και $= 480-730 \text{ mg/l}$ (Mackay and Shiu, 1981): Εμπιστεύομαι πιο πολύ την δεύτερη αναφορά, επειδή πρόκειται για επιστημονικό περιοδικό με κύρος. Επιπλέον, η απάντησή μου θα είναι πιο συντηρητική αν επιλέξω πιο μικρή διαλυτότητα. Επιλέγω μια μέση τιμή από τους Mackay and Shiu (1981) $C_{TCA_w} = 600 \text{ mg/l}$

⁽²⁾**Συντελεστής διαχωρισμού υδατικής φάσης – οργανικού άνθρακα:** $K_{oc} = 152 \text{ ml/g}$ (LaGrega et al., 1994)

⁽³⁾**Ποσοστό οργανικού άνθρακα:** Allen-King, R.M., L.D. McKay and M.R. Trudell, 1997, Organic Carbon Dominated Trichloroethene Sorption in a clay-rich glacial deposit, Groundwater, No. 35, No 1, pp. 124-130.

⁽⁴⁾**Ειδική πυκνότητα:** $d_{TCA} = 1.339$ (Cohen, R.M., J.W Mercer and J. Matthews, 1993, DNAPL Site Evaluation, C.K Smoley.)