

بہ نام نزدان پاک



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: معدن، نفت و ژئوفیزیک

گروه: اکتشاف

بررسی آلودگی های نفتی با استفاده از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی و
ارائه راهکارهایی جهت کنترل و حذف آن ها در سفره آب زیرزمینی تهران در
ناحیه شرکت پالایش نفت تهران

دانشجو: آزاده آگاه

استاد راهنما:

پرفسور فرامرز دولتی ارده جانی

مشاور صنعتی:

مهندس حسین قریشی

رساله دکتری جهت اخذ درجه دکتری

شهریور ۱۳۹۱



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: معدن، نفت و ژئوفیزیک

گروه: اکتشاف

رساله دکتری سرکار خانم آزاده آگاه

تحت عنوان:

بررسی آلودگی های نفتی با استفاده از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی و ارائه
راهکارهایی جهت کنترل و حذف آن ها در سفره آب زیرزمینی تهران در ناحیه شرکت
پالایش نفت تهران

در تاریخ ۱۳۹۴/۰۵/۰۱ اهمیت تخصصی زیر جهت اخذ مدرک دکتری مورد ارزیابی و با
درجه مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	استاد راهنما
	دکتر فرامرز دولتی ارده جانی (استاد دانشگاه صنعتی شاهرود)

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	دکتر رضا قوامی ریایی (استادیار دانشگاه صنعتی شاهرود)		دکتر احمد خدادادی (دانشیار دانشگاه تربیت مدرس)
			دکتر همایون کتیبه (استادیار دانشگاه صنعتی امیر کبیر)
			دکتر ابوا لقاسم کامکار روحانی (دانشیار دانشگاه صنعتی شاهرود)

یتیم به

دو اسطوره صبر و شکیبایی

پدر و مادر عزیزم

و

تمام شهیدان ایران زمین

که جانشان را فدای سربلندی آردا دی سرزمین پاکشان کردند.

ریاس و قدردانی

خداوند بزرگ را ریاس من گویم که دوازده می علم و حکمتش را بر بنده کوچکش اندک گذرد و از بیکران عیش قهره ای نصیصم ساخت تا این لطیف و مهربان، در قالب این دیباچه جریا گردد.

در این راه دور، ارثه ادبی استاید و معنی معطای بس بزرگوار، بی چون چراغی فروزان، روشن کرد راه من بود که با شفقت و تدبیر، مرا چون کودکی نوها، قدم به قدم پیش برده و راه نمایانده اند. پنج حرف و کلمه ای اندازه و مقدار آن را ندارد و تا به رسم ریاس من، به ایشان تقدیم شود. به بدین الفاظ اندک و کوچک اکتفا می کنم تا نام از ایشان در ابتدا برده باشم و ریاس تقدیرشان؛ که "من هم بشکر این خلاق، هم بشکر این خالق". با تمام احترام و ادب نام من برم از استاد ابرجد جناب آقای دکتر فرامرز ذوقی ارده جانی، که در تمام این مدت و در قدم به قدم این راه، در حقیقت پدری کرده و حق استادی را بر من تمام، هر چند حق نگاروی را با بنایا و روم. بشکر من کنم از نامی اسانی به ترم که در تمام مراحل تکمیل مطالعات، مرا از حایت های بی دریغ خودی نصیب نگذاشتند، به خصوص آقایان مهندس بادا، مهندس میریثی، مهندس نیکیوت، دکتر لرون، دکتر احسانی طهرانی، دکتر عرب امری، دکتر کاظمکار روحانی، دکتر عطایی، دکتر میرشکی و خانم مامیدی، نوروزی، عباس و وحیدینا. یاد من کنم از دو اسطوره صبر و سکینایی، مهر و گذشت "پدر و مادر عزیزم" که اگر نبود یاری بی دریشان، قدرت نتوان من در برابر حقیقتی بجز ارادت های این راه ارغوانی ماند.

پسندارم از زحمت خالصانه کارمندان دانشکده معدن، نفت و ژئوفیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود به خصوص آقای حسین شاه حریبی. به جان اندازه از بهر این بهریشگی دوستان عزیزم، خانم مایه میرت و جرییدی و آقایان ریث پناهی، یوسفی، جدیری کمال بشکر را دارم.

"حاصل تحقیق پیش رو، شاید جبران گوشه ای از زحمتشان"

تعهد نامه

اینجانب آزاده آگاه دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی اکتشاف معدن دانشکده معدن، نفت و ژئوفیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده رساله بررسی آلودگی های نفتی با استفاده از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی و ارائه راهکارهایی جهت کنترل و حذف آن ها در سفره آب زیرزمینی تهران در ناحیه شرکت پالایش نفت تهران تحت راهنمایی پرفسور فرامرز دولتی ارده جانی متعهد می شوم:

- این تحقیق با حمایت شرکت پالایش نفت شهید تندگویان تهران انجام شده است.
- تحقیقات در این رساله توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود و شرکت پالایش نفت شهید تندگویان تهران می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی رساله تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از رساله رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این رساله، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت های آن ها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این رساله، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ ۱۳۹۱/۶/۹

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود و شرکت پالایش نفت شهید تندگویان تهران می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

آلودگی منابع آب زیرزمینی توسط آلاینده های آلی یکی از نگرانی های اصلی زیست محیطی می باشد. از این رو تأکید زیادی بر مدیریت منابع آب زیرزمینی در سال های اخیر صورت گرفته است. روش های دقیقی برای پیش بینی انتقال آلاینده ها از طریق محیط های متخلخل زیرسطحی مورد نیاز است تا محدوده آلوده مشخص شده و به موقع جهت کنترل و محدود کردن آن اقدام نمود.

در زمان حاضر، در شرکت پالایش نفت تهران و مجاور آن، نفت به صورت لایه ای بر روی سطح آب زیرزمینی موجود است. بررسی های صحرایی نشان داده است که آلودگی آب های زیرزمینی و خاک ناحیه وسیعی را شامل می گردد و لایه نفت در بیشتر چاه های ناحیه مشاهده شده است. بر طبق این بررسی ها، بیش از ۱۴۴۰۰۰۰ متر مکعب نفت در سراسر محدوده شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری وجود دارد. در این تحقیق، با توجه به شرایط ناحیه و داده های حاصل از اندازه گیری های صحرایی و داده های موجود در متون منتشر شده، مدل های جامع و کاملی برای هر منطقه ارائه گردید تا از نتایج حاصل از آن ها بتوان برای طراحی یک روش مناسب پاک سازی استفاده نمود.

برای نیل به این هدف، ابتدا یک مدل مفهومی صحیح که نشان دهنده مکانیزم های موثر در انتقال واکنشی آلاینده های نفتی، توسعه پلوم آلودگی و همچنین واکنش های هیدروژئوشیمیایی درگیر باشد، طراحی گردید. سپس انتقال واکنشی چند مولفه ای و چند فازي هیدروکربن های نفتی در سیستم جریان آب زیر زمینی منطقه اشباع شده ناحیه صنعتی ری با استفاده از نرم افزار تجاری چند منظوره PHOENICS به صورت دو بعدی مدل گردید. این نرم افزار م معادلات مدل را بر اساس روش عددی حجم های محدود حل می کند. برای مدل سازی عبارات غیر خطی معادلات دیفرانسیل حاکم در نرم افزار PHOENICS، کدنویسی های لازم به زبان PIL (زبان ورودی نرم افزار) در فایل Q1 و با مراجعه به زیر برنامه GROUND و انجام کدنویسی دیگر به زبان FORTRAN 99 برای تمام محاسبات غیر استاندارد برای این نرم افزار انجام شد. در ابتدا، صحت نتایج مدل عددی به وسیله مقایسه نتایج مدل عددی با حل های تحلیلی برای سیستم های ساده و فرآیندهای منفرد و نتایج

حاصل از سناریوهای مدل شده توسط سایر محققین برای سیستم‌های پیچیده تأیید و اعتبارسنجی گردید. با توجه به صحت و تطابق خوب نتایج حاصل از مدل سازی انجام شده در این تحقیق، مدل برای پیش‌بینی انتقال واکنشی چند مولفه ای و چند فاز آلاینده های هیدروکربنی در منطقه مورد مطالعه بسط داده شد. برای کالیبراسیون مدل طراحی شده، نتایج آن با داده‌های صحرایی پس از ۳۶ سال از آغاز نشت مقایسه گردید که حاکی از انطباق خوب نتایج با داده‌های صحرایی بود. سپس مدل برای پیش‌بینی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی تحت سناریوهای مختلف بعد از گذشت ۱۵ سال از اتمام عملیات صحرایی اجرا گردید. از ویژگی های مهم مدل حاضر در نظر گرفتن منبع تولید آلودگی متغیر، جذب خطی و واکنش سینتیکی موند، میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر علاوه بر فرآیندهای فیزیکی انتقال می باشد.

برای ارزیابی عدم قطعیت های مدل طراحی شده در این تحقیق از روش تحلیل حساسیت استفاده گردید. برای ملاحظه پاسخ مدل به تغییرات در مقادیر پارامترهای استفاده شده برای مدل سازی، حساسیت مدل به تغییرات در ضریب پراکندگی، ضریب توزیع، پارامترهای مربوط به مدل های سینتیکی موند، میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر بر روی پلوم آلاینده ها با انجام چندین شبیه سازی بررسی گردید. تحلیل حساسیت نشان می دهد که مدل نسبت به تغییرات در ضریب پراکندگی، ضریب توزیع، پارامترهای مربوط به مدل های سینتیکی میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر حساس، اما نسبت به تغییرات پارامترهای مربوط به مدل سینتیکی موند غیر حساس است. در نتیجه حذف فاز آزاد NAPL بعد از ۴۲ سال، تغییرات چشمگیری در توزیع غلظت فاز محلول هیدروکربن های نفتی ایجاد می گردد. اما سفره آب زیرزمینی هنوز آلوده است و برای پاک سازی فاز محلول آلودگی، باید یک روش به سازی مناسب و مقرون به صرفه مثل روش به سازی بیولوژیکی با توجه به شرایط منطقه طراحی شود.

به طور کلی، نتایج به دست آمده از چنین مطالعاتی می تواند جهت پایش مناطق آلوده و در طراحی روش هایی جهت کنترل انتقال آلودگی و به حداقل رساندن اثرات مخرب زیست محیطی آن در سیستم های آبخانه ای مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی -مدلسازی عددی -سفره آب زیرزمینی -انتقال واکنشی چند مولفه ای و چند فازی -آلاینده های نفتی -مدل های سه ینتیکی تجزیه بیولوژیکی - جذب خطی - تحلیل حساسیت - به سازی بیولوژیکی.

لیست مقالات منتشر شده از رساله دکتری

مقالات چاپ شده در کنفرانس‌های ملی:

- آزاده آگاه‌فرامرز دولتی ارده جانی، حسین قریشی، ۱۳۸۹ مدل سازی عددی انتقال واکنشی آلودگی در زون اشباع شده یک سفره آزاد، چهارمین همایش تخصصی مهندسی محیط‌زیست.
- آزاده آگاه‌فرامرز دولتی ارده‌جانی، حسین قریشی، ۱۳۸۹ استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در مدل‌سازی دو بعدی فرآیند جذب غیرخطی در انتقال آلاینده‌ها از طریق محیط‌های متخلخل اشباع شده، چهارمین همایش تخصصی مهندسی محیط‌زیست.

مقالات ژورنالی پذیرفته شده:

- **Azadeh Agah**, Faramarz Doulati Ardejani, Hossein Ghoreishi, 2011, Two-dimensional numerical finite volume modeling of processes controlling distribution and natural attenuation of BTX in the saturated zone of a simulated semi-confined aquifer, Arabian Journal of Geosciences.
- **Azadeh Agah**, Faramarz Doulati Ardejani, Hossein Ghoreishi, 2012, An assessment of factor affecting reactive transport of biodegradable BTEX in an unconfined aquifer system, Tehran, Iran, International journal of mining and geo-engineering.

فهرست مطالب

فصل اول: مشکلات ناشی از حضور هیدروکربن ها در سفره های آب زیرزمینی و مروری بر

مطالعات پیشین

- ۱-۱. مقدمه ۲
- ۲-۱. تعریف سفره آب زیرزمینی ۳
- ۳-۱. انواع سفره آب زیرزمینی ۴
 - ۱-۳-۱. سفره های نامحبوس یا آزاد ۴
 - ۲-۳-۱. سفره های محبوس ۵
 - ۳-۳-۱. سفره های معلق یا سوار ۶
 - ۴-۳-۱. سفره های نشتی یا نیمه محبوس ۶
- ۴-۱. منابع بالقوه آلاینده های آلی ۷
- ۵-۱. انواع آلاینده های آلی ۸
- ۶-۱. تعریف NAPL ۹
 - ۷-۱. ویژگی های فیزیکوشیمیایی آلاینده های آلی معمول (هیدروکربن های نفتی (LNAPLs) و حلال ها (DNAPLs) ۱۱
 - ۱-۷-۱. مایعات فاز غیر آبی سبک (LNAPLs) ۱۲
 - ۲-۷-۱. مایعات فاز غیر آبی سنگین (DNAPLs) ۱۳
- ۸-۱. مشخصات آلاینده های آلی ۱۳

۹-۱. توصیف اثرات ممکن نشت آلاینده‌ها.....	۱۵
۱۰-۱. ریسک‌های بالقوه همراه با اتانول، MTBE و دیگر ترکیبات گازوئیل در آب های	
زیرزمینی.....	۱۷
۱-۱. مروری بر تحقیقات و مطالعات انجام گرفته جهت مدل سازی تحول و انتقال هیدروکربن های	
نفی در آب‌های زیرزمینی.....	۱۹
۱۲-۱. ضرورت انجام تحقیق و طرح موضوع رساله.....	۴۷
۱۳-۱. اهداف تحقیق.....	۵۰
۱۴-۱. سازماندهی رساله.....	۵۱

فصل دوم: فرآیندهای مؤثر در انتقال و تمول هیدروکربن‌ها در سفره‌های آب زیرزمینی و

روابط ریاضی آن‌ها

۱-۲. مقدمه.....	۵۵
۲-۲. بیان مسأله.....	۵۸
۳-۲. فرآیندها.....	۶۲
۱-۳-۲. انحلال NAPL (منبع آلودگی).....	۶۲
۲-۳-۲. پهنرفت و پراکندگی هیدرودینامیکی.....	۶۵
۳-۳-۲. جذب.....	۶۷
۴-۳-۲. تبخیر.....	۷۰
۵-۳-۲. تجزیه بیولوژیکی.....	۷۳
۴-۲. مدل سازی عددی.....	۸۸
۵-۲. معادلات جزءبندی تعادلی چندفازی ترکیبات هیدروکربن‌های نفی.....	۹۴
۶-۲. معادله انتقال LNAPL بر روی سطح آب زیرزمینی.....	۹۷

- ۷-۲. معادله انتقال آلاینده‌های محلول در آب زیرزمینی ۹۹
- ۸-۲. معادله انتقال آلاینده‌های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع ۹۹
- ۹-۲. مدل انتقال و تجزیه بیولوژیکی دو بعدی ارائه شده توسط چویی و همکاران (۲۰۰۹) ۱۰۱

فصل سوم: دینامیک سیالات محاسباتی و معرفی ابزار آن

- ۱-۳. مقدمه ۱۰۴
- ۲-۳. دینامیک سیالات محاسباتی و نرم‌افزار PHOENICS ۱۰۴
- ۱-۲-۳. عملیات اصلی PHOENICS ۱۰۵
- ۲-۲-۳. ساختار PHOENICS ۱۰۷
- ۳-۲-۳. چگونه در PHOENICS مسأله تعریف می‌گردد؟ ۱۰۷
- ۴-۲-۳. چگونه PHOENICS پیش‌بینی می‌کند؟ ۱۰۹
- ۵-۲-۳. PHOENICS چگونه نتایج را نمایش می‌دهد؟ ۱۱۰
- ۶-۲-۳. روش حل ۱۱۱
- ۷-۲-۳. PHOENICS مازول‌های ۱۱۱
- ۱-۷-۲-۳. SATELITE ۱۱۱
- ۲-۷-۲-۳. EARTH ۱۱۲
- ۳-۷-۲-۳. GROUND ۱۱۵
- ۴-۷-۲-۳. VR VIEWER ۱۱۶
- ۵-۷-۲-۳. PHOTON ۱۱۶
- ۶-۷-۲-۳. AUTO PLOT ۱۱۷
- ۸-۲-۳. معادله حاکم بر PHOENICS ۱۱۸

فصل چهارم: تأیید، اعتبارسنجی و کالیبراسیون مدل

- ۱-۴. مقدمه ۱۲۲
- ۲-۴. تأیید مدل با استفاده از راه حل های تحلیلی ۱۲۴
- ۱-۲-۴. مدل سازی یک بعدی فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت، جذب خطی و تخریب مرتبه اول ۱۲۴
- ۳-۴. تأیید مدل با استفاده از حالت های مدل شده به وسیله سایر محققین ۱۲۹
- ۱-۳-۴. حالت اول: شبیه سازی عددی حرکت آلاینده در سیستم جریان پایای آب زیرزمینی ۱۲۹
- ۲-۳-۴. حالت دوم: شبیه سازی تجزیه بیولوژیکی و انتقال بنزن، تلوئن و زایلن در یک سفره
- شبیه سازی شده، مقایسه نتایج مدل شده و آزمایشگاهی ۱۳۶
- ۳-۳-۴. حالت سوم: روشی سینتیکی برای شبیه سازی فرآیندهای تجزیه بیولوژیکی حاشیه و
- هسلقه کنترل شده به وسیله اکسیداسیون و احیاء در آب زیرزمینی: توسعه مدل و به کارگیری
- آن برای یک سایت لندفیل در پیدمونت ایتالیا ۱۴۵
- ۴-۳-۴. حالت چهارم: حل تحلیلی انتقال واکنشی چندین آلاینده فرار در منطقه هوادار ۱۶۱

فصل پنجم: مطالعات صحرایی انجام شده در کل نامیه صنعتی ری

- ۱-۵. مقدمه ۱۶۶
- ۲-۵. مروری بر تاریخچه مطالعات انجام شده در کل ناحیه صنعتی ری ۱۶۸
- ۳-۵. زمین شناسی و توپوگرافی ۱۷۱
- ۴-۵. چینه شناسی ۱۷۳
- ۵-۵. آب های زیرزمینی ۱۷۴
- ۶-۵. سیستم های تأمین آب در ناحیه سایت شرکت پالایش نفت تهران و نواحی مجاور آن ۱۸۰
- ۱-۶-۵. قنات ۱۸۰
- ۲-۶-۵. چاه های آب ۱۸۰

- ۱۸۱ ۳-۶-۵. چاه‌های حفاظت الکترولیتی
- ۱۸۱ ۷-۵. بررسی آلودگی آب در خارج سایت شرکت پالایش نفت تهران
- ۱۸۲ ۱-۷-۵. آلودگی در قنات
- ۱۸۲ ۱-۱-۷-۵. قنات درسان آباد
- ۱۸۳ ۲-۱-۷-۵. قنات کوچک و بزرگ قمصر
- ۱۸۳ ۵-۱-۷-۵. قنات بی بی مریم
- ۱۸۴ ۴-۱-۷-۵. قنات دهنو
- ۱۸۴ ۵-۱-۷-۵. قنات ده خیر
- ۱۸۴ ۶-۱-۷-۵. قنات مفتان
- ۱۸۴ ۷-۱-۷-۵. قنات عظیم آباد
- ۱۸۵ ۲-۷-۵. چاه‌های آب
- ۱۸۵ ۸-۵. بررسی آلودگی آب در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران
- ۱۸۵ ۱-۸-۵. قنات درسان آباد
- ۱۸۶ ۲-۸-۵. چاه‌های آب برای آبیاری
- ۱۸۶ ۳-۸-۵. چاه‌های حفاظت الکترولیتی
- ۱۸۷ ۴-۸-۵. نشت نفت در واحدهای شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ
- ۱۹۲ ۹-۵. بررسی عمق نفت در تأسیسات موجود
- ۱۹۲ ۱-۹-۵. اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های قنات
- ۱۹۴ ۲-۹-۵. اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های حفاظت الکترولیتی
- ۱۹۵ ۳-۹-۵. اندازه‌گیری تجمع گاز خاک در عمق ۴ متر
- ۲۰۰ ۴-۹-۵. اندازه‌گیری تجمع گاز خاک با روش Headspace
- ۲۰۱ ۵-۹-۵. نصب چاه‌های نظارتی سطح آب زیرزمینی

۲۰۳	 تخمین مقدار آلودگی نفت در خاک
۲۰۷	 فرض منبع آلودگی
۲۰۷	 ۱-۱۱-۵. آلاینده‌های نفتی
۲۰۸	 ۲-۱۱-۵. یافتن منبع آلودگی
۲۰۸	 ۱-۲-۱۱-۵. یافتن منبع آلودگی در ناحیه صنعتی ری
۲۰۹	 ۲-۲-۱۱-۵. یافتن منبع آلودگی در ناحیه صنعتی ری و شرکت پالایش نفت تهران
۲۱۰	 ۱۳-۵. جمع‌بندی نتایج مطالعات صحرایی
۲۱۰	 ۱-۱۳-۵. ویژگی‌های آلاینده
۲۱۱	 ۲-۱۲-۵. فرض محدوده آلودگی
۲۱۱	 ۱-۲-۱۲-۵. محدوده آلودگی تخمین زده شده از تجزیه آب زیرزمینی
۲۱۱	 ۲-۲-۱۲-۵. محدوده آلودگی تخمین زده شده از اندازه‌گیری گاز خاک
۲۱۱	 ۳-۲-۱۲-۵. محدوده آلودگی تخمین زده شده از آنالیز محتوی نفت خاک
۲۱۴	 ۴-۲-۱۲-۵. محدوده تخمین زده شده آلودگی با اندازه‌گیری ضخامت لایه نفت
۲۱۵	 ۵-۲-۱۲-۵. محدوده حدس زده شده آلودگی از طریق پرسش از ساکنین محلی

فصل ششم: مدل سازی عددی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در آبخوان تهران در کل

نامیه صنعتی ری

۲۱۹	 ۱-۶. مقدمه
۲۲۰	 ۲-۶. مدل سازی انتقال واکنشی گازوئیل در منطقه ایستگاه پمپاژ شرکت پالایش نفت تهران
۲۲۰	 ۱-۲-۶. تنظیم مدل و داده‌های ورودی
۲۲۵	 ۲-۲-۶. نتایج شبیه‌سازی دو بعدی

- ۱-۲-۲-۶. سناریو اول: مدل دوبعدی غیر واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی و
 ۲۲۵.....پهنرفت
- ۲-۲-۲-۶. سناریو دوم: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت،
 ۲۲۷.....جذب و تجزیه بیولوژیکی
- ۳-۲-۲-۶. سناریو سوم: مدل دو بعدی واکنشی با فرض این که بعد از ۳۶ سال منابع
 ۲۳۵.....آلودگی از سطح زمین رفع می گردد
- ۴-۲-۲-۶. سناریو چهارم: علاوه بر حذف منابع آلودگی در سطح زمین بعد از ۳۶ سال،
 ۲۳۶.....خاک آلوده نیز پاکسازی می گردد
- ۳-۲-۶. تحلیل حساسیت.....
 ۲۳۸.....
- ۱-۳-۲-۶. شبیه سازی اول: تحلیل حساسیت بر روی ضریب پراکندگی.....
 ۲۳۸.....
- ۲-۳-۲-۶. شبیه سازی دوم: آنالیز حساسیت بر روی ضریب توزیع.....
 ۲۳۹.....
- ۳-۳-۲-۶. شبیه سازی سوم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک موند.....
 ۲۴۰.....
- ۴-۳-۲-۶. شبیه سازی چهارم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک
 ۲۴۳.....میکائیل - منتن
- ۵-۳-۲-۶. شبیه سازی پنجم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک مرتبه
 ۲۴۴.....اول
- ۶-۳-۲-۶. شبیه سازی ششم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک مرتبه
 ۲۴۶.....صفر
- ۳-۶. مدل سازی انتقال واکنشی چند فازی هیدروکربن های نفتی در ناحیه صنعتی ری.....
 ۲۴۸.....
- ۱-۳-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی.....
 ۲۴۸.....
- ۲-۳-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی.....
 ۲۴۹.....

۱-۲-۳-۶. سناریو اول: مدل سازی دو بعدی ضخامت لنز LNAPL بر روی سطح آب	
زیرزمینی.....	۲۴۹
۲-۲-۳-۶. سناریو دوم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول در	
آب زیرزمینی.....	۲۵۲
۳-۲-۳-۶. سناریو سوم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول با	
در نظر گرفتن کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله پمپاژ	
آن.....	۲۵۴
۴-۲-۳-۶. سناریو چهارم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول در	
آب زیرزمینی با در نظر گرفتن این که پلوم فاز آزاد بر روی آب بعد از ۴۲ سال کاملاً	
رفع می شود.....	۲۵۵
۵-۲-۳-۶. سناریو پنجم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر	
شده در منطقه غیر اشباع.....	۲۵۶
۶-۲-۳-۶. سناریو ششم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر	
شده در منطقه غیر اشباع با در نظر گرفتن کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب	
زیرزمینی به وسیله پمپاژ آن.....	۲۵۸
۷-۲-۳-۶. سناریو هفتم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های فرار منطقه	
غیر اشباع با این فرض که پلوم فاز آزاد بر روی آب بعد از ۴۲ سال کاملاً رفع می شود.....	۲۵۸
۸-۲-۳-۶. سناریو هشتم: محاسبه توزیع LNAPL در فازهای مختلف.....	۲۵۸
۴-۶. مدل سازی تجزیه هیدروکربن های نفتی به وسیله میکروارگانیسم های بومی منطقه تحت شرایط	
احیای نیترات (نیترات زدایی).....	۲۶۰
۱-۴-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی.....	۲۶۰
۲-۴-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی.....	۲۶۲

۱-۲-۴-۶. سناریو اول: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت،

جذب و تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط نیتراژ زدایی با فرض این که بعد از ۳۶ سال

۲۶۲ منابع آلودگی از سطح زمین رفع می گردد

۲-۲-۴-۶. سناریو دوم: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت،

جذب و تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط نیتراژ زدایی با فرض این که بعد از ۳۶ سال

منابع آلودگی از سطح زمین رفع می گردد علاوه بر آن، خاک آلوده نیز پاک سازی

۲۷۱ گردد

۵-۶. مدل سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی در کل

۲۷۶ ناحیه صنعتی ری با فرض عملیات پمپاژ بعد از ۳۶ سال

۲۷۶ ۱-۵-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی

۲۷۷ ۲-۵-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی

۲۸۰ ۶-۶. مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی توسط سیستم قنوات

۲۸۰ ۱-۶-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی

۲۸۱ ۲-۶-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی

۷-۶. مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع در کل

۲۸۴ ناحیه صنعتی ری

۲۸۴ ۱-۷-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی

۲۸۵ ۲-۷-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی

فصل هفتم: جمع بندی، نتیجه گیری و پیشنهادات

۲۸۹ ۱-۷. مقدمه

۲-۷. جمع بندی نتایج مربوط به مدل سازی انتقال واکنشی گازوئیل در منطقه ایستگاه پمپاژ شرکت	
پالایش نفت تهران.....	۲۹۲
۳-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی انتقال واکنشی چند فازي هیدروکربن های نفتی در ناحیه	
صنعتی ری.....	۲۹۵
۴-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی تجزیه هیدروکربن های نفتی به وسیله میکروارگانسیم های	
بومی منطقه تحت شرایط احیای نیترات (نیترات زدایی).....	۲۹۷
۵-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح	
آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری با فرض عملیات پمپاژ بعد از ۳۶ سال.....	۲۹۹
۶-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی توسط سیستم	
قنوات.....	۳۰۰
۷-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در	
منطقه غیر اشباع در کل ناحیه صنعتی ری.....	۳۰۰
۸-۷. توانایی های مدل سازی انتقال واکنشی چند مولفه ای و چند فازي هیدروکربن های نفتی با	
استفاده از روش حجم های محدود در نرم افزار PHOENICS.....	۳۰۱
۹-۷. پیشنهادات برای تحقیقات آینده.....	۳۰۲
۱۰-۷. روش های پیشنهادی برای پاک سازی ناحیه صنعتی ری از آلودگی های نفتی.....	۳۰۴

فهرست منابع

فهرست منابع.....	۳۰۸
پیوست الف.....	۳۲۵
پیوست ب.....	۳۷۵

فهرست اشکال

فصل اول: مشکلات ناشی از حضور هیدروکربن ها در سفره های آب زیرزمینی و مروری بر

مطالعات پیشین

- شکل (۱-۱): مقطع عرضی شماتیک سفره های نامحبوس و محبوس ۵
- شکل (۲-۱): طرح شماتیک سفره های معلق ۶
- شکل (۳-۱): طرح شماتیک سفره های نشستی یا نیمه محبوس ۷
- شکل (۴-۱): رفتار LNAPL و DNAPL در محیط زیر سطحی ۹
- شکل (۵-۱): طرح شماتیک انتقال و تحول DNAPL و LNAPL در محیط زیر سطحی ۱۰
- شکل (۶-۱): نمایش شماتیک پراکندگی نفت در محیط متخلخل ۱۵
- شکل (۷-۱): ساختار عمودی نشت NAPL با حجم کوچک ریزش ۱۶
- شکل (۸-۱): فرآیندهای عمومی کنترل کننده تحول گازوئیل در زیر سطح ۱۸
- شکل (۹-۱): فلوجارت مطالعات هیدرولوژیکی زیست محیطی پالایشگاه نفت تهران ۵۲

فصل دوم: فرآیندهای مؤثر در انتقال و تمول هیدروکربن ها در سفره های آب زیرزمینی و

روابط ریاضی آن ها

- شکل (۱-۲): مدل مفهومی ارائه شده برای یک سناریو نشت هیدروکربن ها به محیط زیر سطحی ۵۶
- شکل (۲-۲): مقطع عرضی منطقه اطراف محل نشت NAPL در حالت سطح ایستایی ساکن :
۱ منطقه هوادار مستقیم زیر محل نشت . ۲ منطقه محصول آزاد (متحرک) و محصول باقی مانده .

مطابقه هوادار مستقيما بالاي محصول آزاد / باقي مانده جاشيه واكنشي اطراف پلوم حل شده .

۵. هسته غير هوازي پلوم حل شده. ۶. انتهاي پلوم حل شده ۵۷

شكل (۲-۳): مدل مفهومي پيشنهادي براي نشت آلايندهاي هيدروكربني در آبخوان شركت پالايش

نفت تهران ۵۸

شكل (۲-۴): طرح شماتيك انحلال NAPL در محيط متخلخل در چندين مقياس مشاهده‌اي ۶۳

فصل سوم: ديناميك سيالات مماسباتي و معرفي ابزار آن

شكل (۳-۱): فلوچارت انجام فازهاي اصلي در آناليزهاي CFD ۱۱۳

شكل (۳-۲): مراحل حل مسأله توسط نرم‌افزار PHOENICS ۱۱۴

شكل (۳-۳): يك نمونه از تصوير نمايشگر همگرابي EARTH ۱۱۵

شكل (۳-۴): يك نمونه از نمودار VR VIEWER ۱۱۶

شكل (۳-۵): يك نمونه از نمودار PHOTON ۱۱۸

شكل (۳-۶): يك نمونه از تصوير AUTO PLOT ۱۱۸

فصل چهارم: تأييد، اعتبارسنجي و كالبراسيون مدل

شكل (۴-۱): مقايسه نتايج مدل سازي عددي (خطوط) و حل تحليلي (نقاط) انتقال جسم محلول در

محيط متخلخل به صورت تابعي از ضريب پراكندگي و به ازاي زمان ۱ سال ۱۲۵

شكل (۴-۲): مقايسه نتايج مدل سازي عددي (خطوط) و حل تحليلي (نقاط) انتقال جسم محلول در

محيط متخلخل به صورت تابعي از ضريب پراكندگي و به ازاي زمان ۴ سال ۱۲۵

شكل (۴-۳): مقايسه نتايج مدل سازي عددي (خطوط) و تحليلي (نقاط) براي بررسي فرآيند پراكندگي

در انتقال جسم محلول در محيط متخلخل به صورت تابعي از زمان و به ازاي ضريب پراكندگي

10^{-7} متر مربع بر ثانيه ۱۲۶

شکل (۴-۴): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی

در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از زمان و به ازای ضریب پراکندگی

۱۲۶ 1×10^{-9} متر مربع بر ثانیه

شکل (۴-۵): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی

و پهنرفت در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از زمان و به ازای ضریب

پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه و سرعت 1×10^{-7} متر بر ثانیه ۱۲۷

شکل (۴-۶): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیندهای

پراکندگی، پهنرفت و جذب خطی در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از

ضریب جذب و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه، سرعت 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه

و زمان ۱ سال ۱۲۸

شکل (۴-۷): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند

پراکندگی و تخریب مرتبه اول در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از ثابت

سینتیک و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه و زمان ۱ سال ۱۲۹

شکل (۴-۸): دامنه مدل استفاده شده برای شبیه سازی ۱۳۰

شکل (۴-۹): غلظت آلاینده برای مدت زمان ۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با

۱۳۱ $\alpha_L = \alpha_T = 0.5 m$

شکل (۴-۱۰): غلظت آلاینده برای مدت زمان ۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با

۱۳۱ $\alpha_L = \alpha_T = 1 m$

شکل (۴-۱۱): غلظت آلاینده برای مدت زمان ۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با

۱۳۱ $\alpha_L = \alpha_T = 5 m$

شکل (۴-۱۲): غلظت آلاینده برای مدت زمان ۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با

۱۳۱ $\alpha_L = \alpha_T = 10 m$

شکل (۴-۱۳) توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان به ازای ضریب پراکندگی برابر با

۱۳۱ $\alpha_L = \alpha_T = 100 m$

شکل (۴-۱۴): منبع تولید آلاینده با غلظت متغیر با زمان ۱۳۲

شکل (۴-۱۵): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و $\alpha_T = 0.5 m$ برای مدت زمان ۲۰ سال ۱۳۲

شکل (۴-۱۶): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و $\alpha_T = 0.5 m$ برای مدت زمان ۳۵ سال ۱۳۳

شکل (۴-۱۷): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و $\alpha_T = 0.5 m$ برای مدت زمان ۵۰ سال ۱۳۳

شکل (۴-۱۸) تغییر مقدار ضریب توزیع $K_d = 0$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و

۱۳۳ $\alpha_T = 0.5 m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$

شکل (۴-۱۹) تغییر مقدار ضریب توزیع $K_d = 0.01$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و

۱۳۳ $\alpha_T = 0.5 m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$

شکل (۴-۲۰) تغییر مقدار ضریب توزیع $K_d = 0.1$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و

۱۳۴ $\alpha_T = 0.5 m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$

شکل (۴-۲۱) تغییر مقدار ضریب توزیع $K_d = 1$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و

۱۳۴ $\alpha_T = 0.5 m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$

شکل (۴-۲۲) تغییر مقدار ضریب توزیع $K_d = 10$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10 m$ و

۱۳۴ $\alpha_T = 0.5 m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$

شکل (۴-۲۳): مقایسه نتایج مدل سازی حجهای محدود حاضر (خطوط) نتایج به دست آمده

توسط مدل اجزاء محدود پیکنز و لنوکس (نقاط) برای انتقال آلودگی بر روی مقاطع AB, CD, EF,

GH, IJ, KL, MN, OP مشخص شده روی شکل های (۴-۱۰) تا (۴-۱۴) و شکل های (۴-۱۶)

تا (۴-۱۸) ۱۳۵

- شکل (۴-۲۴): مقایسه نتایج مدل سازی حجهای محدود حاضر (خطوط) نتایج به دست آمده توسط مدل اجزاء محدود پیکنز و لنوکس (نقاط) بوی انتقال آلودگی بر روی مقاطع QR, ST, UV, XY مشخص شده روی شکل های (۴-۱۹) تا (۴-۲۳) ۱۳۵
- شکل (۴-۲۵): شکل شماتیک سفره نیمه محدود شبیه سازی شده ۱۳۷
- شکل (۴-۲۶): نمای از بالای سفره شبیه سازی شده و موقعیت چاه های نمونه برداری در آن ۱۳۷
- شکل (۴-۲۷): منحنی های رخنه ای بنزن، تلون و زایلن در چاه شماره (۸) قبل از تزریق توده باکتری (FEM مدل اجزای محدود، EXP نتایج آزمایشگاهی، FVM مدل حجم های محدود) ۱۳۸
- شکل مقایسه کالیبراسیون بدست آمده برای تجزیه بیولوژیکی بنزن، تلون و زایلن به وسیله داده های آزمایشگاهی و مدل سازی اجزای محدود و حجم های محدود در چاه های شماره (۲)، (۵)، (۸) و (۱۱) ۱۴۴
- شکل (۴-۲۹): مدل مفهومی برای منطقه بندی اکسیداسیون و احیاء در آب ۱۴۶
- شکل (۴-۳۰): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل اختلاف محدود رول و همکاران (نقاط) برای تجزیه بیولوژیکی در سیستم پیوسته ۱۴۹
- شکل (۴-۳۱): مقایسه نتایج مدل سازی PHOENICS (خطوط) نتایج به دست آمده توسط مدل اختلاف محدود رول و همکاران (نقاط) برای تجزیه بیولوژیکی در سیستم پیوسته ۱۴۹
- شکل (۴-۳۲): هندسه و شرایط مرزی برای مدل دو بعدی ۱۵۰
- شکل (۴-۳۳): توزیع غلظت متانال (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۲
- شکل (۴-۳۴): توزیع غلظت اکسیژن (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۲
- شکل (۴-۳۵): توزیع غلظت نیترات (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۳
- شکل (۴-۳۶): توزیع غلظت اکسید منگنز (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۳
- شکل (۴-۳۷): توزیع غلظت یون منگنز (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۴
- شکل (۴-۳۸): توزیع غلظت هیدرو اکسید آهن (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۴

شکل (۴-۳۹): توزیع غلظت یون آهن (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۵

شکل (۴-۴۰): توزیع غلظت سولفات (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۵

شکل (۴-۴۱): توزیع غلظت متان (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۶

شکل (۴-۴۲): توزیع غلظت ماده ردیاب (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۶

شکل (۴-۴۳): نرخ واکنش تجزیه هوازی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۷

شکل (۴-۴۴): نرخ واکنش نیترات زدایی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۷

شکل (۴-۴۵): نرخ واکنش احیای منگنز (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۸

شکل (۴-۴۶): نرخ واکنش احیای آهن (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۸

شکل (۴-۴۷): نرخ واکنش احیای سولفات (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۹

شکل (۴-۴۸): نرخ واکنش متان زایی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز ۱۵۹

شکل (۴-۴۹): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) نتایج به دست آمده توسط

مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) برای پروفیلی غلظت چهار گونه در فاز مایع بعد از گذشت

۲۰۰ روز ۱۶۳

شکل (۴-۵۰): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) نتایج به دست آمده توسط

مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) برای پروفیلی غلظت چهار گونه در فاز گاز بعد از گذشت

۲۰۰ روز ۱۶۳

شکل (۴-۵۱): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) نتایج به دست آمده توسط

مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) برای پروفیلی غلظت کلی چهار گونه بعد از گذشت

۲۰۰ روز ۱۶۴

فصل پنجم: مطالعات صمرايي انجام شده در کل ناحیه صنعتی ری

شکل (۵-۱): نقشه اطراف ناحیه صنعتی ری ۱۶۹

- شکل (۵-۲): موقعیت جغرافیایی منطقه مورد بررسی ۱۷۰
- شکل (۵-۳): نقشه زمین‌شناسی منطقه مورد بررسی ۱۷۲
- شکل (۵-۴): موقعیت پروفیل خاک موجود برای بررسی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران ۱۷۴
- شکل (۵-۵): پروفیل خاک 1-1' ۱۷۵
- شکل (۵-۶): پروفیل خاک 5-5' ۱۷۵
- شکل (۵-۷): نقشه موقعیت پروفیل‌های زمین‌شناسی در ناحیه صنعتی ری ۱۷۶
- شکل (۵-۸): پروفیل زمین‌شناسی CB3-CB5 در ناحیه صنعتی ری ۱۷۶
- شکل (۵-۹): پروفیل زمین‌شناسی CB1-CB4 در ناحیه صنعتی ری ۱۷۷
- شکل (۵-۱۰): موقعیت گمانه حفاری P-CB در ناحیه ایستگاه پمپاژ ۱۷۸
- شکل (۵-۱۱): پروفیل زمین‌شناسی در محل گمانه حفاری P-CB ایستگاه پمپاژ ۱۷۸
- شکل (۵-۱۲): نقشه سطح آب زیرزمینی اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران ۱۷۹
- شکل (۵-۱۳): موقعیت قنات‌های اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران ۱۸۱
- شکل (۵-۱۴): نشت نفت از جریان سنج‌ها و شیرهای کنترل ۱۸۷
- شکل (۵-۱۵): نشت نفت نزدیک کف تانک ۱۸۸
- شکل (۵-۱۶): نشت نفت از خط لوله جاسازی شده ۱۸۸
- شکل (۵-۱۷): شرایط فعلی نقاط آلودگی در ناحیه صنعتی ری ۱۸۹
- شکل (۵-۱۸): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۱) ۱۸۹
- شکل (۵-۱۹): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۲) ۱۹۰
- شکل (۵-۲۰): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۳) ۱۹۰
- شکل (۵-۲۱): پیت زهکشی (نقطه ۴) ۱۹۰
- شکل (۵-۲۲): پیت زهکشی (نقطه ۵) ۱۹۰

- شکل (۵-۲۳): موقعیت نشت نفت در اطراف یک خط لوله زیرزمینی در ایستگاه پمپاژ ۱۹۱
- شکل (۵-۲۴): نتایج اندازه گیری عمق نفت در چاه های قنات در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (اردیبهشت ۱۳۷۴) ۱۹۳
- شکل (۵-۲۵): نتایج اندازه گیری عمق نفت در چاه های قنات در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (فروردین ۱۳۸۲) ۱۹۴
- شکل (۵-۲۶): نتایج اندازه گیری عمق نفت در چاه های حفاظت الکترولیتی داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران ۱۹۶
- شکل (۵-۲۷): ماشین گمانه زنی وارد شده از ژاپن ۱۹۷
- شکل (۵-۲۸): روند گمانه زنی برای نمونه برداری گاز خاک ۱۹۷
- شکل (۵-۲۹): گمانه زنی آزمایشی به وسیله دست ۱۹۷
- شکل (۵-۳۰): نصب ماشین گمانه زنی ۱۹۷
- شکل (۵-۳۱): گمانه زنی به وسیله ماشین ۱۹۷
- شکل (۵-۳۲): جاسازی یک لوله جدار ۱۹۷
- شکل (۵-۳۳): توزیع تجمع گازی مواد آلی فرار در عمق ۴ متری در ناحیه شرکت پالایش نفت تهران، ۷ شرکت در ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ ۲۰۰
- شکل (۵-۳۴): روش Headspace ۲۰۱
- شکل (۵-۳۵): طرح شماتیک اندازه گیری روش Headspace ۲۰۱
- شکل (۵-۳۶): شرایط نمونه گیری ۲۰۱
- شکل (۵-۳۷): موقعیت چاه های نظارتی در سایت شرکت پالایش نفت تهران ۲۰۲
- شکل (۵-۳۸): موقعیت چاه های نظارتی در ناحیه صنعتی ری ۲۰۲
- شکل (۵-۳۹): موقعیت چاه نظارتی P_MW در ناحیه ایستگاه پمپاژ ۲۰۲
- شکل (۵-۴۰): روش نمونه گیری از چال نمونه برداری خاک و ذخیره نمونه ۲۰۳

- شکل (۵-۴۱): وسعت آلودگی در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری..... ۲۰۶
- شکل (۵-۴۲): وسعت آلودگی در ناحیه ایستگاه پمپاژ..... ۲۰۷
- شکل (۵-۴۳): نوع نفت محصول آزاد، شامل عناصر و ترکیبات اصلی مخازن..... ۲۱۰
- شکل (۵-۴۴): توزیع محتوی نفت در آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری..... ۲۱۲
- شکل (۵-۴۵): توزیع حداکثر مقدار تجمع مواد آلی فرار در کل ناحیه صنعتی ری..... ۲۱۳
- شکل (۵-۴۶): نواحی با شدت بالای آلودگی مشخص شده از نتایج اندازه گیری محتوی نفت خاک..... ۲۱۴
- شکل (۵-۴۷): توزیع حداکثر ضخامت لایه نفت در کل ناحیه صنعتی ری..... ۲۱۵
- شکل (۵-۴۸): ناحیه آلوده وسیع خاک و آب زیرزمینی به نفت..... ۲۱۶
- شکل (۵-۴۹): طرح شماتیک از گسترش آلودگی به وسیله قنات‌ها..... ۲۱۷

فصل ششم: مدل سازی عددی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در آبخوان تهران در کل

نامیه صنعتی ری

- شکل (۶-۱): منطقه ایستگاه پمپاژ..... ۲۲۰
- شکل (۶-۲): حوزه دوبعدی مدل استفاده شده برای شبیه سازی (مقطع عرضی A-B در
- شکل (۶-۱)..... ۲۲۱
- شکل (۶-۳): مقطع عرضی دو بعدی: (a) شبکه حجم محدود، (b) بردارهای سرعت..... ۲۲۱
- شکل (۶-۴): مقطع دو بعدی شبیه سازی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و
- زایلن تحت شرایط غیر واکنشی بعد از گذشت ۳۶ سال..... ۲۲۶
- شکل (۶-۵): مقطع دو بعدی شبیه سازی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و
- زایلن تحت شرایط غیر واکنشی بعد از گذشت ۵۰ سال..... ۲۲۶

شکل (۶-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت

اکسیژن و بیومس بعد از ۱۰ سال را نشان می دهند..... ۲۲۸

شکل (۷-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه سازی با روش میکائیل - منتن هستند..... ۲۲۹

شکل (۸-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه سازی با روش مرتبه اول هستند..... ۲۲۹

شکل (۹-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه سازی با روش مرتبه صفر هستند..... ۲۳۰

شکل (۱۰-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت

اکسیژن و بیومس بعد از ۳۶ سال را نشان می دهند..... ۲۳۱

شکل (۱۱-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت

اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می دهند..... ۲۳۲

شکل (۱۲-۶): مقایسه نتایج بدست آمده از سینتیک موند و داده های صحرایی در گمانه حفاری و چاه

نظارتی بعد از ۳۶ سال..... ۲۳۲

شکل (۱۳-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه سازی با سینتیک میکائیل - منتن..... ۲۳۳

شکل (۱۴-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه سازی با سینتیک مرتبه اول..... ۲۳۴

شکل (۶-۱۵): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه سازی با سینتیک مرتبه صفر ۲۳۴

شکل (۶-۱۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با روش موند هستند. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از

۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰

سال را نشان می دهند ۲۳۶

شکل (۶-۱۷): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و

زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با روش موند هستند. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از

۳۶ سال از سطح زمین حذف شده اند و خاک آلوده نیز پاکسازی گردید. (e) و (f) به ترتیب توزیع

غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می دهند ۲۳۷

شکل (۶-۱۸): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 0.5 m$ برای مدت زمان ۵۰

سال ۲۳۹

شکل (۶-۱۹): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 1 m$ برای مدت زمان ۵۰

سال ۲۳۹

شکل (۶-۲۰): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 2 m$ برای مدت زمان ۵۰

سال ۲۳۹

شکل (۶-۲۱): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 5 m$ برای مدت زمان ۵۰

سال ۲۳۹

شکل (۶-۲۲): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 15 m$ برای مدت زمان ۵۰

سال ۲۳۹

شکل (۶-۲۳): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع ۱/۳۴ برای مدت زمان ۵۰ سال ۲۴۰

شکل (۶-۲۴): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع ۴/۳۷ برای مدت زمان ۵۰ سال ۲۴۰

- شکل (۶-۲۵): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع $34/6$ برای مدت زمان ۵۰ سال ۲۴۰
- شکل (۶-۲۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با استفاده از روش موند با لحاظ اولین مجموعه پارامترها، هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می دهند ۲۴۱
- شکل (۶-۲۷): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با استفاده از روش موند با لحاظ دومین مجموعه پارامترها، هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می دهند ۲۴۲
- شکل (۶-۲۸): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با روش میکائیل - منتن با لحاظ اولین مجموعه پارامترها هستند ۲۴۴
- شکل (۶-۲۹): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی با روش میکائیل - منتن با لحاظ دومین مجموعه پارامترها هستند ۲۴۴
- شکل (۶-۳۰): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی به وسیله سینتیک مرتبه اول با دو برابر کردن ثابت مرتبه اول هستند ۲۴۵
- شکل (۶-۳۱): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی به وسیله سینتیک مرتبه اول با نصف کردن ثابت مرتبه اول هستند ۲۴۶
- شکل (۶-۳۲): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی به وسیله سینتیک مرتبه صفر با دو برابر کردن ثابت مرتبه صفر هستند ۲۴۷

- شکل (۳۳-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه سازی به وسیله سینتیک مرتبه صفر با نصف کردن ثابت مرتبه صفر هستند ۲۴۷
- شکل (۳۴-۶): مقطع عرضی دو بعدی: شبکه حجم محدود (محور عمودی ۴۰ برابر محور افقی است) ۲۴۸
- شکل (۳۵-۶): بردارهای سرعت ۲۴۹
- شکل (۳۶-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: ضخامت لنز LNAPL در مدت زمان ۳۶ سال ۲۵۱
- شکل (۳۷-۶): مقایسه نتایج بدست آمده از مدل حجم محدود با داده های صحرایی بعد از ۳۶ سال ۲۵۱
- شکل (۳۸-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۳۶ سال بدون در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی ۲۵۳
- شکل (۳۹-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۳۶ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی ۲۵۳
- شکل (۴۰-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال بدون در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی ۲۵۳
- شکل (۴۱-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی ۲۵۴
- شکل (۴۲-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، لایه نازکی از فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۵۰ سال باقی مانده است ۲۵۵
- شکل (۴۳-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی از روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۴۲ سال به طور کامل حذف شد ۲۵۶

شکل (۶-۴۴): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن های نفتی در مدت زمان

۳۶ سال ۲۵۷

شکل (۶-۴۵): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن های نفتی در مدت زمان

۵۰ سال ۲۵۷

شکل (۶-۴۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گازی در مدت زمان ۵۰ سال. در این

سناریو، یک لایه نازک از فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی از روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۵۰

سال باقی مانده است ۲۵۹

شکل (۶-۴۷): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گازی هیدروکربن های فرار در مدت زمان

۵۰ سال با لحاظ تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی از روی سطح

سفره آب زیرزمینی بعد از ۴۲ سال به طور کامل حذف گردید ۲۵۹

شکل (۶-۴۸): توزیع LNAPL در فازهای مختلف ۲۶۰

شکل (۶-۴۹): بردارهای سرعت آب زیرزمینی ۲۶۳

شکل (۶-۵۰): توزیع غلظت هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع

آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند ۲۶۴

شکل (۶-۵۱): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶

سال از سطح زمین حذف شدند ۲۶۵

شکل (۶-۵۲): توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی

بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند ۲۶۶

شکل (۶-۵۳): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال

از سطح زمین حذف شدند ۲۶۷

شکل (۶-۵۴): توزیع غلظت هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع

آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند ۲۶۸

- شکل (۵۵-۶): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند..... ۲۶۹
- شکل (۵۶-۶): توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند..... ۲۷۰
- شکل (۵۷-۶): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند..... ۲۷۱
- شکل (۵۸-۶): توزیع غلظت هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده اند و خاک آلوده نیز پاک سازی گردید..... ۲۷۳
- شکل (۵۹-۶): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده اند و خاک آلوده نیز پاک سازی گردید..... ۲۷۴
- شکل (۶۰-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده اند و خاک آلوده نیز پاک سازی گردید..... ۲۷۵
- شکل (۶۱-۶): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده اند و خاک آلوده نیز پاک سازی گردید..... ۲۷۶
- شکل (۶۲-۶): ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب بعد از ۳۶ سال..... ۲۷۹
- شکل (۶۳-۶): ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب بعد از ۵۰ سال..... ۲۸۰
- شکل (۶۴-۶): بردارهای سرعت قنوات..... ۲۸۲
- شکل (۶۵-۶): توزیع غلظت هیدروکربن های نفتی بعد از ۳۶ سال..... ۲۸۳
- شکل (۶۶-۶): توزیع غلظت هیدروکربن های نفتی بعد از ۵۰ سال..... ۲۸۴
- شکل (۶۷-۶): توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۳۶ سال..... ۲۸۶
- شکل (۶۸-۶): توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال..... ۲۸۶

فهرست بداول

فصل دوم: فرآیندهای مؤثر در انتقال و تمول هیدروکربن‌ها در سفره‌های آب زیرزمینی و

روابط ریاضی آن‌ها

جدول (۱-۲): مراحل اصلی مدل سازی انتقال واکنشی ۹۲

فصل سوم: دینامیک سیالات مماسباتی و معرفی ابزار آن

جدول (۱-۳): مقایسه کدهای CFD ۱۰۶

فصل چهارم: تأیید، اعتبارسنجی و کالیبراسیون مدل

جدول (۱-۴): پارامترهای ورودی مدل ۱۳۰

جدول (۲-۴): پارامترهای ورودی مدل ۱۳۷

جدول (۳-۴): واکنشهای اکسیداسیون و احیاء در سفره های آلوده شده به وسیله ترکیبات آلی قابل

اکسایش ۱۴۶

جدول (۴-۴): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه سازی سیستم پیوسته ۱۴۷

جدول (۵-۴): پارامترهای مدل استفاده شده در شبیه سازی دو بعدی ۱۵۰

جدول (۶-۴): پارامترهای ورودی مدل ۱۶۲

فصل پنجم: مطالعات صمراپی انجام شده در کل نامیه صنعتی ری

جدول (۱-۵): نسبت محتوی نفت در فضای خالی خاک ۲۰۴

جدول (۲-۵): مقایسه نتایج بدست آمده در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری با

استفاده از روش ۱ ۲۰۵

جدول (۳-۵): مقایسه نتایج بدست آمده در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری با

استفاده از روش ۲ ۲۰۵

جدول (۴-۵): مقدار آلودگی نفت در ناحیه ایستگاه پمپاژ بر واحد حجم ۲۰۶

فصل ششم: مدل سازی عددی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در آبخوان تهران در کل

نامیه صنعتی ری

جدول (۱-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه سازی دو بعدی ۲۲۲

جدول (۲-۶): کسر وزنی گازوئیل هوازده ۲۲۴

جدول (۳-۶): نتایج تجزیه کیفیت آب ۲۲۴

جدول (۴-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه سازی دو بعدی ۲۵۰

جدول (۵-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه سازی ۲۶۱

جدول (۶-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه سازی ۲۷۸

جدول (۷-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه سازی ۲۸۱

جدول (۸-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه سازی ۲۸۵

فهرست علائم و اختصارات

علائم

A :	غلظت الکترون گیرنده در فاز آبی
$\bar{A}$:	غلظت الکترون گیرنده در بیومس چسبیده
b :	عمق سفره اندازه گیری شده از سطح آب زیرزمینی تا لایه کف غیر قابل نفوذ
B :	غلظت باکتری معلق در فاز آبی
B_s :	جرم باکتری چسبیده به فاز جامد بر واحد جرم فاز جامد
C :	غلظت آلاینده در فاز آبی
C_0 :	غلظت منبع آلودگی
C_1 :	غلظت فاز آبی جزء مورد عمل اول
C_2 :	غلظت فاز آبی جزء مورد عمل دوم
$\bar{C}$:	غلظت ترکیب در بیومس چسبیده
C_{org} :	غلظت آبی گونه شیمیایی (در این جا هیدروکربن نفتی)
$C_{org,q}$:	غلظت گونه آلی در این فلاکس اگر q_s مثبت باشد (تزریق) ، در غیر این صورت
$C_{org,q} = C_{org}$	
$C_{org,i}^{sat}$:	قابلیت انحلال فاز آبی یک گونه منفرد ترکیب آلی مورد بحث در مخلوطی از
ترکیباتی با مشخصات فیزیکوشیمیایی مختلف	
$C_{org,i}$:	غلظت ترکیب آلی i ام در آب زیرزمینی
$\bar{C}_N^w$:	غلظت تعادلی گونه NAPL در فاز آبی (قابلیت انحلال)

غلظت گونه NAPL در فاز آبی	C_N^w :
غلظت جذب شده	$C_{org,s}$:
غلظت تعادلی	C_{org} :
ماکزیمم ظرفیت جذب سطحی	$C_{org,s,max}$:
مقدار جرمی که جذب سطوح جامد می‌شود	$C_{org,s}$:
کسر جرمی یک ترکیب آلی که به جرم ویژه خاک جذب می‌شود	$C_{org,s}$:
حداکثر کسر جرمی یک ترکیب آلی که به جرم ویژه خاک جذب می‌شود	$C_{org,s,max}$:
ثابت تعادل غلظت بخار گونه NAPL در فاز گازی است	$\bar{C}_N^g$:
غلظت گونه NAPL در فاز بخار	C_N^g :
غلظت فاز بخار در بالای منطقه منبع بر حسب	C_{source} :
غلظت در منطقه منبع خاک بر حسب	C_{siol} :
غلظت فاز بخار اشباع شده	C_{sat} :
غلظت آلاینده در اتمسفر	C_A :
اشباع فاز بخار آلاینده‌ها در تعادل با فاز NAPL	C_g^S :
غلظت الکترون گیرنده	C_{EA} :
غلظت آبی اکسیژن	C_{O_2} :
غلظت آبی نیترات	$C_{NO_3^-}$:
تعداد سلول‌ها بر جرم جامد	C_c :
غلظت مولفه i در هر فاز	C^i :
غلظت کلی مولفه‌ها در خاک	C_T :
غلظت منبع آلودگی	C_0 :
عمق منطقه اشباع نشده	d :

تانسور پراکندگی هیدرودینامیکی	$:D_{ij}$
پراکندگی هیدرودینامیکی طولی	$:D_L$
پراکندگی هیدرودینامیکی عرضی	$:D_T$
ضریب پخش مولکولی	$:D_{dif}$
ضریب نفوذ موثر آلاینده در فاز گاز	$:D_a$
ضریب نفوذ موثر آلاینده در فاز مایع منطقه اشباع نشده	$:D_w$
ضریب نفوذ موثر آلاینده در فاز خاک	$:D_g$
ضریب نفوذ موثر آلاینده در آب منطقه غیر اشباع	$:D_w$
ضریب نفوذ آلاینده در هوای بلوک	$:D_g^b$
ضریب نفوذ آلاینده در آب بلوک	$:D_w^b$
مکمل تابع خطای erf که بر حسب پارامتر β تعریف می‌شود	$:erfc$
جرم الکترون گیرنده مصرف شده بر جرم ترکیب تجزیه شده	$:E$
فلاکس جرمی از فاز NAPL به گاز خاک به واسطه تبخیر	$:E_N^g$
فلاکس جرمی از فاز NAPL به آب زیرزمینی به واسطه انحلال	$:E_N^w$
فلاکس جرمی از آب زیرزمینی به گاز خاک	$:E_w^g$
فلاکس جرمی از منطقه غیر اشباع به اتمسفر	$:E_g^A$
ضریب استوکیومتری اکسیژن	$:f$
بخش یا کسر کربن آلی خاک است	$:f_{oc}$
ضریب استوکیومتری ترکیب آلی	$:f_{org}$
ضریب استوکیومتری الکترون گیرنده	$:f_{EA}$
هد هیدرولیکی	$:h$
ثابت هنری	$:H$

H_i :	ثابت هنری هر مولفه i در دمای مورد نظر
k :	ضریب انتقال جرم
k_1 :	ثابت سینتیک تجزیه مرتبه اول
k_2 :	ثابت واکنش (شبه مرتبه دوم)
k_b :	ضریب تخریب درونی
k_d :	ضریب توزیع است که به مشخصات جسم حل شده و محیط جامد بستگی دارد
k_{abio} :	ثابت نرخ تخریب مرتبه اول غیربیولوژیکی
k_{dec} :	ضریب تخریب باکتری
$k_{NO_3^-}$:	ثابت نرخ نیترات زدایی
k_{abio} :	ثابت نرخ تخریب مرتبه اول غیربیولوژیکی
K_A :	ضریب نرخ چسبیدن باکتری به فاز جامد
K_D :	ضریب نرخ جداسازی باکتری از فاز جامد
K_F :	ضریب ظرفیت جذب فرندلیچ
K_L :	ضریب ظرفیت جذب تک لایه‌ای (لانگمویر)
K_{ij} :	تانسور قابلیت هدایت هیدرولیکی
K_N^w :	نرخ انحلال بوده که تنظیم کننده نرخ است که در آن تعادل حاصل می‌گردد
K_w^g :	نرخ تبخیر است
K_N^g :	نرخ است که تعادل در آن حاصل می‌گردد
K_{EA} :	ثابت نیمه اشباع الکترون گیرنده
K_{org} :	ثابت نیمه اشباع ماده آلی
K_1 :	ثابت نیمه اشباع جزء مورد عمل اول
K_2 :	ثابت نیمه اشباع جزء مورد عمل دوم

ثابت نیمه اشباع نیترات	$K_{NO_3^-}$
ثابت بازداري اكسيژن	K_{inh,O_2}
ثابت بازداري جزء مورد عمل	K_i
ضريب نیمه اشباع تركيب	K_C
ضريب جزءبندی کربن آلی خاک با آب برای هر مولفه i	K_{oc}^i
هدایت هیدروليکی NAPL در لنز NAPL	K_o
هدایت هیدروليکی آب زیرزمینی	K_w
ضخامت محصول آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی	L
ضخامت مرجع لنز NAPL (حجم بر واحد سطح NAPL، تقسیم بر تخلخل پر شده از NAPL)	L_o
ضريب ثابت	m
جرم سلول‌ها در یک میکروکلنی ($m_c = r_X V_c$)	m_c
کسر مولی تركيب آلی i ام در مخلوط NAPL	$m_{org,i}$
جرم کلی خاک	m_{soil}
وزن ملكولی	MW
جرم مولفه i در هر یک از چهار فاز: NAPL، آب، هوا و خاک (فاز جذب شده) می-باشد	M^i
وزن مولکولی معادل مخلوط NAPL بعد از موازنه فازی	MW_{NAPL}
ضريب ثابت	n
ضريب انرژی جذب فرندلیچ	n_F
تعداد سلول‌ها در میکروکلنی (یک ثابت)	N
غلظت اكسيژن در فاز آبی	O

q_s :	سرعت فلاکس حجمی آب در واحد حجم آب که نشان دهنده عبارت های تولید و مصرف خارجی
q_w :	تخلیه ویژه آب زیرزمینی
q_g :	فلاکس حجمی گاز خاک
Q_0 :	نرخ نشت/ پمپاژ NAPL ، با علامت مثبت نشان دهنده نشت در نقطه (ξ, ζ) ، همان طور که به وسیله تابع دلتای دیراک (δ) نشان داده شد
r_j :	درصد حجم فاز j
R :	جذب خطی
$R_{EA,deg}$:	عبارت واکنش بوده کتغییرات غلظت به واسطه تجزیه بیولوژیکی ترکیب آلی را نشان می دهند
$R_{EA,sorb}$:	عبارت واکنش بوده که تغییرات غلظت به واسطه جذب ترکیب آلی را نشان می دهند
$R_{org,dis}$:	فرآیند واکنشی انحلال
$R_{org,deg}$:	فرآیند تجزیه (بیولوژیکی)
$R_{org,sorb}$:	فرآیند جذب
$R_{org,vol}$:	فرآیند تبخیر
R_{org,O_2} :	عبارت تجزیه هوازی
R_{org,NO_3} :	عبارت نیترازدایی
$R_{org,Mn^{2+}}$:	عبارت احیای منگنز
$R_{org,Fe^{2+}}$:	عبارت احیای آهن
$R_{org,SO_4^{2-}}$:	عبارت احیای سولفات
R_{org,CH_4} :	عبارت متانزایی
$R_{w,bio}$:	تجزیه بیولوژیکی در منطقه اشباع شده

مصرف کلی به واسطه تجزیه بیولوژیکی در فازهای جامد، آب و گاز منطقه غیر	$R_{g,bio}$:
اشباع	
قابلیت انحلال مولفه خالص در آب	S :
اشباع NAPL	S_N :
اشباع آب	S_W :
ذخیره ویژه	S_s :
نرخ منبع ψ_j	$S_{\psi j}$:
غلظت بحرانی بازدارنده است که به ازای مقادیر بیشتر از آن واکنش تجزیه متوقف می‌گردد	S_m :
قابلیت انحلال آبی خالص هر مولفه i است	S_i :
درجه اشباع NAPL در لنز NAPL	S_{oo} :
درجه اشباع NAPL در منطقه غیر اشباع	S_{oun} :
غلظت فاز بخار اشباع شده	$SVPC$:
زمان	t :
دمای خاک	T :
کل هیدروکربن‌های نفتی	TPH :
مولفه سرعت در جهت x	u :
سرعت آب منفذی در جهت x	v :
سرعت آب زیرزمینی	v^w :
سرعت متوسط خطی در جهت x	v_x :
سرعت متوسط خطی در جهت y	v_y :
حداکثر نرخ تجزیه	v_M :

V :	حجم کل نمونه خاک
V_c :	حجم یک میکروکلنی
VP :	فشار بخار آلاینده
x :	مختصات مکانی
x_i :	فراکسیون مولی هر ترکیب i در مخلوط NAPL
X :	غلظت فاز آبی بیومس غیر متصل یا آزاد
$\bar{X}$:	غلظت بیومس چسبیده، جرم سلول‌های چسبیده بر حجم فاز آبی
Y :	ضریب بازده، جرم سلول‌های تولید شده بر جرم ترکیب تجزیه شده
α_L :	ضریب پراکندگی طولی محیط متخلخل
α_T :	ضریب پراکندگی عرضی محیط متخلخل
β :	مساحت سطح یک میکروکلنی
β_2 :	ثابت تجربی تقریباً معادل ۰/۵
β_3 :	ثابت تجربی تقریباً معادل ۱
β_1^{wN} :	ضریب نرخ است و با برازش با داده‌های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد
β_1^{gw} :	ضریب نرخ است و با برازش با داده های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد
β_1^{gN} :	ضریب نرخ است و با برازش با داده های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد
$\gamma_{org,i}$:	ضریب فعالیت ترکیب آلی i ام
λ :	ثابت تجزیه مرتبه اول آلاینده در هر دو فاز آبی و فاز جذب شده
λ_1 :	تجزیه مرتبه اول آلاینده در هر سه فاز آبی، فاز گاز خاک و فاز جذب شده

نرخ رشد ویژه	μ :
حداکثر نرخ رشد ویژه	$\mu_{\max}$:
ضریب نرخ انتقال جرم بوده که محصولی است از یک ضریب انتقال جرم و ناحیه ویژه	ω :
سطح مشترک بین فاز NAPL و آب	
تخلخل مواد سفره که ثابت فرض شده است	θ :
آب محتوی حجمی	θ_w :
محتوی حجمی هوا	θ_a :
محتوی حجمی NAPL	θ_{NAPL} :
دانسیته بیومس (جرم سلول‌ها بر حجم بیومس)	ρ_X :
دانسیته بلوکی خاک خشک	ρ_b :
دانسیته مولفه i در شکل مایع	ρ_i :
چگالی فاز j	ρ_j :
دانسیته NAPL	ρ_{NAPL} :
دانسیته آب	ρ_w :
هر متغیر وابسته فاز	ψ_j :
ضریب تغییر نفوذ برای متغیر ψ در فاز j	Γ_{ψ_j} :

BTC:	Breakthrough Curve
BTEX:	Benzene, Toluene, Ethylbenzene, Xylenes
CFC-EM:	Chlorofluorocarbon Extractable Materials
CFD:	Computational Fluid Dynamics
CHAM:	Concentration, Heat and Momentum Ltd
DNAPL:	Dense Nonaqueous Phase Liquid
HEM:	N- Hexane Extractable Materials
JCCP:	Japan Cooperation Center, Petroleum
<i>k-S-P</i> :	Permeability- Saturation- Capillary Pressure
LNAPL:	Light Nonaqueous Phase Liquid
MCL:	Maximum Contaminant Level
MIKSS:	Mixed Instantaneous and Kinetics Superposition Sequence
MM:	Michaelis-Menten
MTBE:	Methyl Tertiary Butyl Ether
PAH:	Polycyclic Aromatic Hydrocarbon
PAHs:	Polynuclear Aromatic Hydrocarbons
PCFF:	Partially Coupled Fraction-by-Fraction
PEM:	Passive Flux Meter
PIL:	PHOENICS Input Language
RBMNA:	Risk Based Monitored Batural Attenuation
REV:	Representative Elementary Volume
SCM:	Surface Complexation Model
SLM:	Soil Leachability Model
SSTLs:	Site-Specific Target Levels
TIC:	Total Inorganic Carbon
TORC:	Tehran Oil Refining Company

فصل اول

مشکلات ناشی از مضور هیدروکربن‌ها در سفره‌های آب زیرزمینی

و مروری بر مطالعات پیشین

۱-۱. مقدمه

امروزه محیط‌زیست با تمامی اجزای آن به صورت مسأله‌ای جهانی در آمده است. مشکلات ناشی از مخاطره افکندن وجوه طبیعی آن منابع آب، خاک، جنگل، هوا و .. به شکل یک سازمان محلی و حتی یک کشور نیست، بلکه ابعادی جهانی دارد و تقریباً تمامی راه حل‌های زیست محیطی قابل تعمیم به عنوان آلودگی آب یک تهدید جهانی است و سالانه سبب هلاکت تعداد قابل ملاحظه‌ای از انسان‌ها می‌شود. توجه به رشد فزاینده جمعیت کشور در دهه های اخیر و وابسته گی اقتصاد کشور به مواد نفتی و پتروشیمی و افزایش مصرف سوخت‌های فسیلی، منابع آب در قطب‌های صنعتی مورد تهدید جدی قرار گرفته اند. آب‌های زیرزمینی یکی از مهم‌ترین منابع آبی است که از آن برای مقاصد صنعتی، کشاورزی و آشامیدنی استفاده می‌شود. نشتی‌های حاصل از تأسیسات پالایشی، پتروشیمی، انبار نفت و خطوط لوله، منابع آب‌های زیرزمینی را تهدید می‌نمایند.

با توجه به این که منابع آب‌های زیرزمینی توسط نشتی‌های منابع هیدروکربنی به راحتی آلوده می‌گردند و از طرفی پاک سازی این آلودگی از سفره‌های آبار یک فرآیند طولانی مدت و هزینه‌بر

میباشد، بنابراین پیشینی محدوده آلودگی ناشی از منابع نفتی و بررسی مکانیزم های حاکم بر انتقال آلاینده‌های هیدروکربنی در سفره آب ها از مسائل مهم و روز زیست‌محیطی می‌باشد که ضمن تعیین محدوده آلودگی احتمالی، می تواند ما را در ارائه راهکارهای کنترلی و طراحی استراتژی‌های مناسب جهت حفاظت منابع آب زیرزمینی و پاک‌سازی مناطق آلوده یاری نماید.

در طی دو دهه اخیر، مدل‌سازی ریاضی یک ابزار مهمی جهت کمک در آنالیز و فهم سیستم‌های زیست‌محیطی پیچیده شده است جایی که در یک سیستم طبیعی همچون محیط های آب‌خوار^۱ از فرآیندها با ماهیت فیزیکی، شیمیایی و حتی بیولوژیکی درگیر هستند، مدل‌سازی ریاضی می‌تواند جهت تهیه یک چارچوب منطقی جهت فرمول بندی اطلاعاتی که از راهای مختلف (های تئوری، مطالعات آزمایشگاهی و مطالعات صحرایی) نتیجه میشوند، به کار روند . در سیستم طبیعی زیر سطحی همچون محیط های متخلخل، اکتساب داده ها نوعاً خیلی پرهزینه هستند مخصوصاً در مقیاس صحرایی که مجموعه داده ها معمولاً خیلی پراکنده هستند . بنابراین اعتبارسنجی مه‌ای پیچیده ممکن است مشکل باشد . همچنین عین حال، کمبود اطلاعات متراکم و هم‌وزن نظر زمانی و هم فضایی وجود دارد و نیاز است تا فضاهای خالی بین داده های اندازه‌گیری شده که یک نیروی محرکه مهمی را برای مدل سازی فراهم می‌سازد، پر شود . مدل‌سازی بهترین وسیله را برای لحاظ کردن داده های مشاهده شده فراهم می‌سازد یا در جایی که داده های کافی وجود ندارند، هدف آن جستجوی سناریوهایی می باشد که می‌توانند در به دست آوردن یک فهم بهتر از عامل‌های غالب در فرآیند پاک‌سازی مناطق آلوده موثر واقع گردد.

۲-۱. تعریف سفره آب زیرزمینی

سفره آب زیرزمینی، یا آبخوان

عبارت است از یک واحد زمین شناسی نفوذپذیر^۱ شباع شده که می‌تواند مقادیر قابل توجه آب را تحت

^۱. Aquifer

گرادیا‌های هیدرولیکی معمولی انتقال دهد (Freeze and Cherry, 1979). به عبارت دیگر سفره‌ها ^۱ با هدایت هیدرولیکی بالا هستند (Fitts, 2002) چنین تشکیلاتی متخلخل هستند و خلل و فرج آنها به هم متصل هستند (مانند ماسه ها) (Singh, 2007). برخی تشکیلات متخلخل هستند اما اتصال بین خلل و فرج آنها بسیار ضعیف است. به این تشکیلات سفره ناتراوا^۱ یا ریزسازند می‌گویند (مانند رس‌ها) (Singh, 2007). بنابراین، این تشکیلات قادر به انتقال آب تحت گرادیان هلی هیدرولیکی معمولی نیستند (Freeze and Cherry, 1979). به تشکیلاتی که به اندازه کافی خلل و فرج متصل به هم ندارند تا جریان افقی قابل ملاحظه‌ای از طریق آنها ممکن شود، سفره نیمه‌تراوا^۲ اطلاق می‌شود (مانند سیلت، ماسه‌های ریزدانه) (Singh, 2007).

۱-۳. انواع سفره آب زیرزمینی

سفره‌های آب زیرزمینی به طور کلی به انواع زیر تقسیم می‌شوند:

۱. سفره‌های نامحبوس^۳ یا آزاد؛
۲. سفره‌های محبوس^۴؛
۳. سفره‌های معلق^۵ یا سوار؛
۴. سفره‌های نشتی یا نیمه محبوس^۶.

۱-۳-۱. سفره‌های نامحبوس یا آزاد

وقتی تشکیلات نفوذپذیر که

ممکن است به طور بخشی اشباع شده باشند بر روی یک لایه غیر قابل نفوذ قرار می‌گیرد، یک سفره

نامحبوس یا آزاد تشکیل می‌شود (Singh, 2007). در این سفره‌ها هیچ‌گونه لایه رسی یا لایه محبوس

^۱. Aquiclude

^۲. Aquitard

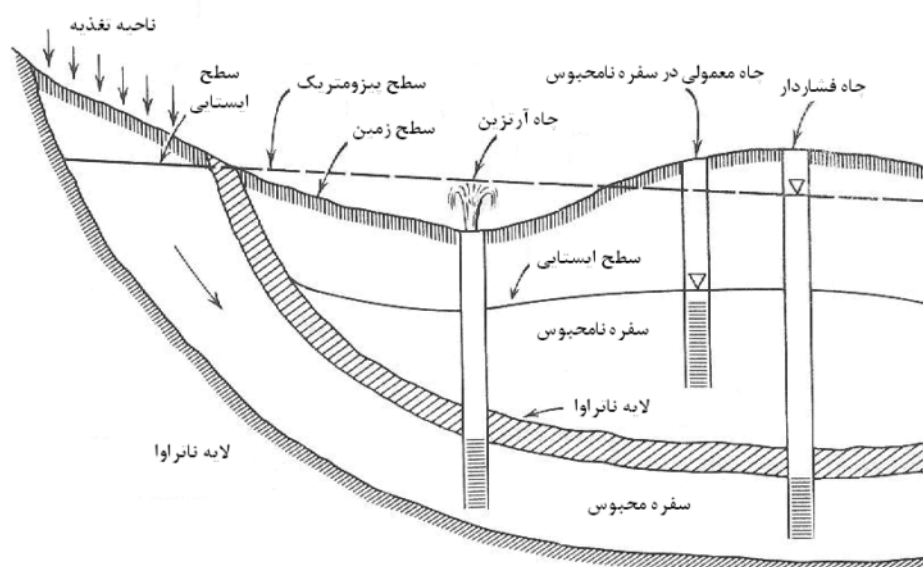
^۳. Unconfined aquifer

^۴. Confined aquifer

^۵. Perched aquifer

^۶. Leaky or Semi-confined aquifer

کننده دیگری در بالای منطقه اشباع آب زیرزمینی وجود ندارد. سطح فوقانی منطقه اشباع شده سفره آزاد، سطح ایستابی نامیده می شود که می تواند آزادانه نوسان کند (شکل ۱-۱). نوسانات سطح ایستابی به میزان تغذیه و تخلیه سفره یا حجم آب ذخیره شده در آن بستگی دارد (Todd, 1980).



شکل (۱-۱): مقطع عرضی شماتیک سفره های نامحبوس و محبوس (Todd, 1980).

۱-۳-۲. سفره های محبوس

همانطور که در شکل (۱-۱)

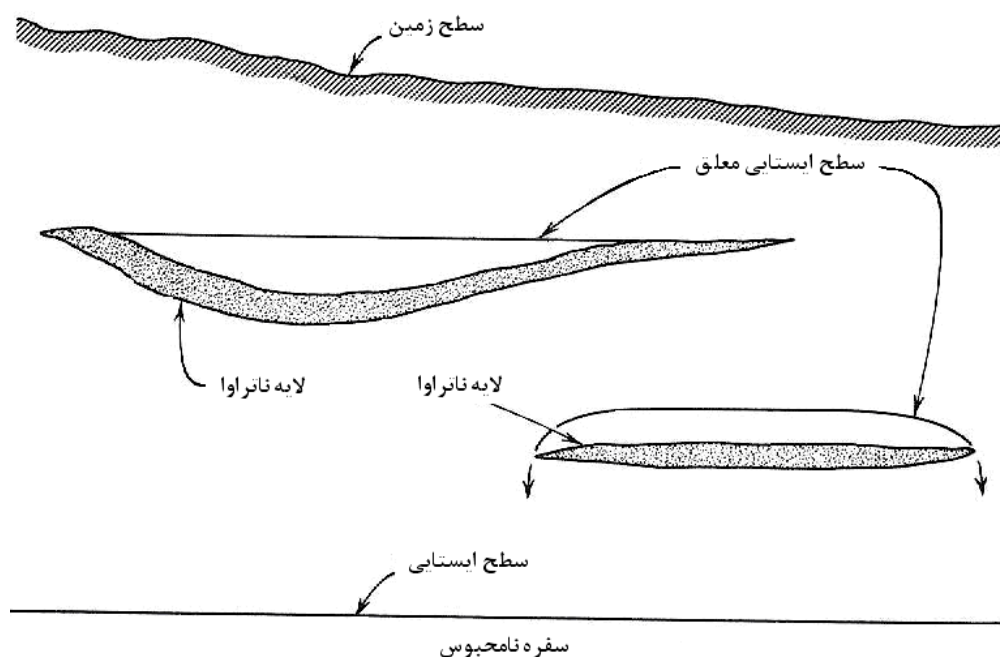
دیده می شود، وقتی که تشکیلات نفوذپذیر کاملاً اشباع شده بین دو لایه غیر قابل نفوذ قرار می گیرد، به آن سفره محبوس اطلاق می گردد (Singh, 2007). در چنین سفره هایی فشار آب معمولاً بیشتر از فشار اتمسفری است، بنابراین سطح آب در چاه هایی که در این سفره ها حفر می شوند بالای لایه فوقانی سفره قرار می گیرد (Todd, 1980). سطح پیزومتریک نامیده می شود، که از فشار هیدروستاتیکی آب داخل سفره تبعیت می کند.

۱-۳-۳. سفره های معلق یا سوار

¹. Pizometric

در جایی که یک لایه غیر قابل

وذ یا بلفنفوذپذیری کم، با گسترش محدود بین سطح ایستابی سفره آزاد و سطح زمین وجود داشته باشد، سفره‌های معلق ممکن است تشکیل شوند (صداقت، ۱۳۷۲). در واقع این نوع سفره‌ها یک حالت خاص از سفره‌های آزاد هستند (Todd, 1980). عدسهای رسی در بین نهشته های رسوبی، معمولاً سفره‌های معلق را ایجاد می‌کنند (شکل ۱-۲).



شکل (۱-۲): طرح شماتیک سفره‌های معلق (Todd, 1980).

۴-۳-۱. سفره‌های نشتی یا نیمه محبوس

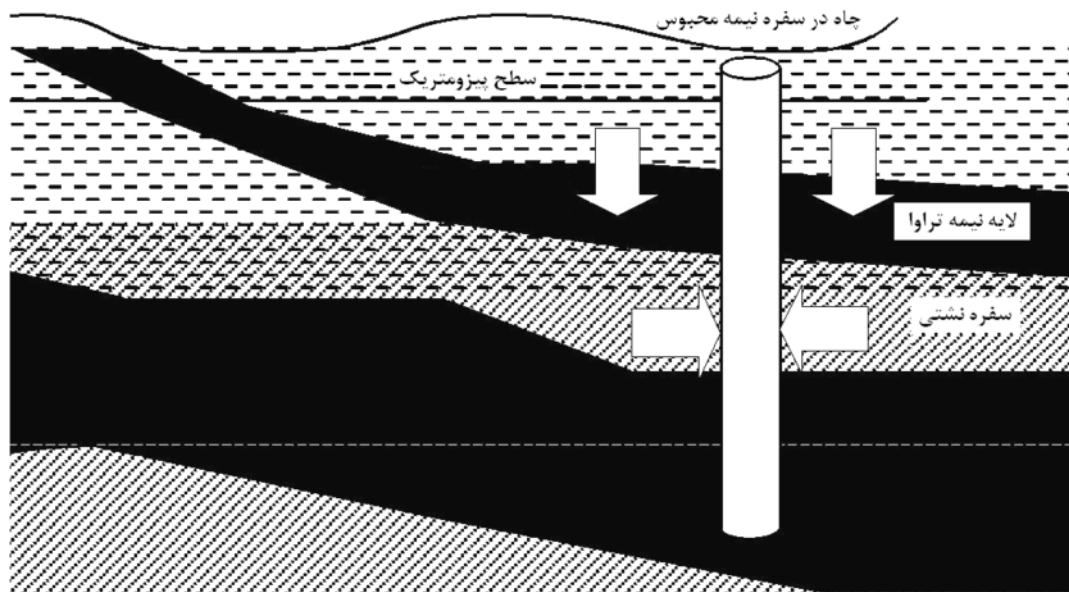
در سفره‌های محبوس، وقتی یکی

از لایه‌های محبوس کننده نیمه نفوذپذیر باشد (همانند لایه نیمه تراوا) سفره نشتی یا نیمه محبوس

نامیده می‌شود (Singh, 2007). همان‌طور که در شکل (۳-۱) دیده می‌شود، با پمپاژ از یک چاه

حفر شده در یک سفره نشتی آب در دو مسیر حرکت می‌کند: به وسیله جریان افقی در سفره و به

وسیله جریان عمودی از میان لایه نیمه تراوا به درون سفره (Todd, 1980).



شکل (۱-۳): طرح شماتیک سفره‌های نفتی یا نیمه محبوس (Singh, 2007).

۴-۱. منابع بالقوه آلاینده‌های آلی

منابع اصلی آلاینده‌های آلی

عمدتاً فعالیت‌های انسانی مربوط می‌شوند. از طریق این فعالیت‌ها مواد آلی مخصوصاً ترکیبات آلی مصنوعی، حلال‌ها و هیدروکربن‌های نفتی لُهمک با محیط زیر سطحی تماس پیدا کنند و سرانجام به آب‌های زیرزمینی راه پیدا می‌کنند.

صنایع پتروشیمی، پالایشگاه‌ها،

ایستگاه‌های تعمیر و مخازن نفتی از منابع اصلی آلاینده‌های آلی مخصوصاً مایع فاز غیر آبی سبک (LNAPL)^۱ و مایع فاز غیر آبی سنگین (DNAPL)^۲ در شهرها هستند. آلودگی ممکن است از طریق نشت از تانک‌های ذخیره محصولات آلی و خطوط لوله رخ دهد و بدان وسیله محیط زیر سطحی در معرض هیدروکربن‌ها قرار بگیرد و سرانجام منابع آب زیرزمینی آلوده می‌گردد. آلودگی آب زیرزمینی در نواحی شهری ممکن است از فعالیت‌های زیر ناشی شوند:

۱. تولید، استفاده و ذخیره‌سازی مواد شیمیایی خطرناک؛

^۱. Light Nonaqueous Phase Liquid

^۲. Dense Nonaqueous Phase Liquid

۲. ریزش‌های تصادفی مواد شیمیایی در طی انتقال و استفاده؛

۳. انتقال مواد شیمیایی یا باطله‌ها از طریق خطوط لوله زیرزمینی؛

۴. تانک‌های ذخیره محصولات نفتی و دیگر محصولات شیمیایی.

۱-۵. انواع آلاینده‌های آلی

انواع آلاینده‌های آلی که ممکن

است در محیط زیست رها شوند به طبیعت مواد خام استفاده شده و باطله‌های تولید شده به وسیله فرآیندهای صنعتی ویژه در تأسیسات پتروشیمی و پالایشگاه‌ها بستگی دارد. اکثر آلاینده‌های آلی در خاک و آب‌های زیرزمینی از نشت تانک‌های ذخیره زیرزمینی هیدروکربن‌های نفتی و استفاده از حلال‌ها و عامل‌های روغن‌زدایی در کارخانجات صنعتی نتیجه می‌شوند.

برخی از آلاینده‌های آلی ایجاد

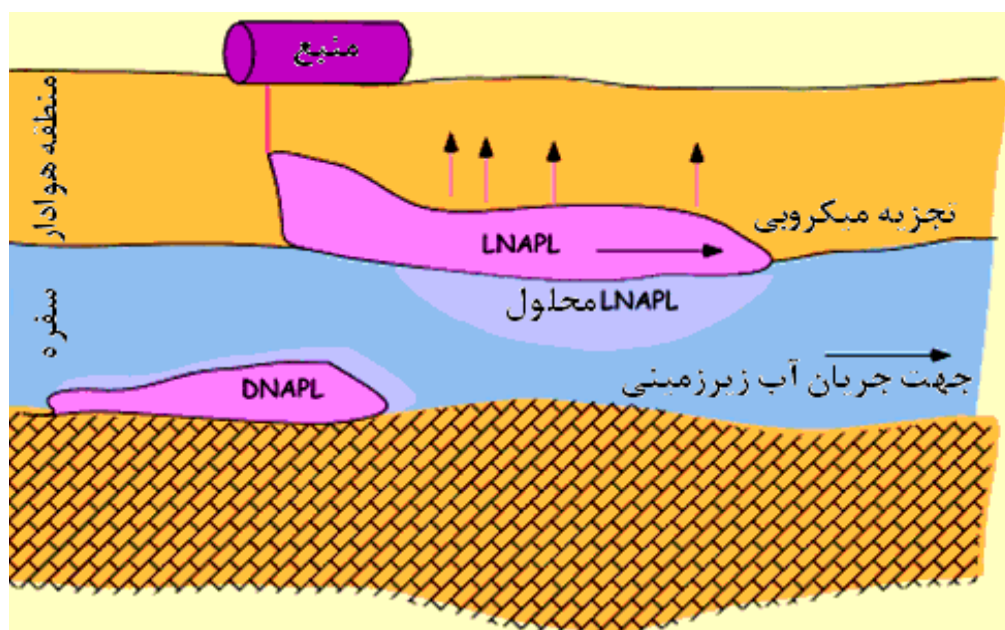
شده از نفت تصفیه شده و هیدروکربن‌های مایع در مراکز پالایشگاهی و پتروشیمی شامل هیدروکربن‌های آلفاتیک حلقوی^۱ مانند اتیل، پروپیلن، بوتیلن و هیدروکربن‌های آروماتیک حلقوی مانند بنزن، تولن، اتیل بنزن و زایلن می‌باشند. آلفاتیک‌ها هیدروکربن‌هایی هستند که حلقه بنزن را شامل نمی‌شوند در حالی که آروماتیک‌ها هیدروکربن‌هایی هستند که شامل حلقه بنزن هستند (Phophi, 2004). معمولاً این هیدروکربن‌ها مجتمعا به واسطه چگالی ویژه آن‌ها که کمتر از چگالی آب است به عنوان مایعات فاز غیر آبی سبک (LNAPLs) شناخته می‌شوند.

همچنین صنایع پتروشیمی

حلال‌های هالوژنه مانند تری کلرواتن (TCE)، تتراکلرواتن (PCE) ۱،۱ دی کلرواتن و ۱،۲ ترنس-دی-کلرواتن (DCE) و کلرواتن (وینیل کلرید) را تولید می‌کنند که مخرب محیط زیست هستند. این حلال‌ها معمولاً به عنوان مایعات فاز غیر آبی سنگین (DNAPLs) شناخته می‌شوند مایعات فاز غیر

^۱. Cyclic

آبی سنگین از آب سنگین تر هستند و بنابراین آن ها به کف تشکیلات حاوی آب فرو می‌روند (شکل - های ۴-۱ و ۵-۱).



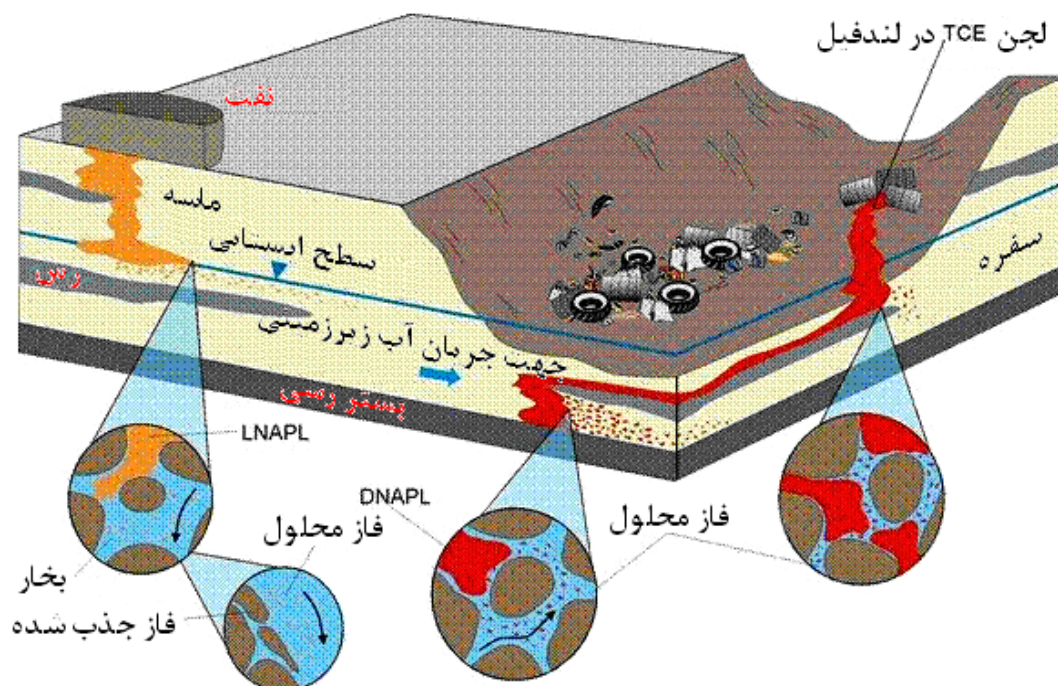
شکل (۴-۱): رفتار LNAPL و DNAPL در محیط زیرسطحی (Phopfi, 2004).

۶-۱. تعریف NAPL

مایعات فاز غیر آبی (NAPLs)

هیدروکربن‌ها هستند که در تماس با آب یا هوا به صورت یک فاز جداگانه مخلوط نشدن وجود دارند (Newell et al., 1995; Fitts, 2002). اختلافات در ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی آب و NAPL به تشکیل یک سطح اشتراک فیزیکی بین مایعات می‌شود که از اختلاط دو سیال جلوگیری می‌کند. مایعات غیر آبی به طور شاخص به صورت مایعات فاز غیر آبی سبک (LNAPLs) که کمتر از آب دارند یا مایعات فاز غیر آبی سنگین (DNAPLs) که چگالی بیشتر از آب دارند طبقه‌بندی می‌شوند.

مایعات فاز غیر آبی سبک کیفیت آب زیرزمینی را در اکثر مناطق شهری متأثر می‌کنند. معمول‌ترین مسأله آلودگی آب زیرزمینی در ارتباط با LNAPLs رها سازی محصولات نفتی نتیجه می‌گردد.



شکل (۱-۵): طرح شماتیک انتقال و تحول LNAPL و DNAPL در محیط زیر سطحی

(www.afcee.af.mil/.../background/index.asp)

این محصولات به طور شاخص مخلوط های چند مولفه آلی متشکله از مواد شیمیایی با قابلیت انحلال آبی مختلف هستند. برخی از مواد افزودنی مانند متیل ترشیاری بوتیل اتر (MTBE)^۱ و الکلها به شدت انحلال پذیرند در حالی که مولفههای دیگر محصولات نفتی مانند بنزن، تلوئن، اتیلبنزن و زایلن به طور ناچیز انحلال پذیرند. پذیرنمیزت قابلیت انحلال پایین محصولات نفتی آن است که بارگذاری در محیطیست به طور شاخص کوچک است و فرآیند های طبیعی اغلب آلایندها را بر روی فاصله کوچکی رقیق سازی می نمایند. از طرفی، بدی قابلیت انحلال پایین آن است که LNAPLs تعاید به عنوان یک منبع آلودگی سفره آب زیرزمینی برای مدت زمان طولانی پایدار بمانند (Phophi, 2004). به طور کلی LNAPLs منابع بالقوه بلند مدت برای آلودگی پیوسته آب زیرزمینی در اکثر مناطق هستند.

^۱. Methyl Tertiary Butyl Ether

اگر مقدار کمی از یک نشتی

LNAPL وارد منطقه هوادار^۱ منطقه اشباع نشده یک سفره آزاد شود، LNAPL از طریق منافذ اشباع نشده جریان خواهد یافت تا این که اشباع باقی مانده حاصل شود (Newell et al., 1995; Phophi, 2004; Dupont et al., 1998). اشباع باقی مانده حجم آلاینده مایع غیر متحرک ناپیوسته بر واحد حجم منافذ است (Chatzis et al., 1983).

اگر حجم زیادی از LNAPL

ریزش شود، LNAPL میان فضای منفذی به بالای حاشیه موینه جریان می یابد. سازندهای حل شده LNAPL سازندهای کمتر محلول، جلوترند و ممکن است ویژگی های ترشوندگی آب را تغییر دهند و باعث یک کاهش در آب محتوی باقی مانده و یک کاهش در ارتفاع حاشیه موی نه گردند (Phophi, 2004).

در بخش بعد، ویژگی های فیزیکوشیمیایی که انتقال و تحول ترکیبات LNAPLs و محصولات نفتی تصفیه شده را متأثر می سازند تشریح می گردد.

۷-۱. ویژگی های فیزیک و شیمیایی آلاینده های آلی معمول (هیدروکربن های

نفتی (LNAPLs) و حلال ها (DNAPLs))

LNAPLs و DNAPLs معمول ترین آلاینده های آلی هستند که به طور بالقوه باعث آلودگی خاک و آب زیرزمینی می گردند تمام این آلاینده های آلی بر اساس ویژگی های فیزیکی به عنوان مثال، چگالی، گرانروی، قابلیت فرار، قابلیت انحلال، ضریب جزءبندی اکتانول^۲، K_{OW} ، فشار بخار و ضریب هنری (و شیمیایی مانند وزن مولکولی و پیچیدگی ساختاری) آنها مشخص می شوند.

^۱. Vadose

^۲. Octanol-water partition coefficient

۱-۷-۱. مایعات فاز غیر آبی سبک (LNAPLs)

LNAPLs شامل محصولات نفتی

و دیگر هیدروکربنهای تصفیه شده، وزن مخصوص کمتر از آب دارند، بنابراین، آن ها در بالایی حاشیه مویینه شناور خواهند شد و در نتیجه سطح آب زیرزمینی فشرده می شود و LNAPL در قسمت فرورفتگی جمع می گردد و تشکیل یک حوضچه می دهد. انرژی یک ترکیب آلی مایع، مقدار مقاومت آن در مقابل جریان تحت یک نیروی معین است. مثالهایی از LNAPLs شامل گازوئیل، سوخت جت و روغن های گرمایشی است. گازوئیل از ترکیبات مونوآروماتیک مانند بنزن، تلوئن، اتیل - بنزن و زایلن ها ساخته می شود که مجتمعا ترکیبات BTEX^۱ نامیده می شوند.

قابلیت انحلال ترکیبات آلی به

طور وسیعی از ترکیبات قطبی به شدت قابل اختلاط مانند متانول تا ترکیبات غیرقطبی با قابلیت انحلال به شدت پایین مانند هیدروکربن های آروماتیک چند هسته ای (PAHs)^۲ متفاوت است (Bhopali, 2004). ماکزیمم غلظت حل شده ترکیب در آب را تحت شرایط تعادلی نشان می دهد. قابلیت انحلال معمولا با میزان حرارت افزایش می یابد (با افزایش 10°C ، قابلیت انحلال ۳۰-۵٪ افزایش می یابد).

قابلیت انحلال ترکیبات آلی

مخصوصا LNAPLs و DNAPLs به دلیل وزن مولکولی، پیچیدگی ساختاری و ضریب جزءبندی اکتانول-آب (K_{OW}) کنترل می گردد. ضریب جزءبندی اکتانول-آب (K_{OW}) مقول است که یک ماده آلی ترجیحا آب یا حلال آلی حل خواهد شد. قابلیت انحلال ترکیبات آلی در آب با افزایش وزن مولکولی و ضریب جزءبندی اکتانول - آب (K_{OW}) کاهش می یابد. کاهش و افزایش K_{OW} تعیین

^۱. Benzene, Toluene, Ethylbenzene, Xylenes

^۲. Polynuclear Aromatic Hydrocarbons

مکند که آیا ترکیب آب دوست^۱ (حب آب همراه با K_{ow} پایین) یا آب‌گریز (دفع آب همراه با K_{ow} بالا) است (Phopfi, 2004).

برای ترکیبات آب‌گریز، روابط بر اساس K_{ow} بهتر از روابط مبنی بر قابلیت انحلال آب هستند. با این حال، برای ترکیبات متشکله گازوئیل با مقادیر K_{ow} پایین، روابط مبنی بر قابلیت انحلال احتمالا برتر از روابط مبنی بر K_{ow} هستند (Phopfi, 2004).

نرخ مهاجرت LNAPLs به وسیله ویژگی‌های فیزیکی آن‌چگالی، گرانشی، قابلیت انحلال در آب، ضریب جزءبند - دی اکتانول - آب " K_{ow} فشار بخار و ضریب هنری (و واکنش‌های شیمیایی جذب سطحی، تبادل یونی و جزءبندی در ماده آلی یا حلال‌های آلی) در سفره می‌تواند کنترل گردد.

۱-۷-۲. مایعات فاز غیر آبی سنگین (DNAPLs)

اکثر حلال‌های آلی چگال‌تر از آب هستند. DNAPLs وزن مخصوص بیشتر از آب دارند بنابراین، تمایل دارند از میان ستون آب فرو روند و در فرورفتگی‌های کف سفره جمع شوند. این مواد در امتداد کف سفره آب زیرزمینی جریان می‌یابند و می‌توانند در جهاتی متفاوت از جریان آب زیرزمینی حرکت کنند. برخی از مثال‌های DNAPLs شامل دی‌کلرواتن و ۱،۲-ترنس-دی‌کلرواتن (DCE) و کلرواتن (وینیل-کلرید)، بیفنیل‌های پلی‌کلرینه (PCBs)، روغن قطران، قطران ذغال سنگ و برخی آفت‌کش‌ها هستند. بر اساس ثابت هنری مشخص می‌شود که حلال‌های کلرینه کمتر فرار هستند. معمولاً انتقال یک ماده در فاز بخار به وسیله فشار بخار و ثابت‌های هنری بالا میسر می‌گردد (Phopfi, 2004). فشار بخار، مقدار تمایل یک ماده به انتقال از فاز جامد یا مایع به فاز بخار است. مقدار K_{oc} ، بیانگر خروج ترکیبات آلی از فاز آبی و جذب روی سطوح جامد سفره آب می‌باشد.

^۱. Hydrophilic

^۲. Hydrophobic

۸-۱. مشخصات آلاینده‌های آلی

گازوئیل حاوی حدود ۱۵٪

MTBE می‌تواند به وسیله خطوط لوله منتقل شود چون گازوئیل پالایش می‌شود شامل نسبت بالاتری از سازنده‌های آلی سبک‌تر از سازنده‌هایی که در نفت خام پیدا می‌شوند، هستند. بنابراین سازنده‌های حلاله گازوئیل در آب زیرزمینی می‌تواند از ترکیبات نفت خام متحرک تر باشند. سوخت دیزل سنگین‌تر است و نسبت به گازوئیل غلظت های پایین‌تری از هیدروکربن‌های سبک دارد. در این صورت قابلیت تحرکی بین گازوئیل و نفت خام خواهد داشت. هیدروکربن‌های سوختی از آب سبک‌ترند و روی سطح آب در موقعیت‌های ریزش شناور خواهند بود تحت شرایط نرمال درجه حرارت و فشار استاندارد، گازوئیل و MTBE مایع و اسفید قابل اختلاط با آب هستند اگر چه مشاهدات نشان می‌دهند که MTBE اندکی انحلال پذیر است. وقتی مخلوط گازوئیل / MTBE با آب زیرزمینی تماس می‌یابد، مقداری از اجزای آن‌ها می‌تواند در آب زیرزمینی حل شوند. قابلیت انحلال اجزای منفرد گازوئیل در یک مخلوط از قابلیت انحلال ماده خالص در آب کمتر است. به عنوان مثال، قابلیت انحلال کلی گازوئیل در آب تقریباً 100 تا 300 mg/L استاین بدین معنی است که قابلیت انحلال اجزای منفرد آن در یک ریزش گازوئیل کمتر از 100 mg/L تا 300 است.

اجزای اصلی حل شده در آب

زیرزمینی از نشت‌های گازوئیل، ماده افزودنی MTBE و ترکیبات BTEX بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و زایلن‌ها) هستند دیزل حاوی MTBE نیست و نسبت به گازوئیل و نفت خام غلظت های پایین‌تری از ترکیبات BTEX را شامل می‌گردد (Brandes Company, 1999). از دیدگاه آژانس حفاظت محیط زیست آمریکا بیشترین حد آلاینده (MCL) در آب زیرزمینی برای این سازنده‌ها عبارتند از : 0.05 mg/L بنزن (سرطان زا)، 0.7 mg/L اتیل بنزن (اثرات کبدی، کلیوی

¹. U.S. Environmental Protection Agency (U.S.EPA)

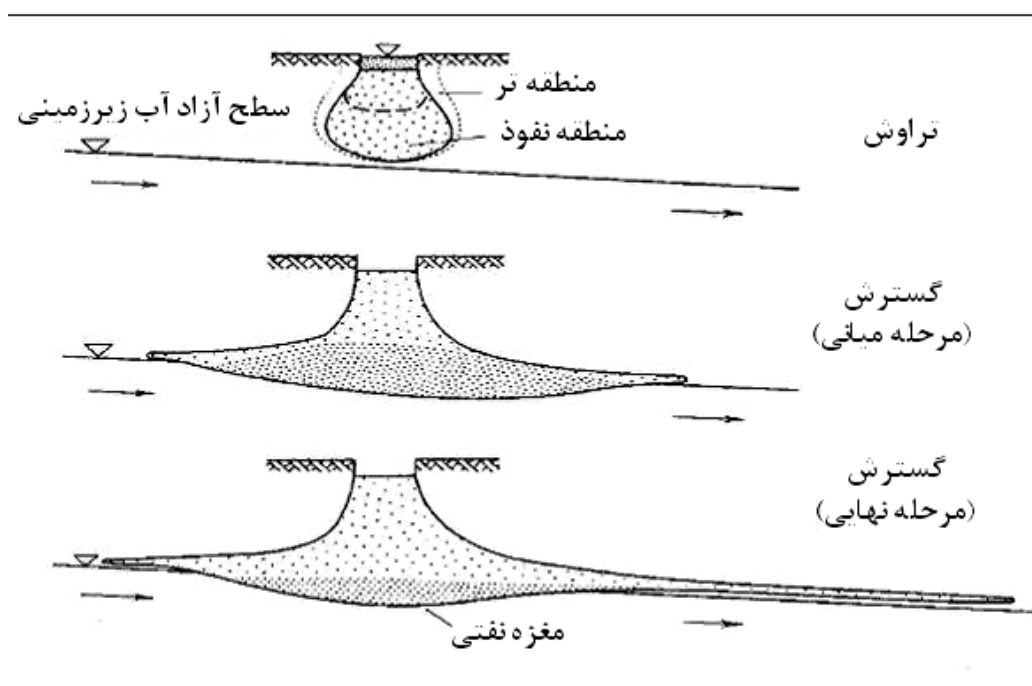
². Maximum Contaminant Level

و سیستم عصبی ($1/0 \text{ mg/L}$ تلون اثرات کبدی، کلیوی و سیستم عصبی) و $1/0 \text{ mg/L}$ زایلنها
 اثرات کبدی، کلیوی و سیستم عصبی (Brandes Company, 1999) وزن یک ماده مولد سرطان شناخته شده برای انسان است. برای
 MTBE حد مجازی وجود ندارد اما مشاوره هایی در حد $0/02$ تا $0/04 \text{ mg/L}$ برای آب نوشیدنی
 تنظیم شده است. حضور MTBE آب آشامیدنی به دلیل اثراتش بر روی مزه و بوی آب و پتانسیل
 تجزیه بیولوژیکی پایین این ماده، نامطلوب است. MTBE در مقایسه با هیدروکربنهای مورد استفاده
 به عنوان سوخت، یک ضریب جزء بندی اکتانول - آب نسبتا پایینی (حدود ۱۶) دارد، این بدین مفهوم
 است که MTBE طور مقایسه ای قابلیت انحلال بالاتری در آب دارد. قابلیت انحلال MTBE در آب
 زیرزمینی حدود 250 mg/L اندازه گیری شده است (Brandes Company, 1999).

۹-۱. توصیف اثرات ممکن نشت آلاینده ها

یک نشت میتواند منجر به

تشکیل یک منبع آهسته و پایدار آلودگی در سطح یا زیر سطح زمین گردد محصولات خالص و رقیق
 می توانند به آهستگی از میان خاک نشت کنند و سرانجام به سطح آب زیرزمینی برسند (شکل ۱-۶).



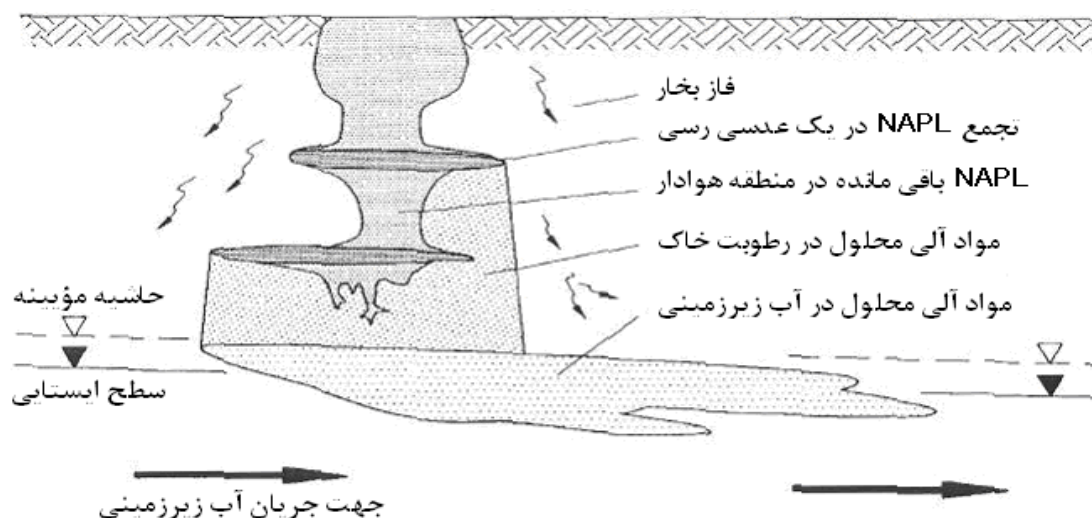
شکل (۱-۶): نمایش شماتیک پراکندگی نفت در محیط متخلخل (Brandes Company, 1999).

اگر مقدار نشت به قدر کافی

بزرگ باشد، LNAPLs به صورت یک فاز جداگانه بر روی سطح آب زیرزمینی شناور خواهند شد. یک پلوم فاز حل شده از آلاینده های آلی در آب زیرزمینی تشکیل می گردد. وقتی که هیدروکربنهای فاز آزاد بر روی سطح ایستابی شناور همدستیک بخش آغشته در منطقه هودار و حاشیه موینه در نتیجه نوسانات سطح ایستابی شکل می گیرند این موضوع فعالیت های به سازی را پیچیده میکند زیرا بخش آغشته یک منبع آلودگی را ایجاد می کند که میتواند حتی بعد از این که فاز آزاد زدوده شد، به عنوان یک منبع آلودگی عمل نماید.

محصولات آلی خالص و آب زیرزمینی آلوده شده تحت نرخ های مختلف حرکت خواهند کرد. هلوئ فاز حل شده به صورت شاخص سریعتر و دورتر از محصولات آلی خالص سیر می کنند (Brandes Company, 1999). پلوم فاز آزاد معمولا به نواحی مجاور ریزش محدود گیند اما اگر حجم ریزش به قدر کافی بزرگ باشد می توانند نواحی وسیعی را بپوشانند. پلومهای فاز آزاد بزرگشناور بر روی سطح ایستابی عمدتا در زیر کارخانجات شیمیایی و پالایشگاهها به مناطق شهری راه یافته اند.

اگر حجم ریزش کوچک باشد، محصولات خالص در منطقه اشباع نشده بالای سطح ایستابی به تله می افتند و در آن جا باقی خواهند ماند (شکل ۱-۷).



شکل (۷-۱): ساختار عمودی نشت NAPL با حجم ریزش کوچک (Brandes Company, 1999).

همچنین آلودگی آب زیرزمینی می تواند در نتیجه انحلال آلاینده ها در آب تغذیه ای سفره آب باشد (Brandes Company, 1999). آب تغذیه ای آلوده شده سرانجام به سطح آب زیرزمینی خواهد رسید و تشکیل یک پلوم فاز محلول را در آب زیرزمینی دهد که در جهت پایین دست حرکت خواهد کرد.

به طور کلی در یک منطقه آلوده

شده ترکیبات هیدروکربن نفتی ممکن است در چهار فاز زیر موجود باشند (Geosphere and CH₂M): (HILL, 2006; Parcher, 1999):

۱. به صورت مولکول های هیدروکربن در منافذ پر شده از هوا (فاز بخار)؛
 ۲. به صورت مولکول های هیدروکربن در رطوبت خاک و آب زیرزمینی (فاز حل شده)؛
 ۳. به صورت مولکول های هیدروکربن جذب شده به ماتریکس خاک (فاز جذب شده)؛
 ۴. به صورت مولکول های هیدروکربن احاطه شده به وسیله سایر مولکول های هیدروکربن فاز نفت یا مایع فاز غیرآبی).
- جزءبندی یک ترکیب هیدروکربنی در میان این چهار فاز به ویژگی ها و غلظت های ترکیبات هیدروکربن موجود و به ویژگی های خاک بستگی دارد.

۱-۱۰. ریسک های بالقوه همراه با اتانول، MTBE و دیگر ترکیبات گازوئیل در

آب های زیرزمینی

تولید، توزیع، ذخیره سازی و

استفاده از سوخت های اکسیژنه منجر به رهاسازی آن ها در اتمسفر، آب های سطحی و زیرزمینی شده

است. رهاسازی سوخت های اکسیژنه در اتمسفر از نظر کمی بزرگترین مکانیزم رهاسازی گزارش شده

است (Ulrich, 1999) آلودگی آب زیرزمینی مخصوصاً به وسیله MTBE در حال حاضر نگرانی اصلی است.

خطر آشامیدن آب زیرزمینی

آلوده به گازوئیل اکسیژنه با افزایش طول و اندازه پلوم آن افزایش می یابد. بعلاوه مواد افزودنی گازوئیل شامل MTBE سریع از پلوم BTEX مهاجرت می کند بنابراین MTBE نسبت به گازوئیل اکسیژنه که به این وسعت مهاجرت نمی کنند، خطر بیشتری را برای نقاط رخنمون مثل چاه های آب آشامیدنی مطرح می سازد (Ulrich, 1999).

مشکلات سلامتی و آستانه های

پایین مزه و بو برای MTBE به همراه قابلیت تک و ماندگاری بالای آن، این ترکیب را به یک آلاینده نگران کننده مبدل ساخته است. قابلیت تحرک MTBE در زیر سطح زمین به قابلیت انحلال آبی بالای آن (جذب این ترکیب به مواد جامد آبخوان قابل چشم پوشی است) و قابلیت تجزیه پذیری بیولوژیکی آسان آن نسبت داده می شود (Ulrich, 1999).

حضور مواد اکسیژنه می تواند به

طور بالقوه مهاجرت و تحول گازوئیل در محیط زیر سطحی را متأثر سازد. فرآیندهای زیادی غلظت چنین مواد شیمیایی در سفره ها را تحت تأثیر قرار می دهند. معمولاً این فرآیندها شامل نفوذ گازوئیل از میان منطقه اشباع نشده، پراکندگی گازوئیل در سطح آب زیرزمینی، انحلال گونه های اندکی انحلال از گازوئیل در آب، انتقال این مواد شیمیایی با آب زیرزمینی و تلفاتی همچون جذب^۴ و تجزیه بیولوژیکی^۵ می باشند (شکل ۱-۸).

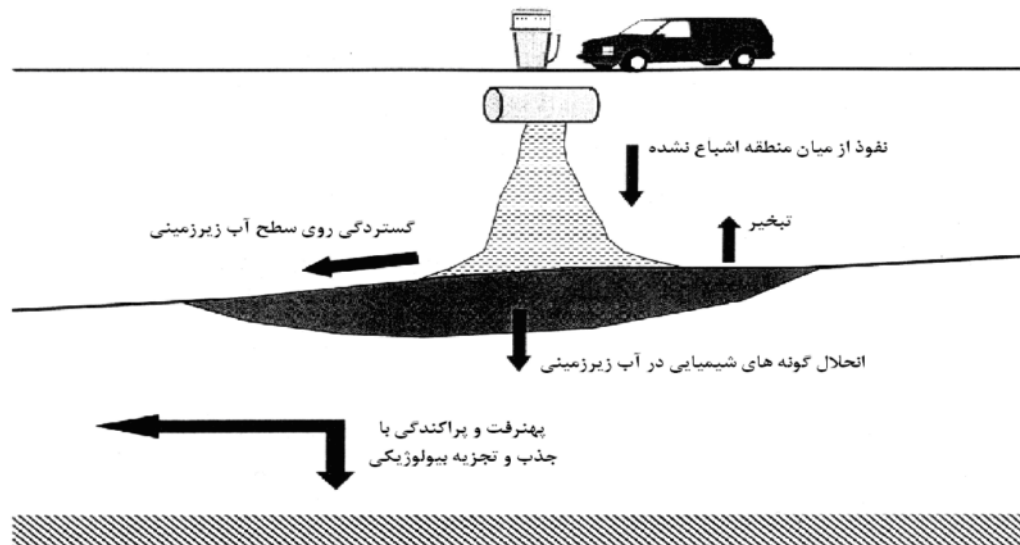
^۱. Infiltration

^۲. Dispersion

^۳. Dissolution

^۴. Sorption

^۵. Biodegradation



شکل (۱-۸): فرآیندهای اصلی کنترل کننده تحول گازوئیل در زیر سطح (Powers et al., 2001).

متفاوت بودن قابلیت تجزیه بیولوژیکی و قابلیت آب گریزی اتانول نسبت به مولفه های گازوئیل، سبب تأثیر اتانول بر تحول کلی گونه های BTEX در آب زیرزمینی خواهد شد (Powers et al., 2001). اتانول پتانسیل افزایش غلظت های گونه های BTEX را در آب زیرزمینی دارد. غلظت های تعادلی آلاینده های آبگریز در حضور الکل ها افزایش می یابد و تلفات به واسطه جذب کاهش داده می شوند (Heermann and Powers, 1998) قابلیت تجزیه بیولوژیکی آسان اتانول منجر به ناپدید شدن آن در سفره می گردد این امر منجر به یک مصرف قابل توجه ای از الکترون گیرنده ها و مواد مغذی مورد نیاز برای تجزیه BTEX می شود (Corseuil et al., 1998) بنابراین اتانول ماندگاری ترکیبات BTEX افزایش می دهد. البته اثر اتانول بر پایداری ترکیبات BTEX اساساً هم پوشانی بین پلوه های اتانول و BTEX بستگی دارد (Molson et al., 2000) چون اتانول سریعاً در سهیلته زیر سطحی تحت تجزیه بیولوژیکی قرار می گیرد، بنابراین در محیط های آبی اساساً ماندگار نیست و مهاجرت نمی کند نتیجه اتانول ریسک سلامتی کمتری را نسبت به هیدروکربن هایی که با پلوم اتانول همراه خواهند بود دارا می باشد (Ulrich, 1999).

۱- معرفی بر تحقیقات و مطالعات انجام شده جهت مدل سازی عددی تحول و

انتقال هیدروکربن‌های نفتی در آب‌های زیرزمینی

برخی از تحقیقات انجام شده در زمینه آلودگی آب‌های زیرزمینی با هیدروکربورهای نفتی به قرار زیر است:

بایهر (Baehr, 1987) با استفاده از مدل R-UNSAT نشان داد که نرخ رهاسازی هیدروکربن‌های آروماتیک مانند بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن‌ها (BTEX) در زمان کمی بعد از ریزش بیشترین مقدار الیست‌تأخیر در مقدار حداکثر نرخ رهاسازی از غنی شدگی بخش آروماتیک فاز باقی‌مانده ناشی می‌شود. چون آلفاتیله‌خیلی فرار به طور گزینشی به وسیله تبخیر رفع می شوند. R-UNSAT یک مدل کامپیوتری است که توسط سازمان زمین شناسی آمریکا (USGS) برای تعیین نرخ‌های تبخیر و تجزیه بیولوژیکی ترکیبات آلی نزدیک سطح آب ارائه شده است. این مدل برای شبیه‌سازی انتقال واکنشی چند گوهی در یک منطقه اشباع نشده لایه بندی شده با محتوی رطوبت متغیر طراحی شده و معادلات مدل دو بعدی با استفاده از یک الگوریتم تفاوت محدود حل می شوند. همچنین در این مدل راه حل های تحلیلی برای شبیه سازی انتقال عمودی یک بعدی تک گوهی غیر واکنشی در یک منطقه اشباع نشده همگن پیش‌بینی شده است.

مک نب و ناراسیمهان (Mc Nab and Narasimhan., 1994) یک روش مدل‌سازی کوپل شده را توصیف کردند که انتقال ماده محلول، تجزیه آلی مرتبه اول زنجیره ای، تعادل شیمیایی غیر آلی و یک سیستم شبه هوشمند برای تعیین واکنش های تجزیه مطلوب را ترکیب می کند. آنها از این مدل در سال ۱۹۹۵ برای بررسی اثر تجزیه هیدروکربن نفتی بر روی داده‌های صحرایی استفاده کردند.

نوبین و همکاران (Nevin et al., 1997) جهت تعیین نرخ‌های رقیق‌سازی طبیعی ترکیبات آلی محلول در آب زیرزمینی در یک منطقه، یک ابزار مدل سازی به نام FATE 5 را توسعه دادند. FATE 5

ارتقا یافته مدل تحلیلی انتقال آب زیرزمینی دمنیکو^۱ است کالبراسیون مناسب مدل به کمک داده‌های اندازه‌گیری شده در سایت، FATE 5 می‌تواند پیش‌بینی دقیقی از فرآیندهای رقیق سازی طبیعی بلند مدت در یک پلوم آب زیرزمینی ایجاد نماید. بعلاوه، FATE 5 شامل یک فرمول‌بندی حل دمنیکو در حالت ناپایا برای تعیین صحت فرضیات حالت پایا بکار رفته به وسیله مدل می‌باشد.

کمبرلوسکی و همکاران (Kemblowski et al., 1997) ارزیابی تجزیه بیولوژیکی محدود به وسیله اختلاط اکسیژن در تشکیلات زمین‌شناسی ناهمگن، مدلی با مقیاس صحرایی ارائه دادند. این مدل انتقال ترکیبات واکنشی را توصیف می‌کند و شامل معادلات تحول و انتقال میانگین و پارامترهای موثر آن‌ها است این محققین نتیجه گرفتند که نرخ موثر تجزیه بیولوژیکی به مقدار زیاد به همبستگی متقابل^۲ نوسانات غلظت اکسیژن و هیدروکربن بستگی دارد. این افراد آنالیز تصادفی^۳ را برای بررسی روابط بین تغییرپذیری و ساختار فضایی پارامترهای تحول، انتقال و تجزیه بیولوژیکی موثر بکار برلیند. مطالعه نتیجه داد که اختلاف بین نرخ های تجزیه بیولوژیکی صحرایی و نرخ‌های تجزیه بیولوژیکی هوازی آزمایشگاهی به این دو واقعیت مربوط می‌شود که در صحرا اکسیژن و هیدروکربن قبل از این که واکنش تجزیه بیولوژیکی بتواند رخ دهد باید مخلوط شوند و نرخ تجزیه موثر به وسیله غلظت‌های واقعی بجای میانگین مقادیر اکسیژن و هیدروکربن کنترل می‌شود.

اولریچ (Ulrich., 1999) عامل‌های متأثر کننده اثر منفی MTBE بر محیط‌زیست را توصیف نمود و توصیف جامعی از ملاحظات مختلف برای استفاده از اتانول به عنوان یک افزودنی گازوئیل ارائه داد. سپس مدل انتقال آلاینده برای پیش‌بینی پی‌آمدهای زیست‌محیطی ناشی از حضور اتانول در نشتی زیر سطحی گازوئیل را ارائه دادند. اولریچ از مدل ترکیبی MODFLOW/MT3D برای مدلسازی انتقال و تحول گازوئیل مخلوط شده با اتانول استفاده نمودند. در این مدل این امکان وجود

¹. Domenico

². Cross correlation

³. Stochastic

دارد که فقط یک آلاینده در یک زمان مدل شود و فرض می کند که نرخ توجیه بیولوژیکی در سراسر سال ثابت است و به وسیله تغییرات درجه حرارت یا سایر پارامترهای محیطی متأثر نمی شود. همچنین لاینه‌ی را افقی فرض می کند و آنیزوتروپی افقی مربوط به قابلیت هدایت یا تغییرات در ضخامت را توضیح نمی دهد.

پارچر (Parcher., 1999) تحقیق کرد که آیا مدل‌های عددی جریان آب زیرزمینی و انتقال آلودگی می‌توانند کارایی روش‌های مختلف به ازهررا برای کاهش آلودگی هیدروکربن های محلول در سفوی آب زیرزمینی ارزیابی کنند . در این بررسی، مدل‌های آب زیرزمینی و انتقال برای داده های یک ترمینال توزیع سوخت در شرق ایالات متحده کالیبره شدند . مدل‌های کالیبره شده برای شبیه‌سازی ^۴گزینه بهسازی بکار گرفته شدند : ^۱رقیق‌سازی طبیعی ^۲استخراج آب زیرزمینی ^۳فلاش آب زیرزمینی ^۴حصارهای بیولوژیکی هلال کالیبره شده قادر به پیش بینی کارایی گزینه‌های بهسازی مختلف بودند و یک مبنایی را برای مقایسه فراهم ساختند . مدل‌سازی در ارتباط با عوامل دیگر همچون هزینه برای آسان سازی فرآیند تصمیم‌گیری استفاده شد در این تحقیق مدل عددی ARMOS برای مدل‌سازی جریان آب زیرزمینی و هیدروکربن استفاده شد . انتقال و تحول هیدروکربن حل شده با اس تفاده از مدل عددی BIOTRANS شبیه‌سازی شد. کارایی بالقوه هر گزینه بهسازی بر اساس کاهش غلظت های آلاینده‌های آلی در داخل آب زیرزمینی و جرم باقی‌مانده منبع ارزیابی گردید.

پارک و جان (Park and Juan., 2000) مدل GWPROT را برای محاسبه سطوح پاک‌سازی خاک در مناطق پیچیده آلوده به NAPL به عنوان مثال هیدروکربن نفتی (تهیه کردند. این مدل همچنین قابلیت سنجش اشباع NAPL را یک نمونه خاک را دارد . مدل، مکانیزم تعادلی جزءبندی سه یا چهار فازی، قانون رائولت و عوامل قراردادی رقیق سازی و تضعیف را ادغام می کند. آنالیز حساسیت نیز بر ای سنجش اثرات عدم قطعیت در تخمین پارامترهای کلیدی مدل بر روی نتایج مدل انجام شد . محاسبات

مدل بر اساس فرضیات همگنی نمونه، جزءبندی تعادلی مواد شیمیایی بین فازها و بقاء جرم و حجم هستنلین مدل برای اجرای شبیهسازی عددی جهت تخمین موارد زیر توسعه یافت : ۱. غلظت مولفه در هر فاز، ۲. اشباع NAPL و ترکیب در یک نمونه خاک شامل NAPL مدل فاقد هلیوتجزیه شیمیایی و بیولوژیکی، تبخیر و مکانیزم انتقال با نفوذ و پراکندگی است. بعلاوه، جزءبندی تعادلی خاک/ آب در منطقه اشباع نشده لحظه‌ای، برگشت‌پذیر و خطی است.

مولسون و همکاران (Molson et al., 2000) یک مدل عددی برای بررسی تأثیر اتانول بر ماندگاری TEXB زیرزمینی آلوده به گازوئیل ارائه دادند. در این فرآیند مدل‌سازی، اثرات نسبی ناشی از استفاده اتانول در گازوئیل به وسیله مقایسه مواردی شامل نشت های گازوئیل^۱ گازوئیل ب ۱۰ درصد الکلی(اتانول با موارد یکسان نشتی گازوئیل بدون اتانول بررسی گردید علاوه بر این، اثر ریزش اتانول خالص در مهاجرت یک پلوم گازوئیل موجود با مهاجرت یک پلوم گازوئیل بدون اتانول مقایسه شد انجام آنالیز حساسیت تأثیر پارامترهای مختلف بر رفتار سیستم تعیین گردید. در این مطالعه، یک مدل عددی سه بعدی اجزای محدود به نام BIONAPL/3D که توسط دانشگاه واترلو در انتاریو کانادا توسعه یافته است، بکار برده شد. فرآیندهای مورد بررسی انحلال چند مولفه‌ای از یک مایع فاز غیر آبی باقی مانده (NAPL) انتقال پهنرفته پراکندگی در یک محیط متخلخل و تجزیه بیولوژیکی رقابتی محدود شده به وسیله الکترود گیرنده و رشد میکروبی را شامل می‌گردد. نتایج نشان داد که اتانول ماندگاری بنزن را افزایش می دهد و پلوم بنزن در حضور اتانول فاصله بیشتری را طی می‌کند.

لوان و همکاران (Lovanh et al., 2000) دستورالعمل‌هایی را برای تعیین پارامترهای ویژه هر سایت برای مدل سازی تحول و انتقال هیدروکربن‌های نفتی مونوآروماتیک در آب زیرزمینی ارائه دادند. این محققین بر رقیق‌سازی طبیعی پایش شده به عنوان یک گزینه به سازی سایه‌های آلوده شده تأکید

^۱. Gasohol

کردند. گزارش آن ها بر مدل سازی تحول و انتقال بنزن تأکید کرده است. چون سمی ترین مولفه محلول گازوئیل است. همچنین آلفا عبارات ریاضی کنترل کننده تحول و انتقال آلاینده در آب زیرزمینی و روشی جهت تعیین حالت ماندگاری و پایای یک پلوم را ارائه دادند.

اورلی و همکاران (Oreilly et al., 2001) تکنیکی برای محاسبه ماکزیمم غلظت های هیدروکربن

حل شده در شیرابه را ارائه کردند ماکزیمم غلظت ماده حل شده در آب در تماس با خاک متأثر از نفت، به غلظت ترکیبات مورد نظر در فاز نفت بستگی دارلگر غلظت یک ترکیب در فاز نفت یا فاز خاک معلوم باشد، ماکزیمم غلظت حل شده می تواند محاسبه شود غلظت حل شده به وسیله جزءبندی تعادلی بین فازهای نفت و آب محدود می شود جزءبندی بین ماده آلی خاک و این فازها می تواند غلظت های هیدروکربن حل شده شیرابه را بیشتر کاهش دهد.

پرومر و همکاران (Prommer et al., 2001) آخرین نسخه مدل انتقال واکنشی چند مولفه ای

PHT3D را ارائه دادند. این مدل می تواند واکنش های ژئوشیمیایی مخلوط شده تعادلی / سینتیکی عمومی را شبیه سازی نماید برای طیف وسیعی از مسائل انتقال واکنشی را نسبت به مدل های قبلی شامل می گردد. کاربردهای این مدل در مسائل ژئوشیمیایی واقعی یعنی مسائل چند مولفه ای شامل انتقال و واکنش های مربوط به همه یون های اصلی است همچنین در این مدل pH و Pe در صورت نیاز فعل و انفعالات رسوب آب شبیه سازی می شوند. با این حال چون مدل بر اساس PHREEQC-2 است، سنتیک های واکنش می توانند به آسانی از طریق عبارات نرخ تعیین شده به وسیله کاربر در بانک اطلاعاتی فرموله شود این کد دارای چند محدودیت است که عبارتند از فقط یک زیر مجموعه از طیف کامل مسائل ژئوشیمیایی که با مدل اصلی PHREEQC-2 شبیه سازی می شوند فعلا به وسیله PHT3D حمایت می شود (Prommer, 2002). مدل تشکیل کمپلکس سطحی (SCM)¹ از جمله فرآیندهای واکنشی حمایت نشده است که در برخی موارد ممکن است برای شبیه سازی تحرک یونها

¹. Surface Complexation Model

فلات ردیاب به طور دقیق لازم باشد . در مدل اصلی MT3DMS ، شبیه‌سازی‌های PHT3D بر

اساس یک میدان جریان قبلا محاسبه شده به وسیله یک شبیه ساز جریان جداگانه معمولا

MODFLOW انجام می شود. بنابراین، این مدل تولید اثر بالقوه فرآیندهای واکنشی بر میدان

جریان آب زیرزمینی را دوباره تولید کند و مدل برای پیش بینی تأثیر رسوب کانی در ویژگی های

هیدرولیکی یک سفره مناسب نیست (Prommer, 2002).

پرومر و همکاران (Prommer et al., 2002) فرآیندهای فیزیکی و واکنشی طی تجزیه بیولوژیکی

یک پلوم هیدروکربن تحت شرایط جریان ناپایای آب زیرزمینی را در یک سایت صحرایی آلوده شده به

هیدروکربن در منطقه پرت استرالیای غربی مدل سازی کردند. هدف از مدل‌سازی درک بیشتر نقش

اختلال غلظت غلظت از تغییرات هیدرولیکی فصلی و مخصوصا نقش آن در افزایش تجزیه بیولوژیکی

بوهالطرح‌دهی مختلفی برای حل انتقال پهنرفتی جهت ارزیابی قابلیت آن ها در مدل سازی

ضرایب پراکندگی عرضی پایین در میدان های جریان ناپایا مقایسه شدند . برای شبیه‌سازی جریان از

مدل MODFLOW برای مدل‌سازی انتقال واکنشی از مدل PHT3D استفاده گردید. مدل PHT3D

شبیه‌سازی انتقال سه بعدی MT3DMS را با مدل ژئوشیمیایی PHREEQC-2 کوپل می کند . چون

PHREEQC-2 به حل به طور همزمان هر دو واکنش های کنترل شده به صورت سینتیکی و

تعادلی است، مدل کوپل شده میتواند طیف وسیعی از مسائل انتقال واکنشی مخلوط شده تعادلی یا

سینتیکی را مخاطب قرار دهد. نتایج این شبیه‌سازی‌های چند مولفه‌ای نشان داد که نوسان فصلی آب

زیرزمینی باعث یک افزایش تجزیه بیولوژیکی می‌شود.

کلمنت و همکاران (Clement et al., 2002) داده‌های صحرایی منطقه سوپرفاند در لویزیانا آمریکا

را برای اثبات کاربرد پروتکل گزینشی^۳ رقیق‌سازی پایش شده بکار بردند . داده‌های مشخصه منبع

¹. Perth

². Superfund

³. Screening

نشان داد که ترکیبات اتن و اتان کلرینه آلاینده های اصلی مورد توجه هستند در اولین مرحله از فرآیند ارزیابی رقیق سازی طبیعی پایش شده، داده‌های صحرایی جمع آوری شده از عچاه نظارتی که در قسمتهای مختلف پلوم قرار گرفته بودند، برای کامل کردن یک تحلیل رتبه بندی تجزیه بیولوژیکی توصیه شده به وسیله پروتکل استفاده شدند در مرحله دوم یک مدل مفهومی تفصیلی برای شناسایی مسیرهای انتقال آلاینده و نقاط رخنمون یافته توسعه داده شد. مدل BIOCHLOR برای ارزیابی این که آیا آلاینده‌ها در یک نرخ قابل قبول در طول مسیرهای انتقال رقیق سازی طبیعی می شوند، به طوری که رقیق سازی طبیعی پایش شده را بتوان به عنوان یک گزینه بهسازی ممکن برای سایت در نظر گرفت، استفاده شد. برای ارزیابی سینتیکی تجزیه بیولوژیکی یک مخلوط ترکیبات اتان و اتن کلرینه، باید ضرایب نرخ تجزیه در همبستگی با کسر مولی هر محصول بالقوه تولید شده از ترکیبات مادر مختلف در نظر گرفته شوند. چون در BIOCHLOR جریان یکنواخت فرض شده است، تنها یک سرعت یک بعدی متوسط می‌تواند در این مدل استفاده شود. با این حال، بر روی حوضه مدل شده، توزیع افت آب زیرزمینی به طور غیر خطی تغییر خواهد کرد. مخصوصاً نزدیک مرز ناپایدار پایین دست نزدیک به رودخانه می‌تواند سی‌سی‌پی (پی‌بنابراین، تخمین سرعت متوسط استفاده شده در این مطالعه متعاند فقط شرایط انتقال نزدیک به منبع را منعکس کند. این محققین پیشنهاد کردند که استفاده از یک مدل عددی تفصیلی انتقال واکنشی همچون 3D RT3D همراه با یک مدل جریان ناپایا بر اساس مدل MODFLOW به اجرای شبیه سازی‌های واقعی‌تر تحت شرایط انتقال واکنشی ناپایا و کوپل شده کمک خواهد کرد.

پرچتل و همکاران (Prechtel et al., 2002) اثر یک حامل مانند DOC بر تحرک یک هیدروکربن پلی‌سیکلواروماتیک (PAH)¹ نام پنازین در زمین های لایلی را تحت شرایط پایا و ناپایای جریان در منطقه اشباع نشده به صورت عددی مطالعه کردند. اثر تسهیل حامل به وسیله کربن آلی محلول در مدل تأکید و ادغام گردید. یک مدل عددی جریان و انتقال برای درک و کمی‌سازی فرآیندهای مربوط

¹. Polycyclic Aromatic Hydrocarbon

به حالتی که یک ترکیب آلی آب گریز به شدت جاذب که مستعد تسهیل حامل در منطقه اشباع نشده است، بکار برده شد. این محققین مدل‌های کنابر و همکاران^۱ و توتچ و همکاران^۲ در ترکیب با معادله ریچاردز برای توضیح جریان آب اشباع نشده و انتقال DOC حامل و آلاینده بکار بردند برای حل مجموعه معادلات دیفرانسیل جزئی، یک ابزار شبیه سازی یک بعدی به نام RICHY که به زبان C در مؤسسه ریاضیات کاربردی دانشگاه ارلانگن - نیورمبرگ^۴ توسعه داده شده است، بکار برده شد. این نرم‌افزار راه‌هایی برای حل مسائل معادلات دیفرانسیل جزئی کوپل شده و منفرد مانند انتقال گرما، انتقال ماده حل شده، جریان آب اشباع شده و اشباع نشده یا انتقال آب متأثر شده از سورفکتانت فراهم می‌کند بنابراین، این کد قادر به شبیه‌سازی تنوعی از سناریوهای آلودگی آب زیرزمینی پیچیده شامل اثرات پهنرفت، پراکندگی، نفوذ و جذب جذب تعادلی و غیر تعادلی با ایزوترم های متداول (استوای توضیح انتقال تسهیل شده به وسیله حامل، دو مسأله انتقال کوپل گردید: یکی برای حامل و دیگری برای آلاینده. شبیه‌سازی‌ها اهمیت تسهیل حامل را نشان دادند.

گریب و همکاران (Gribb et al., 2002) منظور ارزیابی سطوح هدف ویژه سایت (SSTLs)^۵ در کارولینای جنوبی برای خاک‌هایی که ممکن است آلاینده ها را به آب زیرزمینی بشویند از مدل قابلیت لیچینگ خاک (SLM) استفاده نمودند. SLM اولین بار به وسیله مناتی و همکاران^۶ برای پیش‌بینی جریان و انتقال آلاینده‌ها از میان خاک اشباع نشده به آب زیرزمینی در سایه‌های آلوده شده به نفت پیشنهاد گردید. SLM مجموعه‌ای از معادلات تحلیلی بر اساس معادله گرین و آمپت^۸ است که برای پیش‌بینی نرخ‌های تراوش توضیح جزءبندی تعادلی و تجزیه بیولوژیکی مرتبه اول آلاینده استفاده می‌شود. منظور کاهش هزینه ها، بیشتر ورودهای مربوط به ویژگی خاک در مدل با استفاده از

^۱. Knabner et al

^۲. Totsche et al

^۳. Richards equation

^۴. Erlangen-Nuremberg

^۵. Site-Specific Target Levels

^۶. Soil Leachability Model

^۷. Menatti et al

^۸. Green and Ampt

معادلات رگرسیون که طبقه بندی بافتی را با این ویژگی‌های فیزیکی مربوط می سازد، تخمین زده شدند. به تعین اثر تغییرپذیری پارامتری بر سطوح هدف ویژه سایت آلاینده های بنزن و نفتالین که برای سه نوع خاک و دو عمق آب زیرزمینی محاسبه شده بود، آنالیز حساسیت انجام گرفت.

ون گیل و روی (Van Geel and Roy., 2002) برای توسعه یک مدل مفهومی برای اشباع باقی مانده NAPL در منطقه اشباع نشده باقی می ماند، چندین آزمایش دو و سه فازی در سلول های فشار انجام دادند. آنها نتایج این آزمایشات را جهت ارزیابی اشباع باقی مانده NAPL و آثار آن بر روی رابطه فشار اشباع ارائه دادند. این محققین مدلی را برای ادغام یک مولفه اشباع باقی مانده NAPL در یک مدل پارامتری سه فازی پسماند موجود که توسط پارکر و لنهارد^۱، لنهارد و پارکر و لنهارد توسعه داده شده بودند، را پیشنهاد کردند. مدل آنها برای ادغام یک مولفه اشباع باقی مانده NAPL از نظر شکل، مشابه مدل به تله اندازی پیشنهاد شده به وسیله پارکر و لنهارد بر اساس رابطه ارائه شده به وسیله لند^۲ بود این محققین نتیجه گرفتند که لحاظ یک مولفه باقی مانده NAPL در یک مدل پیش بینی کننده بر توزیع NAPL زیر سطح اثر خواهد داشت. تشکیل یک اشباع باقی مانده NAPL در منطقه اشباع نشده، یک فرآیند مهم برای شامل شدن در رو ابط متشکله پسماند برای مدل سازی جریان چند فازی است.

اوستروم و همکاران (Oostrom et al., 2003) استفاده از آزمایشات ستونی یک بعدی و سلول جریان دو بعدی اثبات کردند که NAPL ناپیوسته و باقی مانده در محیط های متخلخل دانه ریز و دافوشت طی جریان NAPL تشکیل خواهد شد. آزمایشات ستونی و سلول جریان با استفاده از کد STOMP شبیه سازی شدند. کد تفاوت محدود است در این کد تشکیل NAPL ناپیوسته باقی منطقه هوادار به واسطه رفتار غیر پراکندگی و اصلاحات حاشیه مویینه در

¹. Parker and Lenhard

². Land

نتیجه تغییرات کشش بین سطوح فاز گازی -آید در نظر گرفته نشده است . STOMP یک ضریب پراکندگی صفر را فرض می کند به طوری که وقتی DNAPL پیوسته در سیستم سه سیالی حاضر باشد، همیشه بین فازهای آبی و گازی واقع خواهد شد و پیوستگی در انتقال از سیستم دو سیالی به سه سیالی و بالعکس را تضمین می کند. نتایج شبیه سازی ها با شبیه ساز STOMP کمبودهای مدل های تراوایی نسبی-اشباع-فشار مویینه ($k-S-P$)¹ فعلی که تشکیل اشباع های باقی مانده در شرایط اشباع نشده را ممکن نمی سازند، را نشان می دهد.

پرومر و همکاران (Prommer et al., 2003) کار تحقیقی خود روی فرآیندهای فیزیکی، بیوشیمیایی و واکنشی کنترل کننده تحول هیدروکربن ها و مدل سازی عددی تحول هیدروکربن های نفتی در آب های زیرزمینی بحث کردند. آن ها مراحل یک که غالباً در مدل سازی عددی محلی آلوده شده به هیدروکربن های نفتی درگیر هستند را به همراه یک مثال شرح دادند . همچنین این محققین لیستی از ابزارهای مدل سازی، ابزارهای پیش پردازش و ابزارهای تخمین پارامتری را که معمولاً بیشتر استفاده می شوند را ارائه دادند.

کوسیسی و همکاران (Koussis et al., 2003) قابلیت انجام فرض واکنش لحظه ای در مدل سازی انتقال هیدروکربن ها و اکسیژن در یک سیستم هیدروژنولوژیکی همراه با واکنش های بیولوژیکی را با انجام شبیه سازی عددی اصلاح نمودن اکسیژن به عنوان عامل محدود کننده در نظر گرفته شد و از جذب هیدروکربن چشم پوشی شد. آن ها با استفاده از آنالیز تئوری متغیرهای بدون بعد و مدل سازی عددی، یک معیار کمی برای تعیین دامنه اعتبار تقریب واکنش لحظه ای در مقابل سینتیک های تجزیه بیولوژیکی را به دست آوردند همچنین این محققین بیان داشتند که مدل BIOPLUME II فرض کندمیک تجزیه بیولوژیکی با حضور محدود اکسیژن به صورت یک واکنش لحظه ای رخ می دهد . تحت شرایط حاکم، شبیه سازی های عددی آن ها تأیید کرده اند که مفهوم BIOPLUME برای بیشتر

¹. Permeability- Saturation- Capillary Pressure

کاربردها مناسب است. مدل سازی سینتیکی احتمالاً فقط در موارد به سازی بیولوژیکی فعال با سرعت های بالا (مثلاً نزدیک چاه های در حال پمپاژ) و برای فواصل کوتاه از منبع لازم می شوند.

خان و طاهر حسین (Khan and Tahir Husain., 2003) در مورد روش نسبتاً جدید پیشنهادی برای رقیق سازی طبیعی پایش شده مبنی بر ریسک (RBMNA)^۱ بحث کردند این روش شامل ۳ مازول بهم پیوسته می باشد. مازول ۲ بر روی تحول و انتقال آلاینده و رقیق سازی طبیعی آن تمرکز می کند. مدل سازی تحول و انتقال آلاینده مهم ترین مرحله روش RBMNA است و انتقال آلاینده در خاک و آب زیرزمینی و رقیق سازی آن به واسطه فرآیندهای رقیق سازی، تبدیل، تجزیه و جذب مدل می گردانند. محققین منطقه آلوده شده را به یک منطقه اشباع نشده و یک منطقه اشباع شده تقسیم کردند. مدل سازی و شبیه سازی طور مستقل برای هر منطقه انجام شد این محققین مدل های مختلف موجود را ارزیابی کردند و نتیجه گرفتند که مدل SESOIL برای مدل سازی منطقه هوادار بالای سطح ایستابی آب های زیرزمینی مناسب تر است. مهاجرت آلاینده از طریق لیچینگ، تبخیر و تعریق و تبادل یونی در مدل سازی منطقه هوادار مطالعه شد. آن ها برای مدل سازی منطقه اشباع شده از مدل AT123D برای شبیه سازی تجزیه بیولوژیکی از مدل های BIOPLUM III و BIOSCREEN استفاده نمودند. روش در ارزیابی یک سایت آلوده به مواد هیدروکربنی به وسیله نشت از یک تانک ذخیره سوخت زیرزمینی استفاده شد. این مطالعه نشان داد که رقیق سازی طبیعی در این سایت موثر است. آن ها یک ارزیابی مقایسه ای برای دو ابزار مدل سازی رقیق سازی طبیعی به نام های BIOPLUM III و BIOSCREEN ارائه دادند.

جلالی و همکاران (Jellali et al., 2003) آزمایشی کنترل شده در یک مدل سفره مصنوعی سه بعدی بزرگ جهت کمی کردن انتقال جرم ترکیبات آلی (TCE) منطقه اشباع نشده و سطوح مشترکش (امسفر و آب زیرزمینی) انجام دادند و پروفیل های غلظت های TCE در حاشیه موینه را به

^۱. Risk Based Monitored Natural Attenuation

دست آوردند. بکارگیری راه حل تحلیلی جانسون و پانکو^۱ برای داده‌های غلظت بخار اندازه‌گیری شده، یک تخمین مناسب برای انتقال جرم منطقه اشباع نشده آب زیرزمینی را فراهم کرد. مقدار اندازه‌گیری شده جریان TCE اتمسفر در سفره مصنوعی با مقدار محاسبه شده آن به وسیله مدل تحلیلی در تطابق خوبی بودند که نشان می‌دهد که این انتقال جرم لاسبله وسیله نفوذ مولکولی کنترل می‌شود. چنین سناریوی که در آن منبع DNAPL نزدیک خاک است، تلفات اتمسفری یک مکانیزم مهمی را برای رقیق سازی پلوم بخار تشکیل می‌دهد و همچنین به طور قابل ملاحظه ای پتانسیل آلودگی آب زیرزمینی را کاهش می‌دهد. روشی نیمه تجربی برای تعیین انتقال جرم TCE بین منطقه اشباع نشده و اتمسفر با بکارگیری قانون اول فیک استفاده شد به منظور تعیین تئوریک جرم انتقال یافته از منطقه اشباع نشده به آب زیرزمینی و فلاکس متناظر آن، حل تحلیلی گراس هل^۲ بکار برده شد.

اولیوریا و دموند (Oliveriva and Demond., 2003) قابلیت هشت مدل STONE I, STONE II, Brooks – Corey – Burdine Baker, Hustad – Hansen, Delshad – Pope, Parker – Lenhard, و DiCarlo – Sahni – Blunt جهت پیش‌بینی ضرایب نفوذپذیری نسبی زهکشی برای نفت در یک سیستم سه فازی (آب، نفت و هوا) را ارزیابی کردند. این مطالعه نشان داد که مدل‌های موجود برای ضریب نفوذپذیری نسبی سه فازی تخمین‌های مختلفی را نتیجه دادند که به نوبه خود می‌تواند تأثیر مهمی بر شبیه‌سازی انتقال مایعات آلی در منطقه هوادار داشته باشد. همچنین محاسبات نشان داد که تفسیرهای مختلف مدل‌ها و اصلاحات فنی همراه با آن‌ها می‌تواند به طور قابل ملاحظه ای پیش‌بینی‌ها را متأثر کند. بنابراین، با توجه به انتخاب و تفسیر مدل ضریب نفوذپذیری نسبی سه فازی، ممکن است خطای قابل ملاحظه‌ای در شبیه‌سازی‌های انتقال مایع آلی در منطقه هوادار حاصل شود.

^۱. Jahnson and Pankow

^۲. Grathwohl

ایسید و همکاران (Essaid et al., 2003) انحلال و تجزیه بیولوژیکی BTEX را در یک منطقه نشت نفت خام نزدیک شهر بمیدجی^۱ در کشور بلترامی^۲ ایالت مینسوتای آمریکا مدل سازی نمودند. این محققین از کد انتقال یک ماده محلول با لحاظ تجزیه بیولوژیکی تحت عنوان BIOMOC در اتصال با کد مدل سازی معکوس جامع JCODE^۱ برای تخمین انحلال و تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن ها استفاده نمودند. BIOMOC مدل دو بعدی واکنشی چند گونه ای انتقال ماده محلول شامل فرآیندهای تجزیه بیولوژیکی و غیر بیولوژیکی زنجیره ای است. مدل BIOMOC برای مقاصد عمومی طراحی شده و انعطاف پذیر است. واکنشهای تجزیه بیولوژیکی برای هر ترکیب الکترون دهنده والکترون گیرنده را شبیه سازی می کنند. واکنش تجزیه به وسیله سینتیک موند بیان می گردد، اما تقریب برای واکنشهای مرتبه اول و مرتبه صفر هم می تواند ایجاد شود. از کد کامپیوتری JCODE^۱ برای برآزش غلظت موجود پلوم آب زیرزمینی شهر بمیدجی استفاده شد. این کد رگرسیون غیر خطی را برای تخمین پارامتری به وسیله کمینهای یک تابع هدف حداقل مر بعات وزنی با استفاده از روش گوس-نیوتن اصلاح شده به کار می برد. مدل سازی معکوس وقتی موفق شد که فرآیندهای انتقال و تجزیه کوپل شده در مدل ادغام شدند و یک ضریب نرخ انحلال منفرد برای همه مولفه های BTEX استفاده گردید. نرخ تغذیه، هدایت هیدرولیکی، ضریب نرخ انحلال، نرخ های تجزیه غیر هوازی مرتبه اول مجزا BTEX و ضریب پراکندگی عرضی پارامترهای تخمین زده شده هستند.

کاراپاناگیوتی و همکاران (Karapanagioti et al., 2003) پندین کد کامپیوتری ارائه دادند که قادر به مدل سازی رقیق سازی طبیعی آلاینده های آلی فرار در منطقه اشباع نشده بودند. این محققین نقاط ضعف و کاربرد مدل ها را به طور تفصیلی شرح دادند. آنها بیان داشتند که تنها تعداد محدودی از این کدها نفوذ فاز گازی که از مکانیزمهای مهم انتقال ترکیبات آلی فرار است را در نظر می گیرند. بعلاوه، تنها تعدادی از این مدل ها شامل فرآیندهای واکنشی همچون تجزیه هستند و مخصوصاً فقط

^۱. Bemidji

^۲. Beltrami

یکی از آنها سینتیک غیر از مرتبه اول را برای تجزیه بیولوژیکی در نظر می گیرد. برخی از این مدل‌ها شامل جریان LNAPL هستند و فقط سه تا از این مدل ها فاز NAPL را به عنوان یک مخلوط به حساب می‌آورند و رفتار هر ترکیب را به صورت جداگانه مدل می کنند؛ طرف دیگر مدل‌هایی که شامل فرآیندهای واکنشی هستند تنها تعداد محدودی از ترکیبات را می‌توانند بکار ببرند. این محققین نتیجه گرفتند که تلاش‌های مدل سازی بیشتر برای غلبه بر نقاط ضعف این کدها نیاز است.

فرگوسن و کادوری (Ferguson and Kaddouri., 2004) یک چارچوب تئوری برای بررسی اثر درجه حرارت سطحی بر مراحل جذب و توزیع مجدد مایعات فاز غیر آبی سبک و سنگین ارائه دادند . آنها جریان سه فازی و انتقال آلاینده LNAPL را در یک محیط متخلخل غیر ایزوترمال به صورت یک سیستم ۶ معادله دیفرانسیل جزئی غیر خطی کوپل شده مدل کردند . در این مدل فرض شد که جریان کوپل شده آب، هوا، بخار آب و گرما از تئوری فیلپ و دی وریز^۱ تبعیت می‌کنند علاوه بر تبخیر و انحلال LNAPL که بر اساس تعادل محلی یا سینتیک مرتبه اول بودند، مدل نیروهای گرانی، گرانی و میوگی را نیز شامل می گردیلین مدل در مقابل چندین مسأله تحلیلی ایزوترمال و غیر ایزوترمال تست شد تطابق خیلی خوبی بین این مدل و راه حل‌های تحلیلی برای حالات یک بعدی و دو بعدی انتقال تابع زمان گرما حاصل شد . در مجموع، نتایج تحلیلی انتقال پایا در آب و گاز با و یا بدون تجزیه بیولوژیکی به خوبی حاصل شدند . جریان LNAPL و DNAPL لوده کننده سیستم به مقدار زیاد به وسیله درجه حرارت سطحی متأثر می‌شود. در این مدل از روش عددی اجزای محدود استفاده گردید.

فوفی (Phophi., 2004) در یک کار تحقیقی LNAPL ها و مکانیزم‌های انتقال آنها را در زیر سطح

زمین در نواحی شهری آفریقای جنوبی شرح دادند در این مطالعه چارچوبی برای کشف و ارزیابی LNAPL تحت شرایط آفریقای جنوبی ارائه گردید فوفی ریسک سلامتی ناشی از این آلاینده ها را نیز مورد بررسی قرار داد.

^۱. Philip and De Vries

سوگا و همکاران (Soga et al., 2004) با مرور مطالعات قبلی، کاهش واقعی NAPL از منابع تولید آلودگی و کارایی تکنیک های بازیافت استفاده شده در مناطق تحت مطالعه را بررسی کردند. هدف آنها از مرور مطالعات موردی اثبات این واقعیت بود که حذف کامل جرم NAPL محل منبع زیر سطحی به واسطه شرایط به تله اندازی پیچیده NAPL مخصوصاً DNAPL مشکل یا غیر ممکن است. بنابراین، ارزیابی کارایی تکنیک های بهسازی نباید به تنهایی بر اساس کاهش جرم NAPL به تله افتاده از منطقه منبع باشد. در عوض باید بر اساس کاهش ریسک انجام شده از طریق کاستن غلظت مولفهای حل شده ناشی از NAPL به تله افتاده طی پاکسازی منطقه منبع باشبرای این منظور عواملی که فلاکس جرمی ناشی از منطقه منبع تحت به سازی را کنترل می کنند، بررسی گردید. مدل سازی فلاکس جرمی با استفاده از یک شبیه ساز تفاوت محدود چند مولفگی به نام UTCHEM که در دانشگاه آستین¹ تکزاس تهیه شده است، انجام شد. نتایج اولیه شبیه سازی عددی نشان داد که عواملی همچون مورفولوژی منطقه منبع تعیین شده به وسیله ناهمگنی تشکیلات، رفتار انحلال بعد از به سازی را کنترل می کند و اثر ناچیزی بر انتقال جرم محلی دارد.

هام و همکاران (Ham et al., 2004) مدل تحلیلی دو بعدی جدیدی را ارائه دادند تا اثرات ضرایب پراکندگی طولی و عرضی بر طول ناپایا و پایای یک پلوم دستخوش یک واکنش دو مولکولی لحظی را بررسی نماید. این مدل فرض شد که اختلاط آلاینده های حل شده فقط از طریق پراکندگی طولی و عرضی رخ می دهد و واکنش بین اجزای حل شده فقط جایی که هر دو جسم به طور همزمان حاضر باشند اتفاق می افتد. به کمک یک مدل عددی تأیید شد که پراکندگی عرضی یک عامل مهم برای توسعه ناپایای پلوم است. به منظور اعتبارسنجی مدل، نتایج این مدل با نتایج مدل انتقال واکنشی RHT3D مقایسه گردید. RHT3D شبیه ساز انتقال MT3DMS را با مدل ژئوشیمیایی PHREEQC-2 برای شبیه سازی انتقال واکنشی در محیط های متخلخل اشباع شده ترکیب می کند.

¹. Austin

آلفنز و همکاران (Alfnes et al., 2004) ابزارهای شبیه‌سازی عددی را برای مطالعه فرآیندهای غالب طی انتقال هیدروکربن‌های آروماتیک در منطقه اشباع نشده خاک بکار بردند. این محققین مدل عددی SWMS-3D را برای انتقال در منطقه اشباع نشده توسعه دادند. از مشخصات مدل ادغام انتقال چند گونه‌ای کوپل شده، تجزیه میکروبی که از سینتیک موند پیروی می‌کند و انتقال هیدروکربن‌ها و نفوذ گاز اکسیژن می‌باشد. منحنی‌های رخنه (BTC) هیدروکربن که از آزمایش صحرایی حاصل شد برای تعیین پارامترهای جذب و سینتیک موند با استفاده از یک روش برازش استفاده شدند. فرض‌های لایه‌بازن استفاده شده در مدل منجر به انحرافات از مشاهدات صحرایی گردید علت اصلی اختلافات بین نتایج مدل و داده‌های صحرایی به کانال‌بندی حاصل از ناهمگنی‌های محلی همچون منافذ بیولوژیکی نسبت داده شد. همچنین این ناهمگنی‌های محلی انتقال اکسیژن و زمان باز داری را متأثر ساخت. آن‌ها پی بردند که برای مدل‌سازی معقول BTC برآیند جذب باید در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی کاهش داده شود. این محققین نفوذ اکسیژن را یک پارامتر بحرانی در مدل‌سازی عددی تشخیص دادند محدودیت اکسیژن در انتقال شبیه سازی شده به خوبی احساس شد. در حالی که این محدودیت در آزمایش صحرایی مشاهده نشد نتایج نشان داد که پیچیدگی انتقال واکنشی در منطقه اشباع نشده، استفاده از پارامترهای تعیین شده تحت شرایط آزمایشگاهی را برای توصیف فرآیندهای مقیاس صحرایی مشکل می‌سازد. سازگاری موضوع مخصوصاً در مورد پارامترهای جذب و سینتیک موند دارای اهمیت است.

ریفای و ریتالر (Rifai and Rittaler., 2005) چندین روش را برای تحلیل داده‌های رقیق سازی و تخمین پارامتری و خلاصه کردن داده‌های صحرایی جمع‌آوری شده جهت توسعه مدل‌هایی که به طور مناسب شرایط سایت را نمایش دهند، ارائه دادند. این محققین از مدل تحلیلی BIOSCREEN و مدل عددی BIOPLUME III برای مدل‌سازی رقیق‌سازی طبیعی در یک سایت آلوده به گازوئیل استفاده

¹. Breakthrough Curve

نمودند. مدل BIOSCREEN یک ابزار گزینشی برای شبیه سازی رقیق سازی طبیعی هیدروکربن های نفتی در آب زیرزمینی است . این مدل بر اساس راه حل تپلج دمنیکو بوده و شامل سینتیک تجزیه مرتبه اول برای ماده حل شده می باشد. راحل دمنیکو جریان آب زیرزمینی را با استفاده از یک سطح قائم با نفوذ کامل که بر جریان آب زیرزمینی عمود است، با لحاظ ایزوترم خطی برای فرآیند جذب و پراکندگی سه بعدی شبیه سازی می کند. مدل BIOSCREEN تعداد محدودی متغیرهای ورودی احتیاج دارد که شامل سرعت تراوش، ضریب پراکندگی (طولی، عرضی و جانبی)، ضریب تأخیر، پارامترهای تجزیه بیولوژیکی و متغیرهای منبع هستند. متغیرهای تجزیه بیولوژیکی شامل تخمین نرخ تجزیه بیولوژیکی به هنگام استفاده از یک فرآیند مرتبه اول یا فراهم ساختن ظرفیتهای الکترون گیرنده به هنگام استفاده از فرض واکنش لحظه ای است. منبع به صورت نامحدود یا تخریب شونده فرض می شود. شلین مدل، هندسه منبع را در سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت یک سطح با عمق و عرض معلوم عمود بر جهت جریان آن فرض می کند. غلظت منبع میتواند در میان عرض تعیین شده منبع تغییر کند اگر چه مدل نسبتاً ساده است، ولی برخی پیچیدگی های مربوط به تخمین پارامترهای تجزیه بیولوژیکی و منبع با استفاده از داده های سایت را شامل می شود.

BIOPLUME III یک مدل دو بعدی تفاوت محدود برای شبیه سازی تجزیه بیولوژیکی هوازی و غیر هوازی هیدروکربن های آب زیرزمینی همراه با فرآیندهای پهنرفت، پراکندگی، جذب و تبادل یونی است. این مدل امکان شبیه سازی تجزیه بیولوژیکی با سه عبارت سینتیک مختلف شامل تجزیه مرتبه اول، واکنش لحظه ای و سینتیک موند وجود دارد. BIOPLUME III به یک مرحله کالیبراسیون جریان احتیاج دارد که به وسیله آن سطوح آب زیرزمینی مشاهده شده با استفاده از تخمین هدایت هیدرولیکی و گرادیان هیدرولیکی در میان سایت پیش بینی می شود. چون مدل سازی دو بعدی است بیشتر پارامترها به طور فضایی می توانند متغیر باشند. بنابراین پیچیدگی بیشتری در طراحی شبکه و تخمین پارامتری ملاحظه می شود. این مدل استفاده از چندین دوره پمپاژ با تعیین یک منبع متغیر دورلهی را ممکن می سازد. بنابراین، کاربران را به شبیه سازی حفاری و دیگر فعالیتهای بهسازی

قادر می سازد در هر دو روش، تجزیه بیولوژیکی به صورت یک فرآیند تجزیه مرتبه اول مدل گردید .
 مدلهای کالبره شده و تأیید شده سایت برای پیش بینی زمان پلکازی مورد نیاز با استفاده از
 رقیق سازی طبیعی استفاده شدند مطالعه نشان داد که هنوز مشکلاتی در تخمین نرخ های تجزیه
 بیولوژیکی صحرایی و توسعه تخمین ها برای پارامترهای منبع مورد نیاز مدلهای رقیق سازی طبیعی
 وجود دارد.

فالتا و همکاران (Ealta et al., 2005) مدل انتقال آلاینده نیمه تحلیلی جهت ارزیابی اثرات
 تهمیزی بخشی جرم در منطقه منبع DNAPL را ارائه دادند. راهلهای تحلیلی که توسط این
 محققین برای توصیف تخلیه تابع زمان آلاینده از یک منطقه منبع DNAPL ارائه شده است، به عنوان
 یک شرط مرزی جریانی در مدل انتقال شامل فرآیندهای پهنرفت پراکندگی واکنشی با تخریب
 زنجیره مرتبه اول استفاده شدند . آنها مدل های ساده را برای توصیف منطقه منبع و پلوم بکار
 بردند. این راه های تحلیلی یک رابطه نمایی بین غلظت منبع و جرم منبع DNAPL فرض می کنند،
 که در آن توان تجربی تابعی از ناهمگنی میدان جریان، ساختار DNAPL و همبستگی بین آنهاست .
 عبارتهای شدت منبع DNAPL می توانند به سازی بخشی منبع را در زمان صفر یاد زمان کمی بعد
 از رهاسازی DNAPL توضیح دهند مدل انتقال، فرآیندهای پهنرفت، تأخیر، پراکندگی سه بعدی و
 تخریب/تولید زنجیره مرتبه اول را برای چندین گونه در نظر می گیرد. راهحل نیمه تحلیلی جدید با
 حل تحلیلی یک بعدی ون گنوچتن و آلوز¹ برای حالت $C_s(t) = C_0$ و همچنین با نتایج حاصل از مدل
 BIOCHLOR مقایسه شد . $C_s(t)$ و Q_0 ترتیب عبارتند از غلظت منبع و غلظت اولیه آلاینده در
 محیط مورد بررسی.

کریستوفرسن و همکاران (Christophersen et al., 2005) روی یک منبع هیدروکربنی مستقر
 در ناحیه هوادار یک سفره آزاد ماسله نسبتاً همگن در یک منطقه پایگاه هوایی دانمارک آزمایش

¹. Van Genuchten and Alves

صحرائی انجام دادند . مجموعه دادهای به دست آمده برای اعتبارسنجی مدل‌های ریاضی انتقال و رقیق‌ری ترکیبات آلی فرار در منطقه اشباع نشده استفاده شدند . یک مدل ریاضی شعاعی دو بعدی شامل فرآیندهای نفوذ هیدروکربن‌ها در هوای منفذی و جذب هیدروکربن‌ها در خاک توانست نتایج صحرائی اندازه گیری شده برای ۶روز اول آزمایش را به طور موفقیت‌آمیزی شبیه‌سازی کند . در این مطالعه، کد R-UNSAT برای شبیه سازی رقیق‌سازی آلایندهای فرار در منطقه غیر اشباع استفاده مدل قبلی از آزمایش به عنوان یک راهنما برای طراحی شبکه نمونه برداری و استراتژی نمونه‌گیری و بعد از آزمایش، برای شبیه‌سازی هفته اول مهاجرت بخار به دنبال استقرار منبع هیدروکربن استفاده شهدل شامل نفوذ و جذب فاز گازی و آبی بود. تجزیه بیولوژیکی به صورت یک فرآیند مرتبه اول در فاز آبی فرض شد و به عنوان عبارت مصرف معرفی گردید.

باسو و همکاران (Basu et al., 2006) با استفاده از روش فلاکس‌تر غیر فعال (PEM)^۱ در یک سری چاه در امتداد یک برش طولی که تقریباً از میان خط مرکزی یک پلوم تری کلرواتیلن (TEC) در یک کارخانه صنعتی در میدوسترن^۲ آمریکا می‌گذرد، جریان‌های آب زیرزمینی و آلاینده را اندازه‌گیری کردند. هدف طراحی بر اساس فلاکس یک سیستم به‌سازی، کاهش تخلیه آلاینده در پایین دست منبع آلودگی تا یک سطح قابل قبول جهت دستیابی به اهداف کاهش ریسک مناسب است . آنها از غلظت‌های TEC پلوم برای تخمین ثابت های نرخ تجزیه با استفاده از روش خط مرکزی و تکنیک تخلیه جرم استفاده کرد. این محققین بیان کردند که هر دو این تخمین ها بر تعداد زیادی از فرضیات استوار هستند با این حال تکنیک تخلیه جرم مناسب تر است. زیرا در این روش تغییرپذیری فضایی تشریح می‌گردد و مجموعه‌ای از داده های بزرگتر در نظر گرفته می‌شود. شایع به دست آمده قابلیت رقیق‌سازی طبیعی قابل توجه ای با یک مجموعه پیچیده فرآیندهای بیوژئوشیمیایی که ممکن است در یک پلوم رخ دهند، را نشان دادند.

^۱. Passive Flux Meter

^۲. Midwestern

مائیر و گراس هل (Maier and Grathwohl, 2006) با استفاده از مدل سازی های عددی یک و دو بعدی در سفرهای همگن اندازه پلوم های حالت پایا را ارزیابی کردند. در این مطالعه ضرایب پراکندگی متوسط و ویژگی های جریان در مقیاس سفره برای اجرای مدل سازی در حوزه های شبه همگن استفاده شدند. آشنایی حساسیت طول پلوم را در رابطه با سینتیک های تجزیه بیولوژیکی، سرعت جریان، ضریب پراکندگی عمودی عرضی، هندسه منبع و سفره و استوکیومتری واکنش بررسی کردند. نتایج نشان دادند که برای بیشتر ترکیباتی که به آسانی قابل تجزیه بیولوژیکی می باشند، مخلوط شدگی و اپکندگی عرضی در عوض سینتیک های واکنش، عامل محدود کننده برای رقیق سازی طبیعی است. بنابراین، با معلوم بودن ضریب پراکندگی عرضی، هندسه سفره و منبع و غلظت های الکترون گیرنده ها و الکترون دهنده طول پلوم آلاینده تحت شرایط پایا پیش بینی شد. آنالیز حساسیت نشان داد که پراکندگی طولی دارای اهمیت کمی برای اختلاط واکنش دهنده های بیوژئوشیمیایی در پلوم های آب زیرزمینی در حالت پایا است. شبیه سازی عددی دو بعدی با استفاده از دو روش مفهومی زیر انجام شد. شبکه مدل منطقه اشباع شده با رشد میکروبی با استفاده از کد اجزای محدوده BIONAPL و یک مدل با نرخ های واکنش ثابت که جریان را به طور بخشی اشباع در نظر می گیرد و بنابراین یک مدل واقعی از سطح آب زیرزمینی به عنوان منبع اکسیژن ارائه می دهد. برای این مدل کد حجم محدود MIN3P استفاده شد. مدل یک بعدی تفاوت محدود DR برای شبیه سازی حالت پایا بکار رفت. مدل زمان محاسباتی را به طور بالقوه کاهش می دهد و تعداد بیشتری از شبیه سازی ها را در نظر می گیرد.

هوهنر و همکاران (Hohener et al., 2006) استفاده از یک منبع سوخت که در یک خاک ماله اشباع نشده قرار داده شده بود ضرایب نرخ تجزیه بیولوژیکی هوازی ۱۳ هیدروکربن نفتی فرار را تخمین زدند. آنها از یک مدل انتقال واکنشی تحلیلی برای تخمین ضرایب نرخ تجزیه بیولوژیکی مرتبه اول ظاهری استفاده نمودند. همچنین دو مدل عددی واکنشی MOFAT و MIN3P برای شبیه سازی مهاجرت نفوذی بخارات ترکیبات آلی فرار و برای تخمین ضرایب نرخ تجزیه استفاده

گردیدند. کد MOBAT مجزای محدود دو بعدی برای جریان چند فازی و انتقال چند مولفه‌ای است. مدل MIN3P کد انتقال واکنشی چند مولفه ای سه بعدی است. این کد فرآیندهای تجزیه بیولوژیکی را با واکنش های ژئوشیمیایی ترکیب می کند. این مدل ویژگی‌های ترکیب، شرایط خاک و هوا را به عنوان پارامترهای ورودی دریافت می کند. برای نرخ بیولوژیکی با استفاده از دو سیستم آزمایشگاهی کوچک مقیاس^۱ ستون آزمایشگاهی تکمیلی تخمین زده شد هدف اصلی مطالعه، بررسی این واقعیت بود که آیا نرخ تجزیه بیولوژیکی صحرایی و دانه‌های نرخ حاصل از آزمایشگاه قابل مقایسه هستند؟

بیر و همکاران (Beyer et al., 2006) استفاده از روش سفره مجازی، عدم قطعیت در تخمین طولی پلوم آلاینده در سفره های ناهمگن را ارزیابی نمودند . تمرکز اصلی این کار بر تأثیر نرخ تجزیه بر طول های پلوم بود. پلوم‌های آلاینده در میدانهایی با قابلیت هدایت دو بعدی ناهمگن و در معرض سینتیکهای تجزیه مرتبه اول و میکائیل - منتن^۲ (MM) وسیله روش خط مرکزی بررسی گردید . یک بررسی مونت کارلو نشان داد که ثابت نرخ تعیین شده به شدت غیر قطعی است وقتی پلوم در معرض سینتیکهای تجزیه MM وسیله یک قانون نرخ مرتبه اول بررسی گردید، یک خطای اضافی در نتایج وارد شد و عدم قطعیت افزایش یافت این محققین به منظور تعیین پارامترهای MM به وسیله داده‌های خط مرکزی برای پلوم های با سینتیک تجزیه MM از روش رگرسیون استفاده کردند . طول پلوم محاسبه شده با استفاده از پارامترهای MM مقایسه با تقریب مرتبه اول به طول واقعی پلوم نزدیک تر بود این مطالعه معادلات جریان و انتقال به وسیله کد شبیه سازی اجزای محدود GeoSys/RockFlow حل گردید.

¹. Microcosm

². Michaelis-Menten

آتیا و گیولوت (Atteia and Guillot., 2007) یک تکنیک مدل‌سازی تحلیلی جدید به نام MIKSS^۱ را برای پیش‌بینی تجزیه کنترل شده هسته و حاشیه پلوم BTEX و پلوم‌های حلال‌های کلرینه و محاسبه طول پلوم ارائه دادند. این استراتژی امکان محاسبه غلظت‌های همه مواد واکنش دهنده در یک پلوم را فراهم می‌سازد. روش مذکور یک توسعه اصل بر هم‌نهی^۲ است که قادر به عمل همزمان واکنش‌های سینتیکی و واکنش‌های اسه‌م‌چنین این محققین عوامل کنترل کننده اندازه پلوم‌های BTEX و حلال‌های کلرینه را تحت شرایط رقیق‌سازی طبیعی شناسایی نمودند.

کاپیرو و همکاران (Capiro et al., 2007) انتقال اتانول قابل سوخت و اثرش بر آب زیرزمینی را در یک تانک سفره با مقیاس پایلوت بررسی کردند. آنها آزمایشات کوچک مقیاس آزمایشگاهی را برای مشاهده رفتار تری^۳ شده در سطح آب زیرزمینی در سیستم جریان پایا انجام دادند. همچنین این محققین از یک تانک جریان پیوسته ۸۱۱۵۰ لیتری برای انجام یک مطالعه کمی رهاسازی اتانول استفاده نمودند. آنها مهاجرت اتانول و ردیاب برومید را با هم مقایسه نمودند. همچنین با استفاده از داده‌های مغزه خاک در پایان آزمایش (پس از ۶۰ روز) شواهدی را مبنی بر محدود شدن جریان E95 در بخش‌های اشباع شده منطقه مویینه تأیید کردند.

فاگرلوند و نییمی (Fagerlund and Niemi., 2007) روشی به طور بخشی کوپل شده (PCFF)^۳ را برای مدل‌سازی پخش و مهاجرت مخلوط گازوئیل در زمین و با در نظر گرفتن طبیعت چند فازي آن پیشنهاد کردند. روش امکله‌د متی‌ضمن مهاجرت مخلوط گازوئیل در زمین و با در نظر گرفتن فرآیندهای انحلال در فازهای آبی و گازی، تبخیر و پخش، اجزای مختلف آن همچون بنزن و تولوئن به صورت جداگانه مطالعه شود. آنها آلاینده‌های با ویژگی‌های مشابه با یکدیگر را در هشت بخش گروهبندی کردند. فرض بر این است که بخش‌ها وقتی که در فازهای آبی و گازی حضور دارند مستقل

^۱. Mixed Instantaneous and Kinetics Superposition Sequence

^۲. Superimposition

^۳. Partially Coupled Fraction-by-Fraction

از یکدیگرند، اما وقتی که به صورت NAPL می‌باشند، به صورت یک مخلوط رفتار می‌کنند. مهاجرت هر بخش در فازهای آبی و گازی با در نظر گرفتن فرآیند جذب، به صورت جداگانه با استفاده از مدل جریان تک مولفه‌ای چند فازی T2VOC مدل می‌شود، در حالی که حرکت فاز آزاد گازوئیل اساساً برای همه بخش‌ها یکسان است. امکان به روز رسانی ترکیب فاز آزاد گازوئیل در فواصل زمانی معین، مدل‌سازی به صورت مرحله ای انجام می‌شود. مورد نظر به وسیله مقایسه آن با یک شبیه‌سازی عددی کاملاً کوپل شده چند فازی چند مولفه ای تحت عنوان TMVOC در شبیه‌سازی یک سناریو شاخص نشت گازوئیل در اثر تصادف تانکر حامل آن در شمال سوئد ارزیابی شد. اگر چه روش PCFF شامل یک سری ساده هلمهت، اما این روش یک بهبود قابل ملاحظه در مقایسه با مدل‌سازی سازندهای گازوئیل به طور کاملاً مجزا و یا به عنوان یک مخلوط منفرد به وجود آورد. این روش احتمالاً مستقیم‌تر برای مواردی با پهنرفت شدید قابل استفاده نمی باشد. شبیه‌سازی T2VOC تجزیه بیولوژیکی تنها با یک فرآیند تخریب مرتبه اول نمایی است، که این یک محدودیت است. یک فرض اساسی این روش مدل‌سازی آن است که در فازهای آبی، گازی و جامد رفتار هر بخش گازوئیل به حضور دیگر سازنده ها وابسته است. به هنگام مدل‌سازی یک به یک هر بخش، دیگر بخش‌ها به صورت غایب در همه فازهای دیگر به غیر از فاز آزاد گازوئیل رفتار می‌شوند. در فاز آبی دیگر بخش‌ها به صورت آب و در فاز گازی به صورت هوا به حساب آورده می‌شوند. این موضوع اثرات کمی بر ویژگی‌های ترموفیزیکی این فازها دارد که سبب برخی از محدودیت‌ها برای روش می‌شود. این مطالعه، جذب سطحی به فاز جامد به صورت خطی اجرا می‌شود، اما روش PCFF قابلیت اجرای مدل‌های دیگر جذب سطحی را نیز دارد. یک محدودیت روش آن است که در نظر گرفتن اثرات رقابتی بین بخش‌های شیمیایی مختلف مشکل است و می‌تواند اثرات زیادی دست کم بر روی نرخ‌های تجزیه بیولوژیکی داشته باشد. در چنین مواردی PCFF می‌تواند برای ارزیابی ریسک کوتاه مدت با انجام پیش‌بینی بدترین سناریو ممکن استفاده شود. برای پیش‌بینی‌های بلند مدت مهاجرت آلاینده بعد از نشت در رابطه با حادثه، مدل PCFF می‌تواند برای بخش اولیه سناریو

در حالتی که NAPL شدت متحرک است، استفاده شود سپس وقتی که NAPL غیر متحرک شود، خروجی مدل برای ایجاد یک شرط اولیه استفاده می شود که می تواند با یک مدل تک فازی بکار گرفته شده تا فرآیندهای فاز آبی را بهتر توجیه نماید.

ونسلیدز و همکاران (Vencelides et al., 2007) نقش بالقوه چرخه آهن بر روی یک منطقه شدیداً آلوده با ترکیبات هیدروکربن نفتی را مدل سازی کردند. این آلودگی از نشتیهای متعدد و گسترده از یک محل ذخیره سازی ترکیبات هیدروکربن نفتی به داخل سفره کواترنری نزدیک رودخانه لیب^۱ در جمهوری چک ناشی شد. بر اساس نتایج اولیه حاصل از مدلسازی معکوس ژئوشیمیایی، مدل سازی انتقال واکنشی چند مولفه عنوان یک ابزار مهم برای کمی سازی و توصیف فرآیندهای بیوژئوشیمیایی حاکم استفاده شد.

به عنوان اولین مرحله مدل سازی، این محققین از روش مدلسازی معکوس ژئوشیمیایی برای تعیین مدل های واکنش و فرآیندهای انتقال جرم استفاده نمودند. در مرحله بعد، مدلسازی دو بعدی پیشرو انتقال واکنشی چند مولفه ای انجام شد تا فرآیندهای اصلی که تکامل ژئوشیمیایی در منطقه را کنترل می کنند و برای توصیف موازنه جرم الکترون گیرندها لازم می باشند، ارزیابی گردند. مدل PHREEQC-2 برای مدلسازی معکوس ژئوشیمیایی استفاده شد این برنامه توانست مجموعه ای از واکنشی ژئوشیمیایی ممکن از لحاظ ترمودینامیکی را تعیین کند که می توانند تغییرات مشاهده شده در شیمی آب را بین دو نقطه که از نظر هیدرولیکی به هم مربوط بودند، توضیح دهند.

ساده ای انتقال واکنشی پیشرو برای یک مقطع عمودی در امتداد جریان انجام شد. جریان آب زیرزمینی در امتداد مورد نظر با نرم افزار MODFLOW محاسبه شد سپس میدان جریان شبیه سازی شده برای مدل سازی انتقال واکنشی با کد انتقال واکنشی چند مولفه ای PHT3D استفاده شد. مدل PHT3D شبیه ساز انتقال MT3DMS با برنامه ژئوشیمیایی PHREEQC-2 ترکیب می کند.

^۱. Labe

کیرپکا و والوچی (Cirpka and Valocchi, 2007) یک راجل تحلیلی را برای توجیه توزیع های

غلظت اجزای محلول و بیومس^۱ از روی توزیع غلظت یک ترکیب کانسرواتیو^۲ تحت شرایط پایا ارائه نمودند. این مدل از سینتیک موند دوگانه استفاده شده و دو مدل مختلف نیز برای توصیف تخریب بیومس ارائه گردید. اولین مدل تخریب بیومس، از یک ضریب تخریب مرتبه اول ثابت استفاده می کند. در حالی که مدل دوم فرض می کند که ضریب تخریب به غلظت الکترون گیرنده بستگی دارد. این محققین روش مذکور را برای یک حالت تزریق خطی در جریان یکنواخت دو بعدی بکار بردند. آنها عباراتی را برای انتقال بیواکنشی تحت شرایط پایا که توسط پدیده مخلوط شدن با پراکندگی عرضی کنترل می شوند، ارائه نمودند. کلیدی روش فوق این است که توزیع های غلظت بیواکنشی تحت شرایط پایا را همان بر اساس توزیع غلظت متناظر یک ترکیب کانسرواتیو بیان داشت. در این مطالعه، از پراکندگی طولی چشم پوشی شد و واکنش لحظه ای فرض گردید اگر فرد مدل ساز از تخریب وابسته به غلظت به جای تخریب خطی بیومس استفاده کند، مدل واکنش لحظه ای برای تقریب انتقال بیواکنشی مناسب تر است.

ساراوگلو و کوپتی (Sarioglu and Copt, 2008) مدل کوپل شده ژئوشیمیایی و انتقال را برای

شبیه سازی تجزیه بیولوژیکی پیشرفته^۳ هیدروکربن در یک سفره حاوی پیریت توسعه دادند که اثر بر pH تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن را ادغام می کنند. مدل برای ارزیابی حساسیت تجزیه هوازی هیدروکربن به محتوی پیریت و برای اثبات این که چگونه تغییر pH زیر سطحی می تواند با اثر پیریت مقابله کند و بدین طریق کارایی سیستم به سازی بیولوژیکی را افزایش دهد، استفاده گردید. معادله جریان آب زیرزمینی ناپایا و معادلات انتقال مربوط به همه گونه های متأثر کننده تجزیه

¹. Biomass

². Conservative

³. Enhanced

بیولوژیکی هیدروکربن با استفاده از یک الگوریتم تفاوت محدود کرنک - نیکلسون^۱ حل شداین مدل دو بعدی هم واکنش‌های سینتیکی و هم واکنش‌های تعادلی ژئوشیمیایی را شبیه‌سازی می‌کند.

میرتینن و همکاران (Myrntinen et al., 2009) یک مدل انتقال آلاینده اجزای محدود، دو بعدی تک لایه ای به منظور شبیه‌سازی یک پلوم متیل ترشیاری بوتیل اتر (MTBE) که چاه آب آشامیدنی اصلی در منطقه پاسکوگ در جزیره رهود در ناحیه نیوانگلند آمریکا را آلوده کرده بود، استفاده نمودند که عددی مورد استفاده Geosys/Rockflow بود که قادر به شبیه‌سازی کوپل شده جریان و انتقال می باشد بنابراین، نیازی به شبیه سازی انتقال و تحول MTBE کدهای جداگانه جریان آب و انتقال وجود نداشت. از روی داده‌های هیدروژئولوژی، شیمیایی و اطلاعات GIS موجود در منطقه مورد بررسی مدل‌سازی عددی انجام شد. آنها از مدل‌سازی جریان و انتقال هیدروژئولوژیکی برای شبیه سازی سناریوهای رهاسازی آلودگی ممکن و بی‌چگونگی تکامل یک پلوم MTBE استفاده کردند چون نرخ تجزیه بیولوژیکی ویژه MTBE در منطقه پاسکوگ مجهول بود، این عبارت به عنوان یک پارامتر برآزش استفاده گردید تجزیه بیولوژیکی MTBE به وسیله سینتیک مرتبه اول با یک ثابت نرخ تجزیه 10^{-6} s^{-1} تقریب زده شد که با نرخ‌های مشاهده شده تحت شرایط سایتهای مشابه تطابق دارد. در این بررسی، رقیق‌سازی طبیعی در رسوبات سایت مشخص شد.

قهرمانی تبار و همکاران (۱۳۸۷) مشکلات آلودگی ناشی از مصرف MTBE در دنیا و به خصوص ایران را بررسی کردند. همچنین علاوه بر این موضوع، حرکت MTBE همراه با جریان آب را در محیط متخلخل به کمک شبیه سازی رایانه‌ای و مهلهای آزمایشگاهی و با یاری جستن از تکنیک های هسته‌ای مطالعه نمودند این محققین از مدل ریاضی HYDRUS برای شبیه سازیهای اولیه استفاده

¹. Crank-Nicholson

². Pascoag

³. Rhode

کردند تا با گیرم‌ها و نتایج آن، یک مدل فیزیکی طراحی شود. مدل HYDRUS یکی از هایدرولیش‌رفته دو بعدی در ارتباط با حرکت آب، املاح و گرما در خاک می باشد که توسط سیمونک و همکاران (۱۹۹۶) آزمایشگاه شوری خاک آمریکا توسعه داده شده است. این مدل شامل حل عددی معادله ریچاردز برای بررسی حرکت آب در خاک و معادلات انتقال-نشار برای بررسی حرکت املاح و گرما در خاک است. این مدل قادر به شبیه‌سازی در شرایط اشباع و غیر اشباع در حالت افقی، عمودی و شعاعی بوده و توانایی تخمین خصوصیات فیزیکی خاک به روش معکوس را دارد. آنها برای شبیه‌سازی مدل هیدرولیکی از مدل ون گنوچتن^۱ -معلم^۱ استفاده نمودند. در این مطالعه، تطابق خوبی بین خروجی مدل فیزیکی و نتایج شبیه سازی به دست آمد که نشان داد ضرایب پراکندگی در نظر گرفته شده و ابعاد مدل فیزیکی اولیه مناسب بوده‌اند.

سلوکی و همکاران (۱۳۸۷)ی غیر قطعی را برای بهینه سازی مکانیابی ایستگاههای پایش کیفی آب زیرزمینی با هدف حداکثرسازی قابلیت اطمینان تشخیص پخش آلاینده‌ها از یک منبع آلودگی ارائه دادند در الگوریتم پیشنهادی، یک مدل بهینه سازی چند هدفه بر پایه الگوریتم ژنتیک NSGA-II با مدل های شبیه‌سازی کمی و کیفی MODFLOW و MT3D تلفیق شدند و مکانیابی ایستگاه های پایش بر اساس شبیلوی دقیق جریان آب زیرزمینی، پخش و تجزیه آلاینده ها صورت گرفت. الگوریتم کاملی چند هدفه مانند الگوریتم ژنتیک چند هدفه از قابلیت های ویژه‌ای در حل مسائلی با مقدار متغیرهای تصمیم زیاد، دارای فضای جواب گسسته و ساختار غیر خطی برخوردار می‌باشند. MODFLOW یک مدل شبیه‌سازی سه بعدی بر پایه روش تفاوت محدود می باشد. مدل MT3D معادلات پخش، انتقال، جذب و تجزیه آلاینده ها در آب زیرزمینی را به روش تفاوت محدود حل می نماید. این تحقیق، فایل های اجرایی دو مدل شبیه‌سازی فوق با مدل بهینه سازی تلفیق می شوند به طوری که دو مدل فوق، به صورت خودکار در داخل حلقه‌های بهینه‌سازی اجرا شده و نتایج در مدل بهینه سازی مورد استفاده قرار می گیرد. این موضوع می‌تواند دقت نتایج را به طور قابل

^۱. Van Genuchten-Mualem

توجلی افزایش دهد. عدم قطعیت های موجود مانند عدم قطعیت مشخصات هیدروژئولوژیکی آبخوان و ضرایب پخش و زوال آلاینده ها نیز با استفاده از تحلیل مونت کارلو در الگوریتم ژنتیک در نظر گرفته کاژلیندمدل پیشنهادی با استفاده از اطلاعات موجود از بخشی از شرکت پالایش نفت تهران و آبخوان تهران ارزیابی شد. از نقاط ضعف این تحقیق می توان بهین موارد اشاره نمود ناحیه انتخاب شده در شرکت پالایش نفت تهران نسبت به نواحی مجاور آن از آلودگی کمتری برخوردار است و چاه نظارتی در آن ناحیه موجود نیست. در حالی که، در این مقاله در ناحیه مورد نظر ۳۷ چاه نظارتی در نظر گرفته شده استدر این جا این سوال پیش می آید که آیا مدل در نواحی با آلودگی بیشتر نیز کارایی دارد؟ و چرا چاه های نظارتی در این ناحیه فرض شدافد؟ از طرف دیگر، اشاره ای به داده های صحرایی مورد استفاده نشده است و به طور واضح مشخص نشده است که کارایی مدل بر چه اساسی ارزیابی شده است.

۱-۱۲. ضرورت انجام تحقیق و طرح موضوع رساله

اگر چه تحقیقات زیادی جهت بررسی آلودگی مربوط به منابع هیدروکربنی در حالت کلی در سراسر دنیا انجام شده است ولی هنوز در خصوص مدل سازی بسیاری از فرآیندهای درگیر در انتقال مواد هیدروکربنی در سیستم های آبخانه ای به منظور پیش بینی منطقه ای محدوده آلودگی جای تحقیق بیشتری احساس می گردد.

مناطق وجود دارد که مایعات فاز غیر آبی (NAPLs) مانند حلال های کلرینه و سوخت های هیدروکربنی به زیر سطح زمین راه یافته اند. طور شاخص، مایعات آلی از طریق ریزش های شیمیایی، نشهای مخازن زیرزمینی یا ساختارهای انتقالی و دفع مستقیم، به زیر سطح زمین وارد می شوندقابلیت انحلال NAPL ها معمولاً نسبتاً پایین بوده و انحلال اغلب یک فرآیند سینتیکی است (Brusseau, 1992). در نتیجه این ریزش ها و نفوذ این مایعات ممکن است یک منبع آلودگی گسترده و بلند مدت برای آب های زیرزمینی محسوب گردند. بنابراین حضور NAPL ها در محیط های

زیر سطحی یک مسأله زیست محیطی مهمی را مطرح می‌سازد. در اکثر مناطق آلودگی که مایعات آلی نشت کرده‌اند، به صورت فاز بطنی در منطقه هوادار حضور پیدا می‌کنند رفتار مایعات در سیستم‌های سه فازی هوا - NAPL - آب برای اهداف زیستمحیطی به تفصیل مطالعه نشده‌اند. آب آلودگی با مایعات آلی تماس یافته و در نتیجه مولفه های حل شده به سمت پایین سفرها منتقل می‌گردد، بخارات متراکم ناشی از ترکیبات آلی فرار ممکن است نشت کنند و به سرعت در منطقه هوادار پراکنده شده‌بندی متعاقب در داخل آب زیرزمینی ممکن است پلوم‌های گسترده‌ای از آلاینده را ایجاد کنند. این موضوع می‌تواند سبب آلودگی منابع آب محلی گردد و اثرات زیان بخشی بر سلامتی انسان و محیط اکولوژیکی داشته باشد بنابراین، لازم است منطقه منبع پلوم برای ارزیابی ریسک‌های مطرح شده برای محیط زیست و اندازه‌گیری‌های بعدی برای محدود کردن چنین اثراتی، شناسایی و توصیف شوند.

چگونگی به‌سازی موثر سفره و آلودگی زیر سطحی هیدروکربن‌های نفتی یک مشکل اساسی است که مدیران زیست محیطی با آن مواجه اند در چنین مواردی تصمیم‌گیری روی انتخاب روش موثر برای پاک‌سازی آلودگی هیدروکربنی بسیار ضروری می‌باشد.

گام نخست در ارزیابی خطرات زیست محیطی و طراحی برنامه‌های به‌سازی موثر در سایت‌های آلوده، مدل‌سازی مهاجرت زیر سطحی و تحول هیدروکربن ها است. برای شروع مدل‌سازی به یک مدل مفهومی نیاز استیک مدل مفهومی، انتقال و تحول آلاینده ها را بعد از نشت هیدروکربن‌های نفتی در منطقه اشباع نشده با لحاظ الگوی پیچیده‌ای از فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی و میکروبی مربوطه به صورت کیفی بیان می‌کند.

معادلات انتقال و تحول یک ماده در ابتدا برای ارزیابی ی یک آلاینده شیمیایی در یک زمان توسعه داده شدند در این مدل‌های اولیه، جزءبندی بین آب، خاک، بخار و ماده آلی خاک جداگانه برای هر ماده شیمیایی محاسبه می‌شوند این موضوع مشکلی را برای هیدروکربن‌های نفتی که در محیط به صورت مواد شیمیایی مجزا نیستند، اما برعکس به صورت مخلوط‌های پیچیده ترکیبات آلی

حضور دارند، ارائه می کند. پیشی دقیق غلظت یک آلاینده شیمیایی آلی حاوی مخلوطی از انواع مواد شیمیایی آلی برای ارزیابی ریسک های بالقوه ضروری است بنابراین، معادلات تحول و انتقال که برای بررسی هیدروکربن های نفتی استفاده می شوند، باید این اثر مخلوط را شامل شوند. در برخی موارد معادلات به اصلاحات کمی احتیاج دارند. برخی از مدل ها اثر مخلوط های نفتی را در نظر نمی گیرند این مسأله می تواند منجر به پیش بینی های غیر واقعی در مورد اثرات زیست محیطی بالقوه نفت شود.

با این حال، باید توجه داشت که نتایج شبیهی حاصل از یک مدل ریاضی که به درستی کالیبره نشده است، می تواند به طور قابل ملاحظه ای از رفتار واقعی آلاینده متفاوت باشد اغلب دقت پایین مدل به واسطه عدم صحت کافی مقادیر پارامترهای ورودی اصلی مدل است. بنابراین، تعیین دقیق سیستم جریان آب زیرزمینی، ویژگی های هیدرولیکی و نهضای تجزیه آلاینده ها که ممکن است بیشترین تأثیر را بر پیش بینی های مدل داشته باشد، خیلی مهم است.

به طور کلی فرد مدل ساز باید بهترین راه را برای شناسایی، کمی سازی و درک مکانیسم های درگیر در تولید آلاینده ها و انتقال آن ها در محیط متخلخل آب زیرزمینی پیدا کند.

مدل های عددی انتقال آلاینده ها ابزارهای ارزشمند برای ارزیابی تغییرات در کیفیت

آب زیرزمینی بعد از نشت هیدروکربن هستند و باید مشخص گردد که کدام عوامل در یک سیستم واقعی حساسیت بیشتری دارند.

یک مدل می تواند به طراحی، بهینه سازی و پیش بینی عملیات بسفازی مناطق آلوده کمک نماید.

در این تحقیق مسائل بالا مدنظر قرار گرفته و بنابراین اهداف اصلی به صورت زیر فرموله می گردد.

۱-۱۳. اهداف تحقیق

هدف اصلی این تحقیق بررسی

تأثیر آلاینده‌های هیدروکربنی روی محیط‌ت به ویژه آبخوان منطقه شرکت پالایش نفت تهران می‌باشد.

با توجه به این که منابع آب های زیرزمینی توسط نشتی‌های منابع هیدروکربنی به راحتی آلوده می‌گردند و از طرفی پاک‌سازی این آلودگی از سفرهای آبدار یک فرآیند طولانی مدت و هزینه‌بر می‌باشد، بنابراین، پیش‌بینی محدوده آلودگی ناشی از منابع نفتی و بررسی مکانیزم‌های حاکم بر انتقال آلاینده‌های هیدروکربنی در سفره آب ها از مسائل مهم و روز زیست محیطی می‌باشد که ضمن تعیین محدوده آلودگی احتمالی، می‌تواند ما را در ارائه راهکارهای کنترلی و طراحی استراتژی های مناسب جهت حفاظت منابع آب زیرزمینی و پاک‌سازی مناطق آلوده یاری نماید.

هدف این تحقیق مدل‌سازی عددی فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی، ژئوشیمیایی و بیولوژیکی موثر بر نشت هیدروکربن های نفتی به داخل آب های زیرزمینی، مکانیزم‌های حاکم بر رقیق‌سازی طبیعی و گسترش محدوده و پلوم آلودگی بوده تا بر اساس نتایج این تحقیق راهکارهای عملی جهت کنترل گسترش و پاک‌سازی مناطق آلوده فراهم گردد. جهت نیل به هدف، پس از ارائه معادلات ریاضی حاکم، مدل‌سازی توسط نرم‌افزار تجاری چند منظوره PHOENICS (CHAM, 2008)¹ انجام می‌پذیرد.

بنابراین، اهداف این تحقیق به قرار زیر خلاصه می‌گردد:

استفاده از مدل‌سازی عددی فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی، ژئوشیمیایی و بیولوژیکی موثر بر نشت هیدروکربن‌های نفتی به داخل آب‌های زیرزمینی در منطقه شرکت پالایش نفت تهران؛

۲- انتقال واکنشی آلاینده‌های نفتی از طریق سیستم جریان آب‌های زیرزمینی؛

۳- بررسی مکانیزم‌های حاکم بر رقیق‌سازی طبیعی و گسترش محدوده و پلوم آلودگی در زیرزمین؛

۴- ارائه راهکارهای عملی جهت کنترل گسترش و پاک‌سازی مناطق آلوده بر اساس نتایج این تحقیق؛

¹. Concentration, Heat and Momentum Ltd

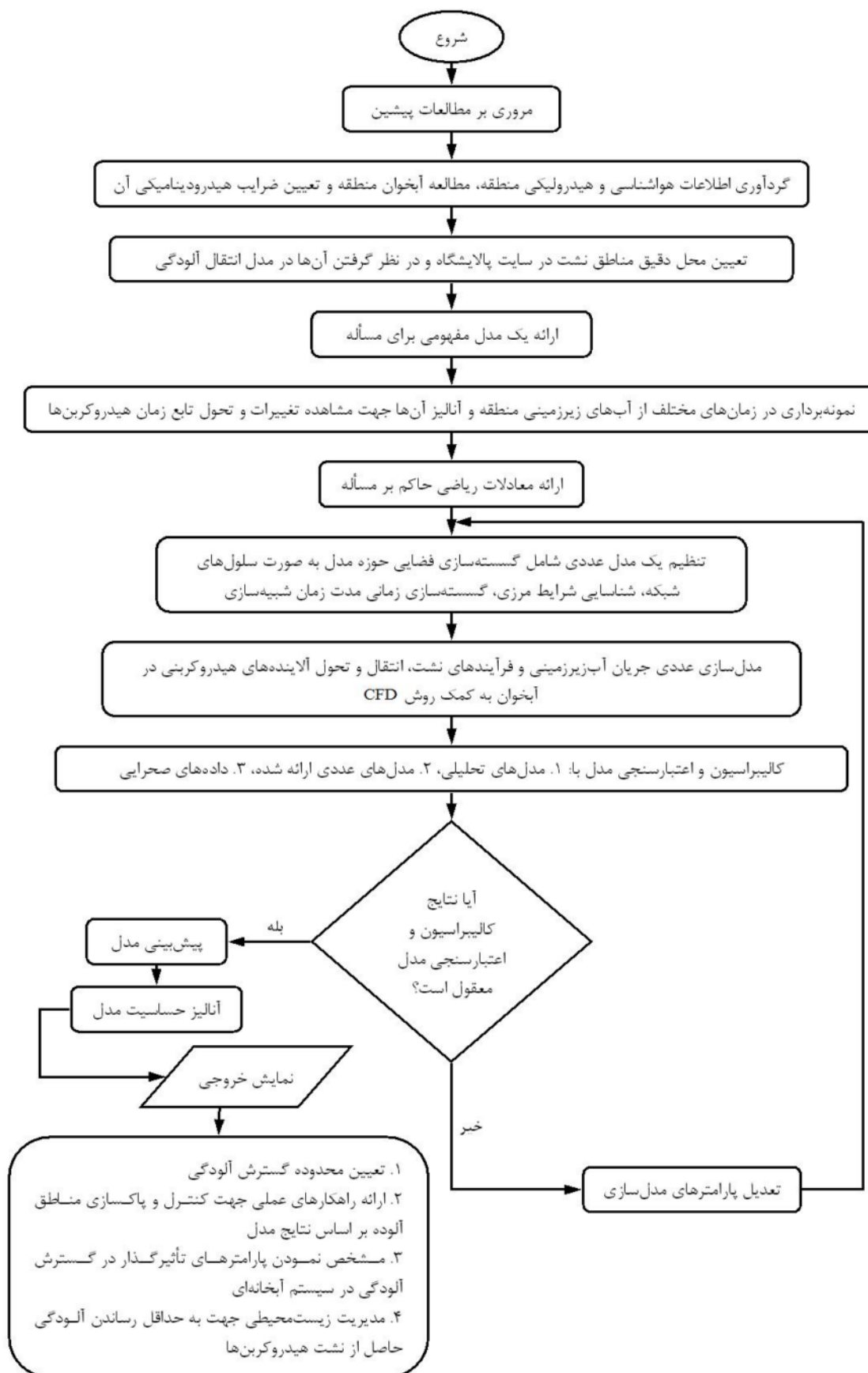
۵- مشخص نمودن پارامترهای تأثیرگذار در گسترش آلودگی در سیستم آبخانه‌ای.

طرح شماتیکی از مراحل انجام تحقیق و روش مدل‌سازی به صورت زیر ارائه شده است (شکل ۱-۹).

۱-۱۴. سازماندهی رساله

این رساله در هفت فصل ارائه شده است:

- فصل اول اهداف کلی تحقیق، انواع آلاینده‌های آلی و منابع بالقوه آن‌ها، ویژگی‌های فیزیک و شیمیایی آلاینده‌های آلی، مشکلات ناشی از حضور این آلاینده‌ها در سفره‌های آب زیرزمینی، مروری بر تحقیقات و مطالعات انجام شده جهت مدل‌سازی تحول و انتقال هیدروکربن‌های نفتی در آب‌های زیرزمینی، ضرورت انجام تحقیق را ارائه می‌دهد.
- فصل دوم یک مدل مفهومی برای نشت آلاینده‌های هیدروکربنی در آبخوان شرکت پالایش نفت تهران را شرح می‌دهد. این فصل همچنین معادلات اساسی حاکم بر انتقال واکنشی هیدروکربن‌های نفتی را ارائه می‌دهد.



شکل (۱-۹): فلوچارت مراحل مطالعات هیدرولوژیکی زیست‌محیطی شرکت پالایش نفت تهران.

- فصل سوم مشخصات کلی تحلیل دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) را توصیف می‌کند. علاوه بر این، فصل حاضر شامل شرح مختصری از مشخصات و کاربردهای نرم‌افزار PHOENICS به عنوان یک کد CFD می‌باشد.
- فصل چهارم در مورد تأیید و اعتبارسنجی نتایج مدل عددی ارائه شده در این تحقیق است. مقایسه نتایج مدل حاضر با نتایج حل‌های تحلیلی و مدل‌های عددی منتشر شده توسط سایر محققین نشان می‌دهد که مدل ارائه شده بر اساس روش‌های حجم‌های محدود و با استفاده از نرم‌افزار PHOENICS به عنوان یک کد CFD، یک ابزار قابل اعتماد برای ارزیابی و پیش‌بینی انتقال واکنشی هیدروکربن‌های نفتی در سیستم‌های آبخانه‌ای و منطقه غیر اشباع است. چهار سناریو برای اعتبارسنجی مدل حاضر انتخاب شد.
- فصل پنجم به شرح اجمالی مطالعات صحرایی انجام شده در ناحیه مورد بررسی می‌پردازد.
- فصل ششم شامل نتایج شبیه‌سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن‌های نفتی از طریق سیستم جریان آب زیرزمینی و منطقه غیر اشباع است.
- فصل هفتم نتایج اصلی کار تحقیقی ارائه شده در این رساله به همراه پیشنهاداتی برای تحقیقات آینده و روش‌های پیشنهادی جهت پاک‌سازی ناحیه مورد مطالعه از آلودگی‌های نفتی را خلاصه می‌کند.
- فایل Q1 در زبان ورودی PHOENICS و زیرروال GROUND در زبان FORTRAN به ترتیب در پیوست‌های الف و ب ارائه شده‌اند.

فصل دوم

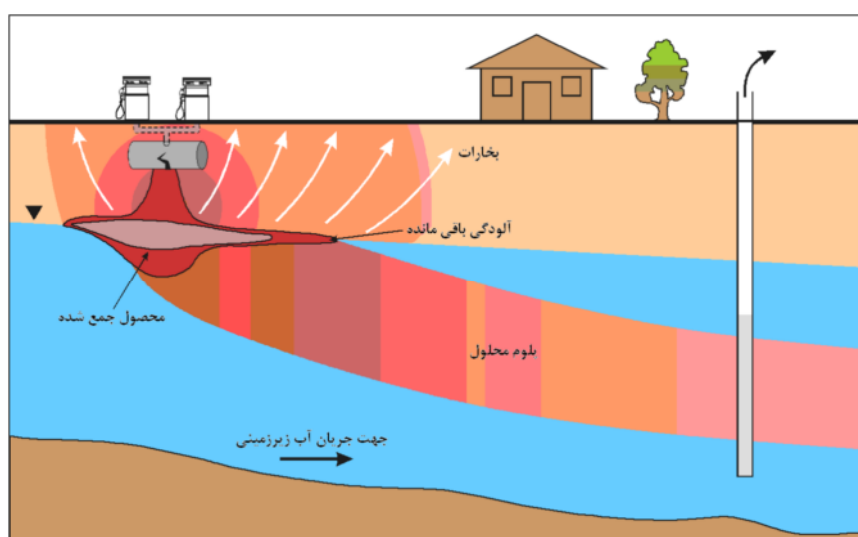
فرآیندهای موثر در انتقال و تحمل هیدروکربن‌ها در سفره‌های

آب زیرزمینی و روابط ریاضی آن‌ها

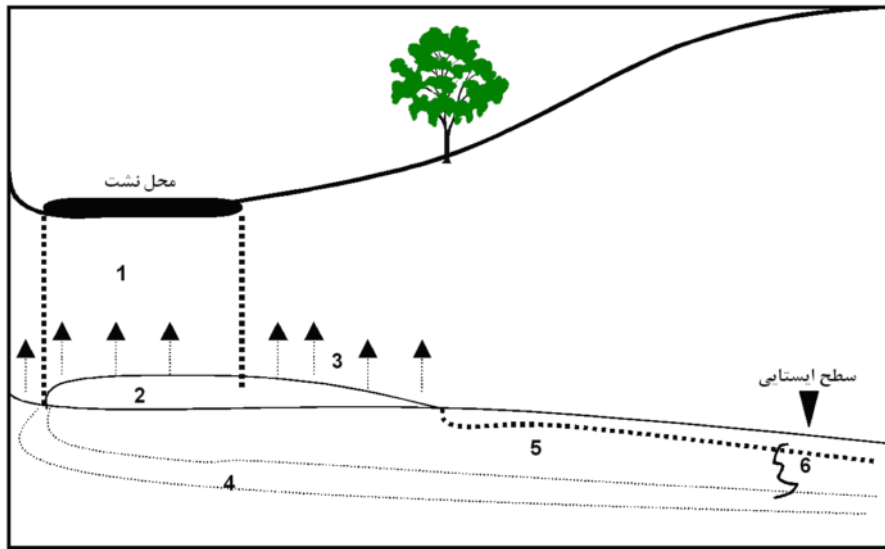
۲-۱. مقدمه

امروزه یکی از نگرانی‌های زیست‌محیطی، آلودگی محیط‌های آبخیزه توسط مایعات فاز غیر آبی NAPL باشد. ترکیبات آلی، هیدروکربن‌ها و حلال‌های کلرینه به طور گسترده ای در سراسر جهان به وسیله صنایع مختلف تولید و استفاده می‌گردند. در نتیجه ریزش‌های تصادفی، شیوه‌های دفع ناقص و نشت‌های حاصل از تأسیسات مخزنی زیر سطحی، NAPL‌ها وارد محیط‌های زیر سطحی می‌شوند و در نهایت منابع با ارزش آب زیرزمینی را آلوده می‌کنند. این سیالات می‌توانند در خاک زیر سطح زمین برای سال‌های طولانی باقی بمانند و به واسطه قابلیت انحلال پایینی که دارند می‌توانند یک سفره آب زیرزمینی را برای مدت‌های متمادی آلوده سازند. طبیعت پیچیده این آلاینده‌ها اغلب باعث می‌گردد که تلاش‌های به‌سازی با شکست مواجه شوند. کمتر از آن چه مورد نظر است، موثر باشند. توجه به اهمیت موضوع حفاظت منابع آب‌های زیرزمینی، استفاده از روش‌های کم‌هزینه و موثر برای پیش‌بینی دقیق منطقه آلوده شده در اثر ریزش‌های هیدروکربنی ضروری است.

مدلها قولنند ابزار قدرتمندی برای پیش بینی تحول و انتقال آلاینده ها از جمله هیدروکربنهای نفتی در آب های زیرزمینی باشنفرآیندهای انتقال که می توانند کم و بیش در مراحل مختلف تحول نشت آلاینده های نفتی در آب های زیرزمینی غالب باشند، علرتند از فرآیندهای پهنرفت، پراکندگی، انحلال از مایع فاز غیر آبی (NAPL) جذب سطحی به مواد سفره و تجزیه بیولوژیکی نظر گرفتن تمامی این فرآیندها می تواند در ارزیابی جامع رقیق سازی طبیعی ترکیبات هیدروکربنی درهآی زیرزمینی یا برای طراحی یک استراتژی مناسب در پاکسازی سفره آب زیرزمینی از ترکیبات هیدروکربنی موثر باشدبرای این که یک مدل سازی واقعی تر و جامع تر از فرآینهای درگیر در آلودگی سفره آب ها با هیدروکربن های نفتی صورت گیرد، دادهای کافی و یک مدل مفهومی صحیح که نشان دهنده مکانیزم های موثر در انتقال آلایندهها، توسعه پلوم آلودگی و همچنین واکنشهای هیدروژئوشیمیایی درگیر باشد، مورد نیاز هستند در ارائه یک مدل مفهومی، شناخت مشخصات سفره، ژئوشیمی، تعیین مرزهای محدوده مورد مطالعه و هدف مدل سازی ضروری می باشند. در شکل های (۱-۲) و (۲-۲) و نمونه از مدل مفهومی برای نشان دادن چگونگی نشت و انتشار هیدروکربن های نفتی که توسط سایر محققین ارائه شده اند، ملاحظه می گردد.



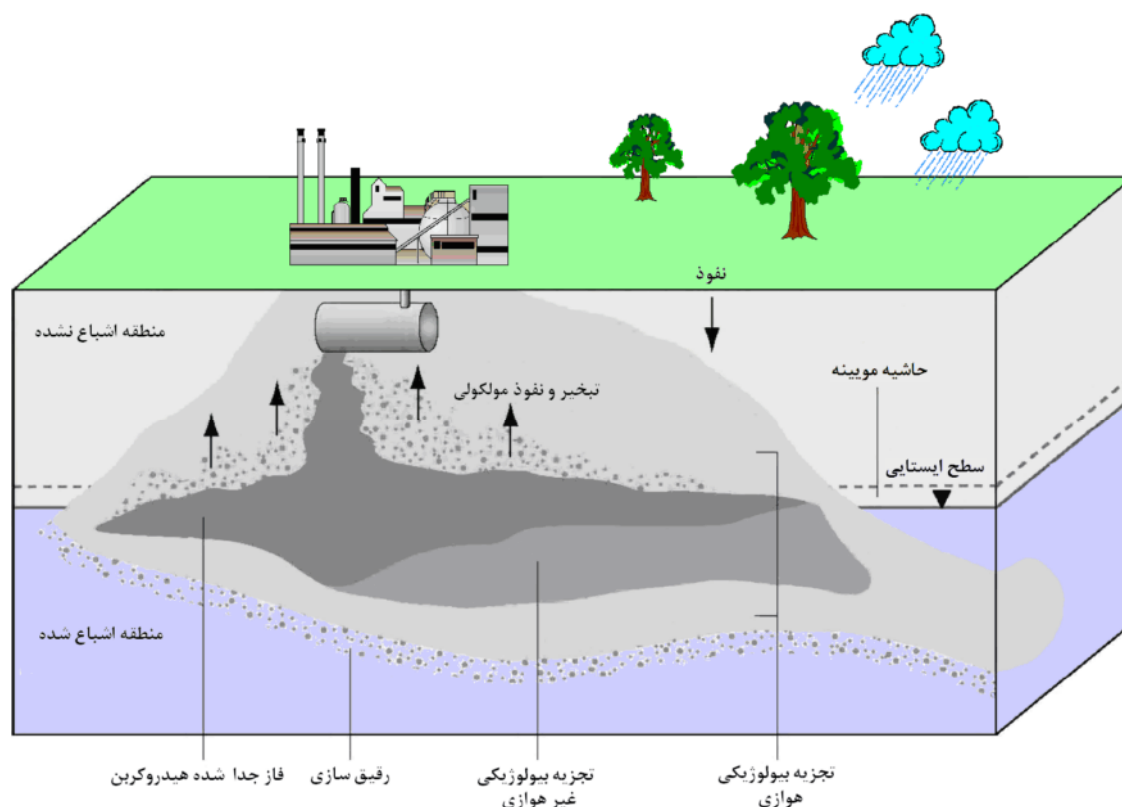
شکل (۱-۲): نمونه ای از مدل مفهومی ارائه شده برای یک سناریو نشت هیدروکربن ها به محیط زیر سطحی (Davis et al., 2004).



شکل (۲-۲): مقطع عرضی منطقه اطراف محل نشت NAPL در حالت سطح ایستایی ساکن: ۱. منطقه هوادار مستقیماً زیر محل نشت. ۲. منطقه محصول آزاد (متحرک) و محصول باقی مانده. ۳. منطقه هوادار مستقیماً بالای محصول آزاد/ باقی مانده. ۴. حاشیه واکنشی اطراف پلوم حل شده. ۵. هسته غیر هوازی پلوم حل شده. ۶. انتهای پلوم حل شده (Phopfi, 2004).

هملی عددی که فرآیندهای انتقال و تجزیه بیولوژیکی را شبیه سازی می کنند به همراه دادهای صحرایی می توانند برای ارزیابی رقیق طبیعی و وسعت پلوم آلودگی استفاده شوند. مدل ها می توانند برای جمع بندی اطلاعات جمع آوی شده در صحرا، کمی سازی موازنه جرم آلاینده، کمی سازی نرخ های رقیق سازی و مطالعه اهمیت نسبی فرآیندهای رخ دهنده به طور همزمان، استفاده شوند. محدودیت های نمونه برداری صحرایی، توسعه دقیق موازنه های جرم را برای آلایندها و بنابراین تشخیص مقدار و نرخ حذف توسط تجزیه بیولوژیکی، رقیق سازی و جذب را مشکل می سازد. اگر دادهای کافی باشند، یک مدل عددی می تواند برای عملی ساختن مدل های مفهومی، کمی سازی فرآیندهای موثر در رقیق سازی طبیعی و پیش بینی تکامل پلوم استفاده شوند. علی رغم توسعه مدل های مختلف توسط محققین، مدل سازی جامع و تفصیلی رقیق سازی طبیعی، انتقال و تحول هیدروکربل هنوز به وسیله محدودیت های محاسباتی، فقدان دادهای صحرایی کافی و فقدان درک صحیح از فرآیندهای مقیاس صحرایی محدود می باشند بنابراین این ضرورت توسعه مدل های جامع تر احساس می شود.

در ادامه این فصل ارائه یک مدل مفهومی اولیه برای آبخوان منطقه شرکت پالایش نفت تهران، به شرح مکانیزم‌های حاکم بر رقیق‌سازی آلاینده‌های هیدروکربنی در منطقه هوادار و فرآیندهای موثر بر انتقال آن‌ها در منطقه اشباع شده آبخوان خواهیم پرداخت (شکل ۲-۳).



شکل (۲-۳): مدل مفهومی پیشنهادی برای نشت آلاینده‌های هیدروکربنی در آبخوان شرکت پالایش نفت تهران.

۲-۲. بیان مسأله

انتشار و راه‌یابی هیدروکربن‌های نفتی به منطقه اشباع شده آب‌های زیرزمینی به صورت یک فاز مجزای NAPL (مایع فاز غیر آبی) که به وسیله طیف وسیعی از فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی کنترل می‌شود، ممکن است برای انسان مشکلات سلامتی را به همراه داشته باشد.

فرآیندهای مهمی که تحول و انتقال ترکیبات آلی را در آب زیرزمینی متأثر می‌سازند، عبارتند

از (Prommer et al., 2003):

- انحلال از فاز NAPL به داخل سیستم جریان آب زیرزمینی؛

- پدیده پهنرفت^۱؛

- پدیده پراکندگی طولی و عرضی؛

- جذب به مواد آبخانه؛

- تجزیه بیولوژیکی یعنی تغییر شکل^۲ و یا کانی‌سازی^۳.

اهمیت نسبی و برتری این فرآیندها به طور قابل ملاحظه ای از آغاز آلودگی آب‌های زیرزمینی تا ناپدید شدن کامل آلاینده تغییر می‌کنند. هیچ اقدامی در خصوص به‌سازی فعال آب زیرزمینی صورت نگیرد، مراحل عمده زیر شاخص هستند.

مرحله (۱): پدیدار شدن آلودگی آب زیرزمینی

با آلودگی زمین در تماس است و با ادامه پدیده انحلال، فرآیندهای پراکندگی و

پهنرفت منجر به رشد پلوم آلاینده های هیدروکربنی محلول می‌شود و زمانی که سرعت حل جرم از منبع NAPL سرعتی که در آن جرم به وسیله پدیده های جذب و تجزیه بیولوژیکی رفع می‌شود، تجاوز می‌کند، جرم کل هیدروکربن‌های حل شده به‌طور پیوسته و یکنواخت افزایش می‌یابد. برای ضرایب پراکندگی طولی بزرگ، جبهه پلوم ممکن است به طور قابل ملاحظه ای سریع‌تر از سرعت متوسط جریان آب زیرزمینی سیر کند.

مرحله (۲): پلوم‌های آلاینده‌های آلی که به صورت پایا و آرام تغییر می‌کنند

سرعت کلی که در آن آلاینده‌های آلی مختلف به صورت بیولوژیکی تجزیه می‌شوند، با سرعتی که در آن، آلاینده‌ها از منبع NAPL حل می‌شوند برابر است. بعلاوه، در این حالت (نیمه) پایا، با توجه به این که جذب به مواد سفره و واجذب از مواد سفره در سرعت یکسانی اتفاق می‌افتد، بنابراین، بر توزیع آلاینده در محیط آبخانه تأثیر نمی‌گذارد و هر دو الکترون گیرنده‌های آبی

¹. Advection

². Transformation

³. Mineralisation

(CO_2 , SO_4^{2-} , NO_3^- , O_2) و الکترون گیرنده‌های جامد و کانی شکل اکسیدهای آهن از قبیل فری‌هیدریت یا گوتیت (ظرفیت اکسیداسیون لازم برای فرآیندهای اکسیداسیون / کانی‌سازی ترکیبات آلی را فراهم می‌سازند. فرآیندهای مهمی که طول پلوم آلاینده هیدروکربنی را متأثر می‌سازند عبارتند از:

- جرم کل آلاینده که از منطقه منبع NAPL ناشی می‌شود؛
 - سرعت‌های انحلال الکترون گیرنده‌های کانی شکل.
- حالت اخیر تنها وقتی اتفاق می‌افتد، که الکترون گیرنده‌های فاز جامد موجود باشند و به طور ترمودینامیکی الکترون گیرنده‌های مطلوب‌تر به صورت محلی در پلوم‌های آلاینده موجود نباشند.
- مرحله (۳):** همانند بالا، ولی الکترون گیرنده‌های کانی شکل به حرکت تهری می‌شوند و با سرعت انحلال کانی ناچیز می‌شود).
- ظرفیت اکسیداسیونی که برای تجزیه بیولوژیکی ترکیبات آلی لازم است به وسیله الکترون گیرنده‌های آبی که کم و بیش به طور پیوسته تجدید می‌شوند، فراهم می‌شوند. همانند مرحله قبلی، سرعت‌های جذب و واجذب مشابه هستند (چون ترکیبات آلی جذب شده به مواد سفره ثابت باقی می‌ماند) و طول پلوم‌های منفرد به ضریب پراکندگی طولی سفره حساس نیست.

مرحله (۴): تهی‌سازی منبع NAPL

در این مرحله جرم کل مواد آلی حل شده در آب زیرزمینی کاهش می‌یابد زمان لازم برای تهی‌سازی منبع برای هر ترکیب آلی بسته به جرم اولیه، قابلیت انحلال ترکیبات و کسر مولی اش در منبع NAPL تغییر می‌کند (استهلاک منبع به طور متوالی برای هر ترکیب رخ می‌دهد (Prommer et al., 2003). اندازه هر پلوم ممکن است در نتیجه دسترسی بیشتر به الکترون گیرنده‌ها کاهش یابد.

با ترکیب فرآیندهای فوق، معادله اساسی حاکم بر انتقال یک آلاینده آلی توسط مکانیزم های انتقال فیزیکی و واکنشهای شیمیایی به صورت زیر بیان می شود
(modefied from Prommer et al., 2003):

(۱-۲)

$$\theta \frac{\partial C_{org}}{\partial t} = \theta \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ij} \frac{\partial C_{org}}{\partial x} \right) - \theta \frac{\partial}{\partial x} (v C_{org}) + q_s C_{org,q} + \theta R_{org,dis} + \theta R_{org,deg} + \theta R_{org,sorb} + \theta R_{org,vol}$$

که در آن:

t : زمان؛

x : مختصات مکانی؛

C_{org} : غلظت آبی گونه شیمیایی (در این جا هیدروکربن نفتی)؛

v : سرعت آب منفذی در جهت x ؛

D_{ij} : تانسور پراکندگی هیدرودینامیکی؛

θ : تخلخل مواد سفره که ثابت فرض شده است؛

سرعت فلاکس حجمی آب در واحد حجم آب که نشان دهنده عبارت های تولید و مصرف خارجی؛

غلظت گونه آلی در این فلاکس اگر q_s مثبت باشد (توزیع) غیر این صورت

$$C_{org,q} = C_{org}$$

در حالت کلی، چهار عبارت واکنشی $R_{org,dis}$ ، $R_{org,deg}$ ، $R_{org,sorb}$ و $R_{org,vol}$ معادله فوق به

ترتیب بیانگر فرآیندهای واکنشی انحلال، تجزیه (بیولوژیکی)، جذب و تبخیر استهر عبارت ممکن است تابعی از سایر گونه های آبی، غلظت های کانی و NAPL باشد.

۳-۲. فرایندها

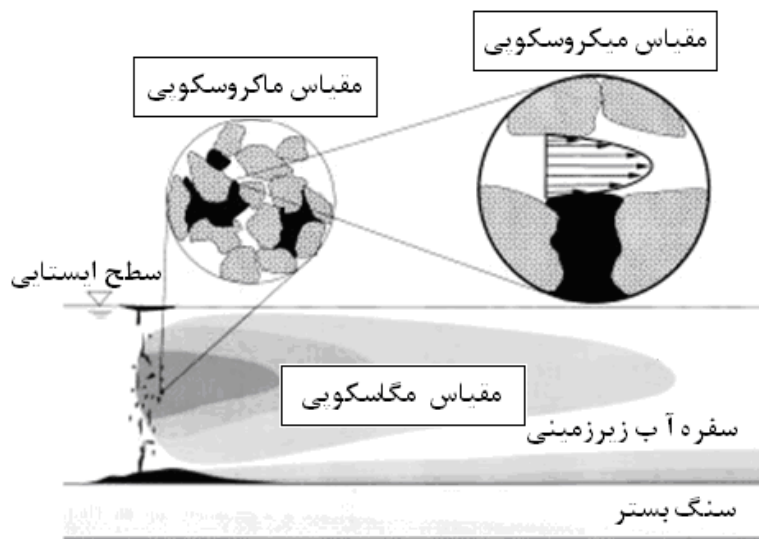
فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی مختلفی تحول و انتقال هیدرو کربن‌های نفتی در زیر سطح را تحت تأثیر قرار می‌دهند. برخی از این فرایندها در ادامه شرح داده می‌شوند.

۳-۲-۱. انحلال NAPL (منبع آلودگی)

در منطقه حجم زیادی هیدروکربن نفتی وارد سفره آب زیرزمینی می‌گردد، محصولات آزاد مانند گازوئیل از میان منطقه اشباع نشبیه سمت پایین سفره مهاجرت می‌کنند تا به منطقه مومینه برسند. آن‌جا به دلیل افزایش اشباع آب، قابلیت حرکت هیدروکربنها کاهش می‌یابد و هیدروکربنها در بالای سطح ایستابی آب زیرزمینی تجمع می‌یابند. چون هیدروکربن‌های نفتی از آب سبک‌ترند، نوسانات سطح ایستابی آب زیرزمینی باعث یک آغستگی عمودی NAPL می‌شود (Brandes Company, 1999). بنابراین، منطقه تماس بین NAPL و آب زیرزمینی افزایش می‌یابد. در این منطقه، انحلال ترکیبات NAPL (شکل ۲-۲) عنوان یک منبع آلودگی پیوسته برای آب زیرزمینی عمل می‌کند (Miller et al., 1990). انحلال سبب انتقال ترکیبات هیدروکربنی قابل حل از فاز آزاد یا NAPL باقی‌مانده به داخل سفره می‌شود و ویژگی فیزیکی اصلی کنترل‌کننده وسعت یک پلوم آلاینده است (Parcher, 1999).

سرعت انتقال جرم NAPL به فاز آبی تابعی از موارد زیر است (Prommer et al., 2003):

- ناحیه سطح مشترک بین فاز NAPL و فاز آبی؛
- وسعت و موافق‌رئوئیت منبع (ویژه سطح مقطع عرضی بیشینه عمود بر جهت عمده جریان آب زیرزمینی)؛
- سرعت جریان آب زیرزمینی؛
- قابلیت انحلال هر ترکیب هیدروکربنی؛
- ترکیب منبع NAPL (کسر مولی).



شکل (۲-۴): طرح شماتیک انحلال NAPL در محیط متخلخل در چندین مقیاس مشاهده‌ای (Khachikian and Harmon, 1998).

علی رغم اهمیت نسبی هر یک از این عوامل، غلظت هر ترکیب هیدروکربنی در آب زیرزمینی در منطقه آلوده اغلب به یک مقدار ثابت و پایدار برابر یا نزدیک به قابلیت انحلال چند مولفه ای ترکیبات خواهد رسید (Eberhardt and Grathwohl, 2002) این قابلیت انحلال چند مولفه ای به وسیله قانون رائولت توصیف می شود (Langevoort, 1980; Douthit, 2003; Prommer et al., 2003):

$$C_{org,i}^{sat,mc} = C_{org,i}^{sat} \gamma_{org,i} m_{org,i} \quad (2-2)$$

که در آن:

قابلیت انحلال فاز آبی یک گونه منفرد ترکیب آلی مورد بحث در مخلوطی از ترکیباتی با

مشخصات فیزیکی و شیمیایی مختلف؛

$\gamma_{org,i}$: ضریب فعالیت ترکیب آلی i ام؛

$m_{org,i}$: کسر مولی ترکیب آلی i ام در مخلوط NAPL.

سرعت بالای جریان آب زیرزمینی از دیگر عواملی است که ممکن است به انحلال محدود شده ترکیبات NAPL به صورت سینتیکی منجر گردد. ستلوهین مدلی که تغییر ترکیب i ام را در آب زیرزمینی توصیف می کند عبارت است از (Prommer et al., 2003):

$$R_{org,dis} = \varpi (C_{org,i}^{sat,mc} - C_{org,i}) \quad (3-2)$$

که در آن:

$C_{org,i}$: غلظت ترکیب آلی i ام در آب زیرزمینی؛

ضریب نرخ انتقال جرم بوده که محصولی است از یک ضریب انتقال جرم و ناحیه ویژه سطح مشترک بین فاز NAPL و آب.

برای حالت انحلال ثابت و پایدار ϖ به بی نهایت نزدیک می شود. در این حالت $C_{org,i}$ با $C_{org,i}^{sat,mc}$ برابر می شود. ترکیب معادلات (2-2) و (3-2) برای نرخ های انحلال دلخواه بکار می روند.

گارناسیا و همکاران سینتیک مرتبه اول انحلال را به صورت زیر بیان کردند (Guarnaccia et al., 1997):

$$E_N^w = K_N^w (\bar{C}_N^w - C_N^w) \quad (4-2)$$

$$K_N^w = \beta_1^{wN} (\theta S_N)^{\beta_2} |v^w|^{\beta_3} \quad (5-2)$$

که در آن:

K_N^w : نرخ انحلال بوده که تنظیم کننده نرخ است که در آن تعادل حاصل می گردد؛

$\bar{C}_N^w$: غلظت تعادلی گونه NAPL در فاز آبی (قابلیت انحلال)؛

C_N^w : غلظت گونه NAPL در فاز آبی؛

S_N : اشباع NAPL؛

v^w : سرعت آب زیرزمینی؛

β_2 : ثابت تجربی تقریباً معادل ۰/۵؛

β_3 : ثابت تجربی تقریباً معادل ۱؛

β_1^{wN} : ضریب نرخ است و با برآزش با داده‌های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد.

۲-۳-۲. پهنرفت و پراکندگی هیدرودینامیکی

وقتی ترکیبات هیدروکربنی در فاز آبی حل شدند، آن‌ها در معرض پدیده‌های فیزیکی پهنرفت و پراکندگی قرار می‌گیرند. در مقایسه با منطقه اشباع نشده، انتقال جرم در منطقه اشباع سفره عمدتاً در جهت افقی یعنی جهت نمادین جریان آب زیرزمینی رخ می‌دهد. در معادله (۲-۱) عبارات پهنرفت و پراکندگی از متوسط‌گیری جریان میکروسکوپی و فرآیندهای انتقال رخ دهنده در مقیاس منفذی در یک المان حجمی معرف $(REV)^1$ نتیجه می‌شود که به یک مدل زنجیره‌ای در سطح میکروسکوپی منتهی می‌شود (Prommer et al., 2003). پهنرفت، انتقال یک گونه حل شده با سرعت متوسطی برابر با سرعت آب زیرزمینی را توصیف می‌کند که فرآیند فیزیکی غالب در بیشتر مسایل انتقال آلودگی با مقیاس صلیبی در منطقه اشباع آب زیرزمینی است (دولتی اردجانی و همکاران، ۱۳۸۴). پهنرفت زیاد می‌تواند باعث پراکندگی و نفوذ بیشتر آلاینده‌های حل شده شوند. عبارت پراکندگی هیدرودینامیکی دو فرآیند پراکندگی مکانیکی و نفوذ مولکولی موثر را شامل می‌شود. پراکندگی مکانیکی اختلاط جسم حل شده با آب آلوده نشده است که در نتیجه آن غلظت آلاینده کاهش می‌یابد (Parcher, 1999). پراکندگی مکانیکی از نوسانات خطوط جریان (میکروسکوپی) نسبت به جهت متوسط جریان و قابلیت هدایت ناهمگن در المان حجمی معرف فوق‌الذکر نتیجه می‌شود (Prommer et al., 2003). نفوذ مولکولی در نتیجه اختلاف یا گرادیان غلظت حاصل می‌شود (Davis et al., 2004). نفوذ مولکولی حتی در نبود جریان آب زیرزمینی رخ می‌دهد (Parcher, 1999). نفوذ مولکولی معمولاً مقایسه با پراکندگی مکانیکی قابل چشم‌پوشی است (Prommer et al., 2003). در سیستم‌هایی که سرعت آهلی زیرزمینی کم می‌باشد، رقیق شدن ماده آلاینده ضمن حمل به مقدار زیادی بستگی به پدیده نفوذ مولکولی دارد در حالی که در سولفات‌بالتر، پراکندگی مکانیکی حائز اهمیت است (دولتی اردجانی و همکاران، ۱۳۸۴). سرعت

¹. Representative Elementary Volume

منفذی (ماکروسکوپی) v_i در معادله (۲-۶) به سرعت متوسط خطی نیز موسوم است از قانون

دارسی مطابق رابطه (۲-۶) ناشی می‌شود (Prommer et al., 2003):

$$v = -\frac{K_{ij}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x} \quad (2-6)$$

و معادله اساسی حاکم بر جریان آب زیرزمینی در حالت سه بعدی در محیط اشباع شده سفره آب از

معادله (۲-۷) به دست می‌آید (Prommer et al., 2003):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2-7)$$

که در آن:

K_{ij} : تانسور قابلیت هدایت هیدرولیکی؛

h : هد هیدرولیکی؛

S_s : ذخیره ویژه^۱.

پراکندگی هیدرودینامیکی از تلفیق مولفه‌های نفوذ و پراکندگی مکانیکی حاصل می‌شود و به

صورت زیر بیان می‌گردد (دولتی و همکاران، ۱۳۸۴):

$$D_L = \alpha_L v_x + D_{dif} \quad (2-8)$$

$$D_T = \alpha_T v_y + D_{dif} \quad (2-9)$$

که در آن:

D_L : پراکندگی هیدرودینامیکی طولی^۲؛

D_T : پراکندگی هیدرودینامیکی عرضی^۳؛

α_L : ضریب پراکندگی طولی^۴ محیط متخلخل؛

^۱. Specific storativity

^۲. Longitudinal hydrodynamic dispersion

^۳. Transverse dispersion coefficient

^۴. Longitudinal dispersivity

α_T : ضریب پراکندگی عرضی^۱ محیط متخلخل؛

v_x : سرعت متوسط خطی در جهت x ؛

v_y : سرعت متوسط خطی در جهت y ؛

D_{dif} : ضریب پخش مولکولی^۲.

حل تحلیلی معادله پهنرفت و پراکندگی فقط برای حالات نسبت ساده موجود است. بنابراین، برای حالات واقعی و پیچیده تر، شامل سفوفی ناهمگن، شرایط مرزی ناپایدار و غیره، تکنیک های عددی مانند روش های اجزاء محدود، تفاوت های محدود و حجم های محدود مورد نیاز هستند.

۳-۳-۲. جذب

عبارت جذب تقسیم بندی آلاینده های آلی فلین های آبی، گازی و یک فاز جامد معمولاً ماتریکس خاک را توصیف می کند. فرآیند جذب حرکت جسم حل شده را کند می کند، بنابراین یک فرآیند مهم در تحول و انتقال آلاینده های محلول می باشد (Fitts, 2002) چون اکثر ترکیبات نفتی غیر یونی هستند آلی به آسانی به کربن آلی جذب میشوند تا به ذرات کانی در خاک (Parcher, 1999). بنابراین جذب فرآیند بسیار مهمی برای حذف آلاینده های هیدروکربنی در محیط های حاوی مقادیر زیادی کربن آلی است بسته به نوع خاک، جذب به ویژه به مواد کربن دار ممکن است به طور قابل ملاحظه ای به غلظت آبی هیدروکربن های نفتی تأثیر بگذارد (Prommer et al., 2003). در بیشتر حالات سینتیک جذب عمدتاً مدت زمانی را که سپری می شود تا پلوه های هیدروکربنی نفتی به یک طول پایا برسند را تحت تأثیر قرار می دهد در این مرحله، جذب و واجذب در سرعت یکسان رخ می دهند و ظرفیت جذب خاک معمولاً طول پلوم را تحت تأثیر قرار نمی دهد مگر این که میدان جریان ناپایا باشد (Prommer, 2002).

¹. Transverse dispersivity

². Diffusion

برای کمی‌سازی فرآیند جذب در یک مدل انتقال واکنشی، نرخ هایی مورد نیاز است که در آنها پیشرفت واکنشی جذب از یک مدل جذب تعادلی یا یک مدل جذب سینتیکی پیروی می‌کند. یک مدل تعادلی وقتی مناسب است که واکنش های جذب در مقایسه با انتقال سریع باشند وقتی سرعت جریان بالا و واکنش جذب آهسته باشد در این صورت ممکن است یک مدل سینتیکی مناسب باشد. بیشتر موارد جذب و واجذب یک نتیجه نفوذ میان ذره ای است (Eberhardt and Grathwohl, 2002). مدل‌هایی که معمولاً برای سنجش جذب در مقیاس صحرایی استفاده می‌شوند عبارتند از:

- مدل تعادلی خطی جذب؛
- مدل تعادلی غیرخطی فرندلیچ^۱؛
- مدل تعادلی غیرخطی لانگمویر^۲.

مدل خطی ساده‌ترین مدل جذب است و به صورت زیر بیان می‌شود (Prommer et al., 2003):

$$C_{org,s} = k_d C_{org} \quad (۱۰-۲)$$

که در آن:

$C_{org,s}$: غلظت جذب شده؛

C_{org} : غلظت تعادلی؛

ضریب k_d توزیع است که به مشخصات جسم حل شده و محیط جامد بستگی دارد

(Prommer et al., 2003).

مدل فرندلیچ از رابطه زیر به دست می‌آید (Nitzsche and Vereecken, 2002; Prommer et al.,)

(2003; Wang and Qin, 2005; Yao et al., 2010):

$$C_{org,s} = K_F C_{org}^{n_F} \quad (۱۱-۲)$$

که در آن:

^۱. Freundlich

^۲. Langmuir

K_F : ضریب ظرفیت جذب فرندلیچ؛

n_F ضریب انرژی جذب فرندلیچ است. اگر چه در متون، مقادیر n_F بین ۰/۷ تا ۱/۸ گزارش شده

است، این مقدار معمولاً کمتر و نزدیک به واحد است (Barry and Bajracharya, 1995).

مدل لانگمویر به صورت زیر بیان می گردد (Nitzsche and Vereecken, 2002; Prommer et al.,)

(2003; Wang and Qin, 2005; Yao et al., 2010):

$$C_{org,s} = \frac{K_L C_{org}}{1 + K_L C_{org}} C_{org,s,max} \quad (2-12)$$

که در آن:

K_L : ضریب ظرفیت جذب تک لایه‌ای (لانگمویر)؛

$C_{org,s,max}$: ماکزیمم ظرفیت جذب سطحی؛

$C_{org,s}$: مقدار جرمی که جذب سطوح جامد می‌شود.

$C_{org,s}$ و $C_{org,s,max}$ کسرهاهای جرمی هستند و به عنوان جرم یک ترکیب آلی که به جرم ویژه خاک

جذب می‌شود، تعیین می‌گردد.

از مغلای فوق، مدل تعادلی خطی جذب ساده ترین مدل جذب بوده و درموردی که غلظت آلاینده‌ها نسبتاً پایین است معمولاً بیشتر بکار می‌رود (Miller and Weber, 1986). مدل فرندلیچ نیز اغلب استفاده می‌شود و تا حدودی بیشتر سیستم ها را توصیف می‌کند شکل قانون توان آن منجر به جبهه‌های تیزشورای حالت ویژه $n_F < 1$ می‌شود و برای حالات پیچیده در روش‌های حل، نیاز است که با حالت خطی مقایسه گردد.

مدل لانگمویر برای مواردی که در آن ها، جذب به یک ظرفیت محدود نشان داده شده (به عنوان مثال به وسیله یک پوشش تک لایه ماده حل شده در فاز جامد محدود می‌شود) کاربرد دارد.

در عمل به هنگام مدل سازی پلوم هیدروکربن در مقیاس صحرائی، تعیین مدلی مناسب

برای فرآیند جذب از روی داده های اندازه‌گیری شده در محل وقوع آلودگی مشکل است و لازم است

¹. Self-sharpening fronts

که تصمیمات بر اساس نتایج حاصل از تجربیات ستونی و ناپیوسته آزمایشگاهی با استفاده از محیط جامد خاکها از محل آلوده شده اتخاذ گردند.

۲-۳-۴. تبخیر^۲

انتقال یک ماده شیمیایی از فاز آبی به فاز گازی تبخیر نامیده می شود نرخ تبخیر به وزن مولکولی، قابلیت انحلال و فشار بخار مایع و بعلاوه سطح مشترک گاز مایع بستگی دارد (Parcher, 1999). تبخیر می تواند به اتلاف جرم از زیر سطح زمین به اتمسفر منجر شود. این مکانیزم ممکن است در مقایسه با دیگر فرآیندها کم اهمیت باشد و اهمیت آن با گذشت زمان کمتر شود چون مواد آلی فرار از زیر سطح زمین تهی می گردند. برهمنشان داده است که اتلاف جرم ناشی از تبخیر حتی برای ترکیبات هیدروکربنی کمتر فرار، بسیار پایین می باشد. ارزیابی مهاجرت بخارات هیدروکربنی با مدل های مختلفی صورت می گردد که در ادامه به آنها اشاره می شود.

انتقال جرم یک گونه NAPL در آب زیرزمینی به فاز بخار، E_w^g از رابطه زیر محاسبه می گردد (Guarnaccia et al., 1997):

$$E_w^g = K_w^g (HC_N^w - C_N^g) \quad (۱۳-۲)$$

$$H = C_N^g / C_N^w \quad (۱۴-۲)$$

$$K_w^g = \beta_1^{gw} (\theta S_w)^{\beta_2} \quad (۱۵-۲)$$

که در آن:

K_w^g : نرخ تبخیر است؛

C_N^w : غلظت گونه NAPL در فاز آبی؛

C_N^g : غلظت گونه NAPL در فاز بخار؛

^۱. Batch

^۲. Volatilization

H : ثابت هنری است؛

S_w : اشباع آب؛

β_2 : ثابت تجربی تقریباً معادل ۰/۵؛

β_1^{gw} : ضریب نرخ است و با برازش با داده‌های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد.

غلظت در فاز بخار متناسب با غلظت در آب زیرزمینی در بالای سطح آب زیرزمینی افزایش می‌یابد تا به اشباع برسد. غلظت فاز بخار غشیده با استفاده از رابطه زیر تخمین زده می‌شود (Johnson et al., 1990; Johnson and Ettinger, 1991):

$$SVPC = \frac{VP \bullet MW}{T} \quad (16-2)$$

که در آن:

$SVPC$: غلظت فاز بخار اشباع شده؛

VP : فشار بخار آلاینده؛

MW : وزن ملکولی؛

T : دمای خاک.

مدل انتقال جرم از فاز آزاد NAPL از بخار به صورت زیر تعیین می‌گردد (Guarnaccia et al., 1997):

$$E_N^g = K_N^g (\bar{C}_N^g - C_N^g) \quad (17-2)$$

$$K_N^g = \beta_1^{gN} (\theta S_N)^{\beta_2} \quad (18-2)$$

که در آن:

K_N^g : نرخ است که تعادل در آن حاصل می‌گردد؛

$\bar{C}_N^g$: ثابت تعادل غلظت بخار گونه NAPL در فاز گازی است؛

β_2 : ثابت تجربی تقریباً معادل ۰/۵؛

β_1^{gN} : ضریب نرخ است و با برازش با داده‌های آزمایشگاهی یا صحرایی موجود تعیین می‌گردد.

برای یک منبع خاکی فرض می‌شود که غلظت فاز بخار مستقیماً بالای خاک در تعادل با منبع
 بلشرایسن صورت، به وسیله رابطه زیر به غلظت خاک مرتبط شود
 (Johnson et al., 1990; Johnson and Ettinger, 1991):

$$C_{source} = \frac{C_{soil} \cdot H \cdot \rho_b}{\theta_w + k_d \cdot \rho_b + H \cdot \theta_a} \quad (19-2)$$

که در آن:

C_{source} : غلظت فاز بخار در بالای منطقه منبع بر حسب؛

C_{soil} : غلظت در منطقه منبع خاک بر حسب؛

ρ_b : دانسیته بلایک خاک؛

θ_w : آب محتوی حجمی در منطقه منبع خاک؛

θ_a : محتوی حجمی هوا در منطقه منبع خاک؛

k_d : ضریب جزءبندی خاک - آب.

غلظت فاز بخار تعادلی که متناسب با غلظت خاک تا حد اشباع آن افزایش می‌یابد با استفاده از
 رابطه زیر محاسبه می‌گردد (Johnson et al., 1990; Johnson and Ettinger, 1991):

$$C_{sat} = \frac{S}{\rho_b} \cdot [H \cdot \theta_a + \theta_w + k_d \cdot \rho_b] \quad (20-2)$$

که در آن:

C_{sat} : غلظت فاز بخار اشباع شده؛

S : قابلیت انحلال مولفه خالص در آب.

در صورت حضور فاز باقی‌مانده در خاک، غلظت بخار از غلظت خاک مستقل است ولی با بخش
 مولی مولفه‌های مخلوط فاز باقی‌مانده متناسب است.

فلاکس جرمی از فاز به اتمسفر از طریق منطقه اشباع نشده می‌تواند به صورت زیر تعیین شود
 (Kim and Corapcioglu, 2003):

$$E_N^A = (\theta_a D_a + \theta_w D_w H) \frac{(C_g^S - C_A)}{d} \quad (2-21)$$

که در آن:

D_a : ضریب نفوذ موثر آلاینده در فاز گاز؛

D_w : ضریب نفوذ موثر آلاینده در فاز مایع منطقه اشباع نشده؛

C_A : غلظت آلاینده در اتمسفر؛

C_g^S : اشباع فاز بخار آلاینده‌ها در تعادل با فاز NAPL؛

d : عمق منطقه اشباع نشده.

۲-۳-۵. تجزیه بیولوژیکی

تجزیه بیولوژیکی فرآیندی است که به واسطه آن هیدروکربن‌ها به وسیله میکروارگانیسم‌ها به واسطه یک سری واکنش‌های اکسیداسیون و احیای تسریع شده با آنزیم مصرف می‌شوند (Parcher, 1999). تجزیه بیولوژیکی بلند مدت فرآیند غالبی است که جرم کل حل شده در یک پلوم حاصلان انحلال از منابع NAPL را کاهش می‌دهد همانند مواد شیمیایی محلول، هیدروکربن‌ها در معرض واکنش‌های غیر بیولوژیکی و بیولوژیکی هستند. تغییر شکل‌های میکروبی (بیولوژیکی) مکانیزم عمده رفع آلاینده هستند، چون نرخ‌های مربوط به واکنش‌های بیولوژیکی اغلب در مقایسه با نرخ‌های واکنش‌های غیر بیولوژیکی تا چند برابر سریع‌تر هستند (Prommer et al., 2003). تجزیه هیدروکربن‌های نفتی به صورت یک واکنش اکسیداسیون - احیا که در آن هیدروکربن‌ها با یک نرخ قابل ملاحظه‌ای اکسید می‌شوند، وقتی رخ می‌دهد که اگر:

۱. الکترون گیرنده آبی (O_2 , NO_3^- , SO_4^{2-} , CO_2) یا الکترون گیرنده‌های کانی شکل به سهولت موجود باشند.
۲. جمعیتی از باکتری‌های مصرف کننده ترکیبات هیدروکربنی حضور داشته باشند (حداقل در غلظت پایین).

۳. نیازمندیهای مواد مغذی اصلی برای باکتریها از قبیل نیتروژن، فسفر یا فلزات جزئی حضور داشته باشند.

علی‌رغم تسریع نرخ واکنش به وسیله باکتری‌ها، در بیشتر موارد واکنشها به صورت سینتیکی کنترل می‌شوند، به عبارت دیگر واکنش‌ها به قدر کافی سریع پیشرفت نمی‌کنند تا مدل‌های تعادلی استفاده شوند اگر چندین الکترون‌گیرنده در تجزیه بیولوژیکی ترکیبات آلی شرکت داشته باشند، مصرف آن‌ها معمولاً ترتیب اولویت ترمودینامیکی آن‌ها یعنی به ترتیب کاهش انرژی آزاد گیبس واکنش خواهد بود، مگر این که مرحله الکترون‌گیری یک مرحله محدود کننده نرخ باشد این موضوع ممکن است در مورد الکترون‌گیرنده‌های کانی شکل رخ دهد. اگر اکسیژن در آبخانه حضور داشته باشد در ابتدا و به دنبال آن نیترات (Koussis et al., 2003) مصرف می‌گردد تحت شرایط استاندارد، ممکن است احیای آهن یا گاهی اوقات احیای منگنز، بعد از این که نیترات تهی شد رخ دهد. با این حال، مواردی وجود دارد که ممکن است احیای سولفات در ابتدا رخ دهد، زیرا این فرآیند از لحاظ ترمودینامیکی مطلوب‌تر است یا یک نتیجه محدودیتهای سینتیکی انحلال کانیهای آهن سه ظرفیتی است (Prommer et al., 2003) طی تجزیه هوازی و احیای نیترات، سولفات، آهن و منگنز، کربن داخل آلاینده‌های آلی تبدیل می‌شود یعنی بسته به شرایط طوشئیمیایی به کربن غیر آلی مخصوصه شکل CO_2 (آب) همچنین به شکل کانیهای کربناته از قبیل کلسیت یا سیدریت کانی‌سازی می‌شود. CO_2 به عنوان محصول نهایی ممکن است به عنوان یک الکترون‌گیرنده عمل کند که به موجب آن کربن به صورت بخشی به متان تبدیل می‌شود.

ترینادووش برای توصیف ریاضی مصرف تابع زمان جرم ترکیبات آلی به واسطه تجزیه

بیولوژیکی و شیمیایی هر وابستگی نرخ تغییر شکل ماده آلی به غلظت دیگر مواد شیمیایی یا

جمعیههای میکروبی است با توجه به این فرضیات، متداول ترین مدل سینتیک تجزیه، مدل مرتبه

اول است که به صورت زیر ارائه می‌گردد (Bekins et al., 1998):

$$R_{deg,org} = -k_1 C_{org} \quad (2-22)$$

که در آن:

k_1 : ثابت سینتیک تجزیه بیولوژیکی مرتبه اول.

این مدل فرض می کند که تنها عامل مؤثر بر نرخ تجزیه بیولوژیکی غلظت آلاینده است. این مورد ممکن است تحت برخی شرایط دیده شود اما خیلی غالب نیست در این مدل، وابستگی فرآیند تجزیه بیولوژیکی به حضور یک الکترون گیرنده یا بیشتر کاملاً نادیده در نظر گرفته شده است. اگر چه مدل مرتبه اول اغلب به خوبی به داده های مشاهده شده در آزمایشگاه یا در صحرای برازش می کند اما ثابت سینتیک (k_1) به دست آمده در فرآیند برازش معمولاً برای پیش بینی در سایر محل ها با ویژگی های هیدروژئوشیمیایی، ترکیبات آلی و هندسه منبع مختلف قابل استفاده نیستند.

مدل ساده ای که میزان دسترسی به یک الکترون گیرنده (غالب) را در نظر می گیرد به وسیله بوردن و همکاران و کوسیس و همکاران پیشنهاد شد (Borden et al., 1986; Koussis et al., 2003).

این مدل فرض می کند که واکنش تجزیه بیولوژیکی لحظه ای جایی که هم آلاینده و هم الکترون دهنده به طور هم زمان حاضر باشند، رخ می دهد. یعنی واکنش تنها از طریق میزان دسترسی به هر یک از دو واکنش دهنده محدود می شود. شواهدی یک مرحله زمانی t معادلات ریاضی برای واکنش دهنده ها عبارتند از (Barry et al., 2002):

$$R_{deg,org} = -\frac{C_{org}}{\Delta t} \quad \text{if} \quad C_{org} \leq \frac{f_{org}}{f_{EA}} C_{EA}$$

$$R_{deg,org} = -\frac{f_{org}}{f_{EA}} \frac{C_{EA}}{\Delta t} \quad \text{if} \quad C_{org} > \frac{f_{org}}{f_{EA}} C_{EA} \quad (2-23)$$

که در آن:

C_{EA} : غلظت الکترون گیرنده؛

f_{EA} و f_{org} : ضرایب استوکیومتری به ترتیب برای ترکیب آلی و الکترون گیرنده.

اولین عبارت در معادله (۲-۳۳) حالتی است که غلظت آلاینده نرخ واکنش را محدود می‌کند در حالی که عبارت دوم وقتی بکار می‌رود که غلظت الکتروگیرنده محدود کننده است. جنبه کلیدی مدل واکنش لحظه‌ای آن است که غلظت حداقل یکی از گونه‌های واکنشی در همه زمان‌ها و در همه جا صفر است (Koussis et al., 2003). مقایسه با مدل مرتبه اول، مدل واکنش لحظه‌ای به انجام همزمان انتقال و واکنش‌ها برای الکتروگیرنده نیاز دارد، یعنی مسئله یک مسئله انتقال چند گونه‌ای است برای مدل واکنش لحظه‌ای، معادله انتقال حاکم برای گونه دوم یعنی الکتروگیرنده از رابطه زیر به دست می‌آید (Prommer et al., 2003):

$$\frac{\partial C_{EA}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ij} \frac{\partial C_{EA}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v C_{EA}) + \frac{q_s}{\theta} C_{EA,q} + R_{EA,deg} + R_{EA,sorb} \quad (2-24)$$

که در آن:

$R_{EA,deg}$ و $R_{EA,sorb}$ بارهای واکنش بوده که به ترتیب تغییرات غلظت به واسطه تجزیه بیولوژیکی ترکیب آلی و جذب را نشان می‌دهند.

عبارت واکنش مربوط به مصرف الکتروگیرنده طی تجزیه بیولوژیکی به وسیله معادله زیر تعیین می‌شود (Prommer et al., 2003):

$$R_{EA,deg} = -\frac{f_{EA} C_{org}}{f_{org} \Delta t} \quad \text{if} \quad C_{org} \leq \frac{f_{org}}{f_{EA}} C_{EA}$$

$$R_{EA,deg} = -\frac{C_{EA}}{\Delta t} \quad \text{if} \quad C_{org} > \frac{f_{org}}{f_{EA}} C_{EA} \quad (2-25)$$

لو و همکاران مدل واکنشی ساده دیگری را پیشنهاد دادند که وابستگی نرخ به دسترسی آلاینده و الکتروگیرنده را ادغام می‌کند (Lu et al., 1999). اگر تنها یک الکتروگیرنده در نظر گرفته شود، مدل مرتبه اول در معادله (۲-۳۴) ممکن است به وسیله مدلی که سینتیک‌های نوع Michaelis-Menten ادغام می‌کند، جانشین شود که به عبارت واکنش تجزیه زیر منتهی می‌گردد (Prommer et al., 2003):

$$R_{org,deg} = -k_1 C_{org} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} \quad (26-2)$$

که در آن:

K_{EA} : ثابت نیمه اشباع الکترون گیرنده.

مدل سینتیک Michaelis-Menten این فرض که مقدار کافی الکترون گیرنده

در محیط موجود باشد به صورت زیر نیز بیان می گردد (Simpkins and Alexander, 1984;)

(Bekins et al., 1998; Schafer et al., 2005):

$$\frac{\partial C_{org}}{\partial t} = -v_M \frac{C_{org}}{K_{org} + C_{org}} \quad (27-2)$$

که در آن:

v_M : حداکثر نرخ تجزیه؛

K_{org} : ثابت نیمه اشباع ماده آلی.

از معادله فوق دو تقریب فرموله می شود (Bekins et al., 1998; Schafer et al., 2005). انتخاب

این تقریب برای یک مورد خاص به مقدار نسبی C_{org} و K_{org} بستگی دارد. وقتی C_{org} چندین مرتبه

کوچکتر از مقدار K_{org} باشد ($C_{org} \ll K_{org}$) معادله (27-2) تبدیل به سینتیک مرتبه اول (معادله

(22-2)) می گردد. وقتی که C_{org} چندین مرتبه بزرگتر از مقدار K_{org} باشد ($C_{org} \gg K_{org}$)

معادله (27-2) تبدیل به سینتیک مرتبه صفر می شود:

$$\frac{\partial C_{org}}{\partial t} = -v_M \quad (28-2)$$

مدل دیگری که معمولاً برای تعیین عبارت مربوط به تجزیه بیولوژیکی استفاده می شود، عبارت

دوتایی Michaelis-Menten را به شرح ذیل ادغام می کند (Prommer et al., 2003):

$$R_{org,deg} = -k_2 \frac{C_{org}}{K_{org} + C_{org}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} \quad (29-2)$$

که در آن:

k_2 : ثابت واکنش (شبه مرتبه دوم).

عبارت واکنشی متناظر برای الکترون گیرنده با توجه به ضریب استوکیومتری واکنش مورد نظر

از رابطه زیر به دست می‌آید (Prommer et al., 2003):

$$R_{EA,deg} = \frac{Y_{EA}}{Y_{org}} R_{org,deg} \quad (30-2)$$

مانکد و بانگی نرخ های رشد تحت محدودیت دوگانه جزء مورد عمل را به صورت میانگین وزنی

نرخ‌ها تحت محدودیت‌های ماده مغذی بیان کردند (Mankad and Bungay, 1988):

$$\frac{\mu}{\mu_{max}} = \frac{\frac{K_1}{C_1}}{\frac{K_1}{C_1} + \frac{K_2}{C_2}} \left(\frac{C_1}{K_1 + C_1} \right) + \frac{\frac{K_2}{C_2}}{\frac{K_1}{C_1} + \frac{K_2}{C_2}} \left(\frac{C_2}{K_2 + C_2} \right) \quad (31-2)$$

که در آن:

μ : نرخ رشد ویژه؛

μ_{max} : حداکثر نرخ رشد ویژه؛

K_1 : ثابت نیمه اشباع جزء مورد عمل اول؛

K_2 : ثابت نیمه اشباع جزء مورد عمل دوم؛

C_1 : غلظت فاز آبی جزء مورد عمل اول؛

C_2 : غلظت فاز آبی جزء مورد عمل دوم.

همانطور که قبلا اشاره شد، تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن‌های نفتی ممکن است شامل چندین

الکتروگیرنده باشد که معمولا در یک روش زنجیره ای استفاده می‌شوند بنابراین تعداد واکنش های

انتقال مورد نیاز که به طور هم زمان حل می‌شوند، افزایش بیشتری می‌یابند عبارت تجزیه مناسب

برای ترکیب آلی پیشنهاد شده به وسیله لو و همکاران شامل مجموع عبارات منحصر به فرد برای هر

مرحله در فرآیند تجزیه (اکسیداسیون و احیا) است (Lu et al, 1999):

$$R_{org,deg} = R_{org,O_2} + R_{org,NO_3^-} + R_{org,Mn^{2+}} + R_{org,Fe^{2+}} + R_{org,SO_4^{2-}} + R_{org,CH_4} \quad (32-2)$$

که در آن:

R_{org,CH_4} و $R_{org,SO_4^{2-}}$ ، $R_{org,Fe^{2+}}$ ، $R_{org,Mn^{2+}}$ ، R_{org,NO_3} ، R_{org,O_2} ترتیب عبارات تجزیه هوازی، نیترات‌زدایی، احیای منگنز، احیای آهن، احیای سولفات و متان‌زایی را نشان می‌دهند.

روش معمول مدل‌سازی مصرف زنجیره ای الکترون گیرندها در مدل‌های چند گونه ای، معرفی عبارات اضافی در معادله (۲-۹) به طوری که $R_{EA,deg}$ در حضور الکترون گیرندهای مطلوب‌تر از نظر ترمودینامیکی قابل اغماض باقی بماند و تنها یکی از عبارات در سمت راست معادله (۲-۳۲) به طور قابل ملاحظه‌ای از صفر در یک زمان فاصله می‌گیرد. مثالی، تجزیه یک ترکیب آلی به واسطه نیترات‌زدایی در حضور اکسیژن به صورت زیر مدل می‌شود (Prommer et al., 2003):

$$R_{org,NO_3^-} = -k_{NO_3^-} C_{org} \frac{K_{inh,O_2}}{K_{inh,O_2} + C_{O_2}} \frac{C_{NO_3^-}}{K_{NO_3^-} + C_{NO_3^-}} \quad (2-33)$$

که در آن:

$k_{NO_3^-}$: ثابت نرخ نیترات‌زدایی؛

$K_{NO_3^-}$: ثابت نیمه اشباع نیترات؛

C_{O_2} : غلظت آبی اکسیژن؛

$C_{NO_3^-}$: غلظت آبی نیترات؛

K_{inh,O_2} : ثابت بازداری اکسیژن.

برای دیگر فرآیندهای تجزیه، شکل‌های اصلاح شده‌ای از معادله (۲-۳۳) موجود است.

هر چند که فعالیت میکروها در بیشتر موارد مسئول مستقیم رفع قابل ملاحظه ای از جرم آلاینده‌در مقایسه با رفع جرم به وسیله واکنش های غیر بیولوژیکی هستند، عبارات نرخ در معادله (۲-۳۳) و تمام مدل‌هایی که قبلاً به آن ها اشاره شد صریحاً یک وابستگی نرخ به غلظت‌های میکروبی را ادغام نمی‌کنند بنابراین این روش‌ها برای شبیه سازی سیستمی زیر سطحی جایی که تغییرات زمانی غلظت‌های باکتریها نقش مهمی را بازی می‌کنند مناسب نیستند معادلاتی که دینامیک

میکروبی را توجیه می کنند (ز جمله مدل موندر^۱ اساس این فرضیه هستند که کسر ویژه ای از تجزیه کربن آلی (در آلاینده) به مواد سلولی تبدیل می شود در حالی که کسر باقی مانده به CO₂ یعنی کربن غیر آلی تبدیل می گردد. ترکیب مواد سلولی در بیشتر موارد به C₅H₇O₂N نزدیک است . معادله موازنه جرم برای جرم میکروبی تغییر غلظت میکروبی را به عنوان تابعی از زمان توصیف می کند و شامل هر دو عبارت رشد و عبارت تخریب است (Prommer et al., 2003):

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial X_{growth}}{\partial t} + \frac{\partial X_{decay}}{\partial t} \quad (34-2)$$

رشد میکروبی یعنی تبدیل به ماده سلولی معمولاً صورت زیر توصیف می شود

(Celia et al., 1989; Kindred and Celia, 1989; Lensing et al., 1994; Essaid et al., 1995;)

:(Schafer et al., 1998; Cirpka and Valocchi, 2007, Mohamed et al, 2010

$$\frac{\partial X_{growth}}{\partial t} = \mu_{max} \frac{C_{org}}{K_{org} + C_{org}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} X \quad (35-2)$$

که در آن:

X : غلظت میکروبی است.

و عبارت تخریب به صورت زیر بیان می گردد:

$$\frac{\partial X_{decay}}{\partial t} = -k_{dec} X \quad (36-2)$$

که در آن:

k_{dec} : ثابت نرخ تخریب است.

نرخ رفع ترکیب آلی با نرخ رشد میکروبی متناسب است. بنابراین عبارت واکنش $R_{org,deg}$ در

معادله (۱-۲) می تواند از رابطه زیر حاصل شود (Prommer et al., 2003):

$$R_{org,deg} = \frac{\mu_{max}}{Y} f_{org} \frac{C_{org}}{K_{org} + C_{org}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} X \quad (37-2)$$

که در آن:

^۱. Monod

Y : ضریب بازده واکنش است (جرم سلول‌های تولید شده بر جرم ترکیب تجزیه شده).

به طور مشابه، مصرف الکتروگئیننده طی رشد میکروبی از رابطه زیر حاصل

می‌شود (Prommer et al., 2003; Schafer et al., 2005; Cirpka and Valocchi, 2007; Mohamed et al., 2010):

$$R_{EA,deg} = \frac{\mu_{max}}{Y} f_{EA} \frac{C_{org}}{K_{org} + C_{org}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} X \quad (38-2)$$

$$R_{EA,deg} = f_{EA} R_{org,deg} \quad (39-2)$$

معادله (۲-۳۷) عبارت واکنش تجزیه بیولوژیکی (صرفنظر از دینامیک میکروبی) را توصیف می‌کند، خیلی به معادله (۲-۳۷) شبیه است. واقع جایی که رابطه (۲-۴۰) برقرار باشد، معادله (۲-۲۹) را می‌توان به عنوان حالت ویژه‌ای برای معادله (۲-۳۷) در نظر گرفت:

$$k_2 = \mu_{max} X \quad (40-2)$$

یعنی حالتی که جرم میکروبی^۱ در زمان (و مکان) ثابت فرض می‌شود. فرمول بندی رشد میکروبی فوق فقط برای مصرف یک آلاینده آلی بکار می‌رود. در حالت واقعی، آلودگی بندرت شامل یک ترکیب آلی منفرد یا مخلوطی از ترکیبات با مشخصات فیزیک و شیمیایی یکسان می‌باشد. بنابراین، چندین مدل برای لحاظ مصرف همزمان چندین آلاینده (مثلاً بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلن (BTEX)) به وسیله گروه‌های باکتریایی یکسان پیشنهاد شده‌اند. برای مثال، مدل کیندرد و سلیا که توسط ایسید و همکاران و اسکافر و همکاران نیز استفاده شد، برای موازنه جرم یک جمعیت میکروبی به صورت زیر پیشنهاد شده است (Prommer et al., 2003):

$$\frac{\partial X_{growth}}{\partial t} = \sum_{n=1, n_{org}} \frac{\partial X_{growth,n}}{\partial t} \quad (41-2)$$

در مقایسه با معادله (۲-۳۵)، هر یک از عبارات رشد $\frac{\partial X_{growth,n}}{\partial t}$ در معادله (۲-۴۱)، می‌تواند به صورت معادله (۲-۴۲) نتیجه شود:

^۱. Microbial mass

$$\frac{\partial X_{growth,n}}{\partial t} = \mu_{max}^n \frac{C_{org,n}}{K_{org,n} + C_{org,n}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} \quad (42-2)$$

بیشترین نرخ‌های مصرف μ_{max}^n می‌تواند بین آلاینده‌های مختلف، متفاوت باشد. در این روش، مدل‌سازی تجزیه الکترون دهنده‌های مختلف در نرخ‌های متفاوت ممکن می‌شود، مثلاً بنزن خیلی آهسته‌تر از تلوئن تجزیه می‌شود.

در حالتی که یک جزء مورد عمل، از تجزیه بیولوژیکی دیگر ترکیبات موجود جلوگیری میکند، مدل اصلی موند دیگر مناسب نیست. در این مورد، مشتقات مدل موند که تصحیحاتی را برای بازداری جزء مورد عمل فراهم می‌سازند، متوانند برای توصیف سینتیک تجزیه بیولوژیکی استفاده شوند. در بین این مدل‌ها، معادله آندروز^۱ به طور گسترده ای استفاده می‌گردد (Littlejohns and Daugulis, 2008; Trigueros et al. 2010):

$$\mu = \mu_{max} \frac{C}{K_C + C + \frac{C^2}{K_i}} \quad (43-2)$$

که در آن:

C : غلظت فاز آبی ترکیب؛

K_C : ثابت نیمه اشباع ترکیب؛

K_i : ثابت بازداری جزء مورد عمل است.

اگر $K_i \gg C$ باشد، مدل آندروز به مدل موند تبدیل می‌گردد.

مدل زیر که تعمیم یافته سینتیک موند بوده و اولین بار به وسیله هان و لونسپیل^۲ (۱۹۸۸)

مطرح گردید برای شبیه‌سازی تجزیه جزء مورد عمل در غلظت پایین و بازداری جزء مورد عمل در

غلظت‌های بالا استفاده شده است (Okpokwasili and Nweke, 2005):

^۱. Andrews

^۲. Han and Levenspiel

$$\mu = \frac{\mu_{\max} \left(1 - \frac{C}{C_m}\right)^n}{S + K_C + \left(1 - \frac{C}{C_m}\right)^m} \quad (44-2)$$

که در آن:

C_m : غلظت بحرانی بازدارنده است که به ازای مقادیر بیشتر از آن واکنش تجزیه متوقف می‌گردد؛

n و m : ضرایب ثابت هستند.

به عنوان مثال، بیشتر ترکیبات هیدروکربنی (شامل بنزن، تلون، اتیل بنزن و زایلنها) به عنوان ترکیبات سمی مطرح هستند و در غلظت های زیر حد قابلیت انحلال آنها قادر به مرگ سلول های میکروبی می‌باشند (Sanders, 2002). بنابراین، در موقعیتهایی که مقدار کافی از این ترکیبات حضور دارند (مثلا، یک مایع فاز غیر آبی مانند یک حلال خالص یا گازوئیل در تماس با آب) پتانسیل لازم برای بازداری کامل از فعالیت میکروبی و در نتیجه تجزیه بیولوژیکی ترکیب بازدارنده وجود دارد. های بلبلاری رقابتی اولین بار به وسیله یون و همکاران¹ (۱۹۷۷) مطرح شدند. این مدلها نشان می‌دهند که هر جزء مورد عمل یک اثر بازدارنده رقابتی روی مصرف دیگر ترکیبات دارد. سینتیگتی جزء مورد عمل می‌تواند برای توصیف مصرف همزمان و ترتیبی مخلوط آلاینده‌ها بکار برده شود. (Littlejohns and Daugulis, 2008; Trigueros et al., 2010):

$$\mu = \frac{\mu_{\max_i} C_i}{K_{C_i} + C_i + \sum_{j \neq i} C_j \left(K_{C_i} / K_{C_j} \right)} \quad (45-2)$$

یون و همکاران (۱۹۷۷) مدل SKIP را با اضافه کردن یک نوع غیر مشخص از فعل و انفعالات در مدل های سینتیکی ارائه دادند توصیف ریاضی این مدل، تنظیم فعل و انفعالات غیر مشخص بین اجزای مورد عمل را با ادغام پارامتر فعل و انفعال I_{ji} در مدل ارائه می‌دهد مقدار پارامتر I_{ji} نشان دهنده درجه است که در آن جزء مورد عمل، تجزیه بیولوژیکی جزء مورد عمل را متأثر می‌سازد یعنی مقادیر بالای I_{ji} فعل و انفعالات قوی تر متناظر است مدل یون و همکاران

¹. Yoon et al

به قرار زیر است (Okpokwasili and Nweke, 2005; Littlejohns and Daugulis, 2008;)

(Trigueros et al., 2010):

$$\mu = \frac{\mu_{\max_i} S_i}{K_{S_i} + S_i + \sum_{j \neq i} S_j I_{ji}} \quad (۴۶-۲)$$

پاپ و همکاران برای یک سیستم ساده شامل یک جزء مورد عمل، یک الکترون گیرنده و یک

گونه بیولوژیکی، معادلات تجزیه بیولوژیکی را به صورت زیر بیان کردند (Pope et al., 1999):

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\beta k \bar{X}}{m_c} (C - \bar{C}) - \frac{\mu_{\max} X}{Y} \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{A}{K_{EA} + A} \right) - k_{abio} C \quad (۴۷-۲)$$

$$\frac{d\bar{C}}{dt} = -\frac{\beta k}{V_c} (C - \bar{C}) - \frac{\mu_{\max} \rho_X}{Y} \left(\frac{\bar{C}}{K_C + \bar{C}} \right) \left(\frac{\bar{A}}{K_{EA} + \bar{A}} \right) - k_{abio} \bar{C} \quad (۴۸-۲)$$

$$\frac{dA}{dt} = -\frac{\beta k \bar{X}}{m_c} (A - \bar{A}) - \frac{\mu_{\max} X E}{Y} \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{A}{K_{EA} + A} \right) \quad (۴۹-۲)$$

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = -\frac{\beta k}{V_c} (A - \bar{A}) - \frac{\mu_{\max} \rho_X E}{Y} \left(\frac{\bar{C}}{K_C + \bar{C}} \right) \left(\frac{\bar{A}}{K_{EA} + \bar{A}} \right) \quad (۵۰-۲)$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{\max} X \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{A}{K_{EA} + A} \right) - k_b X \quad (۵۱-۲)$$

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = \mu_{\max} \bar{X} \left(\frac{\bar{C}}{K_C + \bar{C}} \right) \left(\frac{\bar{A}}{K_{EA} + \bar{A}} \right) - k_b \bar{X} \quad (۵۲-۲)$$

که در آنها:

C : غلظت ترکیب در فاز آبی؛

$\bar{C}$: غلظت ترکیب در بیومس چسبیده؛

A : غلظت الکترون گیرنده در فاز آبی؛

$\bar{A}$: غلظت الکترون گیرنده در بیومس چسبیده؛

X : غلظت فاز آبی بیومس غیر متصل یا آزاد؛

$\bar{X}$: غلظت بیومس چسبیده، جرم سلول های چسبیده بر حجم فاز آبی؛

E : جرم الکترون گیرنده مصرف شده بر جرم ترکیب تجزیه شده؛

β : مساحت سطح یک میکروکلنی؛

k : ضریب انتقال جرم؛

ρ_X : دانسیته بیومس، جرم سلول‌ها بر حجم بیومس؛

V_c : حجم یک میکروکلنی؛

m_c : جرم سلول‌ها در یک میکروکلنی ($m_c = r_X V_c$)؛

K_C : ضریب نیمه اشباع ترکیب؛

k_b : ضریب تخریب درونی^۱؛

k_{abio} : ثابت نرخ تخریب مرتبه اول غیربیولوژیکی.

معادله (۲-۴۷) سه عبارت برای مصرف ترکیب آلاینده از فاز آبی را شامل می‌گردد:

- نفوذ ترکیب آلاینده از میان یک لایه مایع راکد که به بیومس چسبیده است؛
- تجزیه بیولوژیکی ترکیب آلاینده به وسیله میکروارگانیسم‌های آزاد در فاز آبی؛
- اتلاف غیر بیولوژیکی ترکیب آلاینده از طریق واکنش‌های مرتبه اول.

واکنش تجزیه بیولوژیکی به وسیله غلظت ترکیب آلاینده و الکتروگرندگی از طریق عبارات معادله موند محدود می‌شود.

معادله (۲-۴۸) ترکیب آلاینده را در بیومس چسبیده توصیف می‌کند و برای یک

میکروکلنی نوشته می‌شود. معادله نفوذ ترکیب آلاینده در بیومس چسبیده، تجزیه بیولوژیکی

ترکیب آلاینده در بیومس و تجزیه غیربیولوژیکی ترکیب آلاینده را شامل می‌گردد.

معادلات (۲-۴۹) و (۲-۵۰) الکترون گیرنده را توصیف می‌کنند این معادلات شکل

یکسانی با معادلات (۲-۴۷) و (۲-۴۸) توصیف عبارات نفوذ از میان یک غشای مایع و اتلاف بر اثر

واکنشهای تجزیه بیولوژیکی دارند. عبارات نرخ تجزیه بیولوژیکی در ضریب E جرم الکترون گیرنده

^۱. Endogenous

مصرف شده بر جرم ترکیب آلاینده تجزیه شده (ضرب می شوند. معادلات (۵۱-۲) و (۵۲-۲) به ترتیب رشد و تخریب بیومس چسبیده و بیومس آزاد را توصیف می کنند. ارتباط بین غلظت بیومس چسبیده $\bar{X}$ در معادلات (۴۷-۲) (۴۹-۲) و (۵۲-۲) با دانسیته بیومس، حجم میکروکلنی و جرم میکروکلنی به صورت زیر بیان می گردد:

$$\bar{X} = \frac{C_c \rho_b m_c}{N \theta} \quad (۵۳-۲)$$

که در آن:

C_c : تعداد سلول ها بر جرم جامد؛

N : تعداد سلول ها در میکروکلنی (یک ثابت).

چون دانسیته بیومس، تعداد سلول ها در میکروکلنی، تخلخل و جرم سلول ها در میکروکلنی ثابت فرض می شوند، لذا تغییرات در $\bar{X}$ واقع با تغییرات در C_c یا با C_c/N متناظر می باشد (Molz et al., 1986). نواحی در دسترس برای انتقال گونه ها از فاز آبی به بیومس مستقیماً با $\bar{X}$ متناسب می باشند. زیرا مساحت سطح در هر میکروکلنی ثابت است.

اگر از انتقال جرم خارجی چشم پوشی شود، سیستم معادلات (۶ معادله) به سه معادله

شامل معادله (۵۲-۲) و یک معادله برای هر اتلاف ترکیب آلاینده و الکترون گیرنده کاهش می یابد:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\mu_{\max} \bar{X}}{Y} \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{A}{K_{EA} + A} \right) - k_{abio} C \quad (۵۴-۲)$$

$$\frac{dA}{dt} = -\frac{\mu_{\max} \bar{X} E}{Y} \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{A}{K_{EA} + A} \right) \quad (۵۵-۲)$$

مهای بالا بر اساس یک مدل مفهومی بوده که فرض می کند تغییرات هیدروژنوشیمیایی

ناشی از آلودگی هیدروکربنی می تواند تنها به وسیله مدل سازی واکنشهای تجزیه بیولوژیکی اصلی

یعنی اکسیداسیون کوپل شده هیدروکربن ها با احیاء یک الکترون گیرنده یا بیشتر، با دقت قابل قبول

تقریب زده شود. مدل های با فرمول بندی پیچیده تر در موارد زیر لازم

می شوند (Prommer et al., 2003):

• اطلاعات اضافی در مورد تحول محصولات نهایی واکنش مورد نیاز باشند .

• واکنش دهلیه اصلی به طور همزمان با سایر واکنش ها که به طور مستقل پیشرفت می کنند (در یک مقیاس زمانی قابل مقایسه) یا در پاسخ به واکنشهای تجزیه بیولوژیکی درگیر هستند.

مورد اول برای بکارگیری رقیق سازی طبیعی به عنوان یک طرح به سازی دارای اهمیت است . در این حالت، تغییرات ژئوشیمیایی حاصله از واکنش های تجزیه بیولوژیکی برای نشان دادن وقوع فرآیندهای رقیق سازی استفاده می شوند (Prommer et al., 2003) بجایی که آلاینده ها اکسید میشوند، تغییرات ژئوشیمیایی معمولاً شامل تغییراتی در خاصیت قلیایی، کربن غیر آلی کل (TIC)^۱ و شکلهای احیاء شده الکترون گلیکولیک سولفید و آهن دو ظرفیتی می باشند این گونه ها و گونه های دیگر ممکن است متحمل واکنش های بیشتری شوند که مهم ترین آنها واکنشهای تشکیل رسوب سیدریت، سولفید آهن یا پیریت می باشند. در این جا سؤال مطرح میشود که آیا این واکنشهای (ثانویه) پیشرفت نمی و اگر چنین است با چه نرخ؟ پاسخ به این سؤال خیلی مشکل حالات خیلی ساده ارائه شده در بالا است . وقوع و نرخ این واکنشها به عواملی همچون pH زیرزمینی که در طی تجزیه بیولوژیکی آلاینده های آلی تغییر می کند، بستگی دارد. در چنین حالاتی، عبارات واکنشی در معادله (۲) بعضی از تعداد زیادی مواد شیمیایی (گونه های آبی، کانی ها و ...) هستند و مادل های ژئوشیمیایی که بر پایه اصول ترمودینامیکی هستند، معمولاً برای محاسبه این عبارات استفاده می شوند. در بین مدل های تجزیه بیولوژیکی که شامل فرآیندهای واکنش دهنده ژئوشیمیایی می باشند، معمولاً روش مختلف برای فرمول بندی واکنشهای تجزیه بیولوژیکی استفاده می شوند بران و همکاران^۲ مادل بیوژئوشیمیایی را به موارد زیر کلاسه بندی کردند (Brun et al., 2002):

¹. Total Inorganic Carbon

². Brun et al

• مدل‌های فرآیندی تک مرحله، جایی که اکسیداسیون ترکیب آلی و مرحله الکترون گیری به صورت یک واکنش اکسیداسیون- احیاء با یک نرخ ویژه پیشرفت می‌کند؛

• مدل‌های فرآیندی دو مرحله‌ای که در آن فرض می‌شود مرحله اکسیداسیون یک مرحله محدود کننده نرخ است و مرحله الکترون گیری می‌تواند (ممکن است) به صورت یک واکنش تعادلی مدل شود. الکترون گیرنده مورد استفاده در طی تجزیه یک ترکیب آلی یا بیشتر، از قبل تعیین نمی‌شوند اما بر طبق مطلوبیت ترمودینامیکی خود آن‌ها مصرف می‌شوند.

در حال حاضر هر دو نوع مدل انتقال بیوژئوشیمیایی فوق به‌طور معمول برای شبیه سازی مسایل انتقال و تحول آلودگی‌های هیدروکربنی استفاده نمی‌شوند. با این حال، آن‌ها به‌طور افزاینده ای در طرح‌های تحقیقاتی با هدف ارتقاء فهم فرآیندهای بسط‌سازی طبیعی استفاده می‌شوند (Prommer et al., 2003).

۲-۴. مدل سازی عددی^۱

مدل سازی تحول و انتقال هیدروکربن های نفتی در آب های زیرزمینی شامل یک سری مراحل ترتیبی استعارات ریاضی مناسب جهت توصیف فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی درگیر در تحول و انتقال هیدروکربن ها در مدل سازی های عددی مورد نیاز هستند. البته هر محل، مشخصات خاص خود را نسبت به موارد زیر دارد:

- ترکیب آلاینده/مخلوط ؛
- تاریخچه آلودگی و جزئیات موجود از این سابقه؛
- دسترسی داده‌های سخت افزاری و نرم افزاری؛
- هیدروژئولوژی؛
- هیدروژئوشیمی و کانی شناسی.

^۱. Numerical modeling

بنابراین، روش مدل‌سازی به احتیاجات ویژه و شرایط منحصر به فرد هر سایت بستگی دارد .

اولین مرحله در مدل‌سازی عددی انتقال و تحول هیدروکربن های نفتی در سفره آبهای آلوده به این مواد، استفاده و یا توسعه یک مدل جریان آب زیرزمینی است. این مدل اطلاعاتی را در باره مشخصات هیدرولوژیکی و هیدروژئولوژیکی فراهم می سازد و معمولاً لبنایی را برای شبیه سازی‌های بعدی انتقال آلایندها فراهم می سازد. این مرحله از مدل‌سازی دارای اهمیت زیادی است چون هر ناهمخوانی بین مدل جریان و واقعیت، به مدل انتقال منتقل خواهد شد. در بیشتر موارد، یک مدل جریان آب زیرزمینی مناسب می تواند اطلاعات مفیدی را فراهم سازد. در مرحله مدل‌سازی جریان، تغییرات هد هیدرولیکی در یک حوضه آبریز از روی داده های ثبت شده در چاه‌های مشاهداتی و با در نظر گرفتن مناطق تغذیه و تخلیه سفره و همچنین مرزهای آن شبیه سازی می گردانند. مدل ممکن است برای توسعه یک طرح مبنی بر روش‌های به‌سازی هیدرولیکی (مثلاً طرح‌های پمپ و اصلاح) استفاده شود.

اولین مرحله ایجاد یک مدل جریان زیرزمینی در یک منطقه خاص بر اساس توصیف مقدماتی آن منطقه، توسعه یک مدل مفهومی هیدرولوژیکی و هیدروژئولوژیکی است در این مرحله همه اطلاعات زمین‌شناسی و هیدروگرافیکی موجود جمع‌آوری و آنالیز می‌شوند. مدل مفهومی به طور کیفی با در نظر گرفتن موارد زیر فرمول‌بندی می‌شود:

- جهت جریان اصلی آب زیرزمینی؛
- محدوده سفره که ممکن است به صورت مرزهایی در مدل عددی استفاده شوند، از قبیل مرزهای حوزه آبریز (زیر سطحی) و مرزهای خطوط جریان؛
- کد لایه‌های زمین‌شناسی بیشتر و کدام یک کمتر یا خیلی کمتر تراوا هستند . کدام لایه‌ها برای تشکیل یک مرز در مدل عددی مناسب هستند؛
- جریلهای آب در یک حوزه (مدل) انتخابی یا خارج آن و چگونگی تعیین تخمین کمی این جریان‌ها.

سپس لازم است مدل مفهومی به صورت زیر به یک مدل عددی برگردانده شود:

- گسسته‌سازی فضایی حوزه مدل (دامنه جریان)؛

• تخصیص پارامترهای هیدروژئولوژیکی گلبول‌ها شده یا تخمینی سفره از قبیل هدایت

هیدرولیکی، تخلخل...؛

- تخصیص/ تعیین مقادیر اولیه و آغازین از جمله هدهای هیدرولیکی؛

- تخصیص/ تعیین شرایط مرزی استاتیک یا تابع زمان مانند تغذیه؛

• کالیبراسون مدل با استفاده از داده های مشاهده شده / پایش شده (مثلهدهای هیدرولیکی)

به وسیله تغییر پارامترها برای مقادیری که به خوبی شناخته نمی‌شوند.

بر پایه یک مدل جریان آب زیرزمینی کالیبره شده، می توان از مدل انتقال

پهنرفت -پراکندگی برای آلاینده های آلی غیر واکنشی استفاده کردبه ویژه اگر ترکیبات آلی توسط

فرآیندهای بیولوژیکی تجزیه نشوند یا ظاهرا در نرخ‌های آهسته تجزیه شوند، داده‌های پایش شده

برای این ترکیبات می توانند برای کمی کردن، تخمین یا کالیبره کردن ضریب پراکندگی عرضی سفره

استفاده شوندپراکندگی سفره یک پارامتر کلیدی است که بر طول پلوم آلاینده اثر کنترلی

دارد. سایر ویژگی‌های مدل غیر واکنشی عبارتند از:

- شناسایی خطاها در آماده‌سازی/ تخصیص داده‌ها و پارامترها؛

• شناسایی وسعت رقیق سازی که ممکن است برای کاهش غلظت آلایندها در پایین دست یک

منبع آلودگی لازم باشد.

مدل مفهومی در مرحله مدل‌سازی انتقال جرم لزومی ندارد که مشابه مدل مفهومی در مدل جریان

باشد.

مرحله بعدی در یک مدل سازی سیستماتیک، مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی

است. در این مرحله، انتقال کوپل شده چندین گونه شیمیایی و واکنش های شیمیایی بین آن ها مدل

می‌گردد. در این مدل ها، تجزیه بیولوژیکی آلاینده های قابل اکسید که مصرف کننده یک

الکترون گیرنده یا بیشتر می باشد، شبیه سازی می‌شود. مدل های تجزیه بیولوژیکی چند گونه ای به

ت تعیین شرایط اولیه و مرز ی برای هر گونه نیاز دارند. در بیشتر موارد، شرایط اولیه به وسیله غلظت های مناطق غیر آلوده (غلظت های زمینه) تعیین می گردند. در فرآیند مدل سازی، منبع تولید آلودگی به روش های زیر تعیین می گردد:

- با یک فرآیند انتقال جرم (انحلال)؛

- با یک شرط مرزی غلظت ثابت، یعنی غلظت آلاینده در ناحیه منبع ثابت است؛

با یک شرط مرزی فلاکس جایی که آلاینده با یک جرم از پیش تعیین شده بر واحد زمان، مستقل از سرعت واقعی جریان آب زیرزمینی به سفره اضافه می شود.

اولین گزینه معمولاً راهلی را فراهم می کند که بهترین فرآیندها را در یک منطقه آلوده شده منعکس می کند.

در این مرحله نیز به یک مدل مفهومی برای درک بهتر فعل و انفعالات بیوژئوشیمیایی نیاز است. به طور ایده آل، هر یک از مراحل مدلیزی نیاز به کالیبره شدن و اعتبارسنجی با داده های سایت دارند. طرف دیگر، اگر مدل سازی در مرحله اولیه برای ارزیابی یک منطقه آلوده شده باشد، ممکن است نقش اصلی آن شناسایی کمبودهای موجود در داده های یک منطقه یا بررسی رفتار یک آلاینده مخصوص باشد.

در جدول (۱-۲) مراحل اصلی برای انجام مدلیزی انتقال واکنشی توضیح داده شده است. البته تمام مراحل ذکر شده در این جدول ممکن است در تمامی مدلها لازم نباشند و یا این که اجرای آنها امکانپذیر نباشد. حال توجه به هر مرحله در اجرا و ارزیابی مدل سازی بیوژئوشیمیایی توصیه می گردد.

جدول (۱-۲): مراحل اصلی مدل سازی انتقال واکنشی (Prommer et al., 2003).

مرحله	فعالیت
۱	ارزیابی اولیه داده ها، موقعیت موجود برای مدل شدن شناسایی اولیه فعل و انفعالات بالقوه فیزیکی و شیمیایی شامل محاسبات دستی اولیه نرخ های جریان و موازنه الکترون اولیه، جایی که ممکن باشد.

۲	تهیه و تنظیم یک مدل مفهومی اولیه برای منطقه آلوده شده. در فرمولبندی یک مدل مفهومی می‌توان از داده‌های عمقی حاصل از یک منطقه آلوده استفاده کرد. در ارائه مدل مفهومی نیاز است که به شرایط منبع و ابعاد آن توجه شود. این موارد به شدت مشخصات پلوم و طول عمر منبع آلودگی را تحت تأثیر قرار خواهند داد.
۳	فرمولبندی یک استراتژی مدل سازی (شامل ابعادبندی، تفکیک پذیری فضایی و زمانی جزئیات فرآیندی فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی مدل شده) و تنظیم سؤالاتی که مدل باید پاسخ‌گوی آن‌ها باشد. موقع تصمیم‌گیری در مورد جزئیات فرآیندی فرآیندهای شیمیایی یعنی مدل واکنشی باید موارد زیر در نظر گرفته شود: مولف‌های محصولات نفتی شامل بنزن، تلون، اتیل بنزن، نفتالین و غیره در نرخ‌های مشابه یا تحت شرایط ژئوشیمیایی مشابه تجزیه نمی‌شوند به عنوان مثال، تلون اغلب خیلی آسان‌تر از بنزن تجزیه می‌شود و های‌روکنش مرتبه صفر و مرتبه اول باید تنها در جایی استفاده شوند که اثرات ژئوشیمیایی آب زیرزمینی و کانی‌های سفره مشابه هستند.
۴	انتخاب ابزار مدل سازی مناسب در ارتباط با داده‌های موجود، سؤالاتی که باید پاسخ داده شوند و زمان موجود.
۵	تنظیم یک مدل جریان، شامل گسسته سازی فضایی حوزه مدل به صورت سلول‌های کوچک، شناسایی شرایط مرزی، گسسته‌سازی زمانی مدت شبیه‌سازی، مرحله‌بندی زمانی و ورود داده‌ها.
۶	آماده‌سازی داده‌های مشاهده‌ای برای مقایسه با نتایج شبیه‌سازی طی مرحله کالیبراسیون مدل جریان.
۷	کالیبراسیون مدل جریان پایا یا ناپایا با استفاده از داده‌های هیدرولیکی کالیبراسیون مدل ممکن است به وسیله دست (سعی و خطا) یا با استفاده از ابزارهای تخمین پارامتری انجام گردد.
۸	آزمایش و بررسی معقولیت سرعت‌های جریان شبیه‌سازی شده، مسیر جریان و بیلان آب.
۹	کاربرد/آزمایش ایده‌آل (اگر چه در بیشتر موارد میسر نیست) مدل برای داده‌هایی که طی کالیبراسیون آن استفاده نشده‌اند.
۱۰	شناسایی کمبودهای داده‌ها که مانع اعتبار مدل کالیبره شده می‌گردند. آماده‌سازی طرح‌هایی برای به دست آوردن داده‌های اضافی، جایی که امکان پذیر باشد.
۱۱	تنظیم یک مدل انتقال برای انتقال پهنرفتی پراکندگی غیر واکنشی یک گونه. حوزه مدل انتقال ممکن

	است یک زیر حوزه از مدل جریان باشد و این مدل ممکن است بعددندی متفاوت داشته باشد.
۱۲	اجرای اولیه مدل تک گونه ای فوق برای ارزیابی و تعیین مسائل عددی که از انتقال فیزیکی مطلق نتیجه می‌شوند (به عنوان مثال، مسائل همگرایی، نوسانات، پراکندگی عددی).
۱۳	تعدیل خام مقادیر ضریب پراکندگی (طولی و عرضی) برای کنترل مشخصات اصلی پلوم.
۱۴	استفاده از نتایج مدل سازی به عنوان یک کنترل معقولیت (اضافی) برای مدل جریان. جایی که لازم است، مدل های جریان مفهومی و عددی تعدیل می‌شوند.
۱۵	اگر ماژولهای واکنش موجود نامناسب به نظر می‌رسند: آماده سازی یک ماژول واکنشی ویژه منطقه مورد بررسی، آزمایش ماژول/ بسته نرم افزاری واکنشی برای وضعیت های جریان ساده و غیر ویژه منطقه.
۱۶	آماده سازی داده های مشاهده ای برای مقایسه با نتایج شبیه سازی طی کالیبراسیون مدل انتقال.
۱۷	در صورت استفاده از مدل انتقال واکنشی چند مؤلفه ای، تعادل ژئوشیمیایی ناپیوسته کیفیت پس زمینه آب برای ارزیابی تعادل های فاز آبی - کانی سفره آلوده نشده مدل سازی می‌شود. واکنش های ناپیوسته برای ارزیابی تغییرات ژئوشیمیایی سیستم در پاسخ به کانی سازی هیدروکربن ها شبیه سازی می‌شوند.
۱۸	تنظیم مدل انتقال چند مؤلفه ای شامل اولین تخمین پارامترهای واکنشی که معمولاً از متون منتشر شده حاصل می‌شوند.
۱۹	شبیه سازی های انتقال بیوژئوشیمیایی. تعدیل پارامترهای واکنشی برای انطباق با الگوهای مشاهده شده پلوم: طول پلوم / غلظت مؤلفه های محصولات نفتی، منطقه بندی اکسیداسیون و احیا / غلظت های الکترون گیرنده های حل شده، وقوع محصولات واکنش.
۲۰	آنالیز حساسیت مدل کالیبره شده.
۲۱	مقایسه بیلان جرم تفصیلی برای گونه ها/ مؤلفه های حل شده.
۲۲	اجرای مدل تخمین گر برای: ۱. تخمین تکامل بلند مدت پلوم آلاینده و ریسک همراه برای گیرنده های آن؛ ۲. پاسخ به وقایع احتمالی. تخمین استرس های آینده برای انجام یک شبیه سازی تخمین گر مورد نیاز است. موقع تصمیم گیری برای شرایط آینده منبع جهت پیش بینی، لازم است توجه شود که توزیع و ترکیب NAPL ممکن است بسته به وضعیت هوازدگی آن و هیئت سطح ایستابی آب در زیر سطح زمین خیلی متغیر باشد.

ارزیابی یک ضریب پراکندگی جانبی بزرگ می تواند به واسطه تخمین غیر واقعی اختلاط /رقیق سازی زیاد تخمین زده شده (واکنش دهنده ها (هیدروکربنها و الکترون گیرنده ها) تجزیه بیولوژیکی در آن مناطق، منجر به پیش بینی پلوم های کوتاه شود.
--

۵-۲. معادلات جزءبندی تعادلی چندفازی ترکیبات هیدروکربن های نفتی

وقتی هیدروکربن ها به زیر سطح زمین نشت می کنند، مدل فرض می کند که مولفه های NAPL با چهار فاز هوا، آب، خاک و NAPL باقی مانده به تعادل خواهد رسید. با فرض این که هیچ تجزیه شیمیایی یا بیولوژیکی یا تبخیر در منطقه اشباع نشده منبع وجود ندارد؛ جزءبندی تعادلی خاک/ آب در خاک آلوده لحظه ای، برگشت پذیر و خطی است. روش موازنه جرم به طوری است که جرم کلی هر مولفه i در سیستم (M_T^i) برابر است با مجموع جرم هر مولفه i در هر چهار فاز، بنابراین (Park, 1999; Park and Juan, 2000):

$$M_T^i = M_{NAPL}^i + M_w^i + M_a^i + M_s^i \quad (۵۶-۲)$$

که در آن:

M^i : جرم مولفه i در هر یک از چهار فاز: NAPL، آب، هوا و خاک (فاز جذب شده) می باشد.

معادلات حاکم بر جزءبندی تعادلی بین فازها عبارتند از معادله جزءبندی جذب خطی نرمالایز

شده در ارتباط با کربن آلی، قانون هنری و قانون رائولت که به ترتیب به صورت زیر نوشته می شوند:

$$C_s^i = K_{oc}^i f_{oc} C_w^i \quad (۵۷-۲)$$

$$C_a^i = H_i C_w^i \quad (۵۸-۲)$$

$$C_w^i = x_i S_i \quad (۵۹-۲)$$

که در آن ها:

C^i : غلظت مولفه i در هر فاز است؛

K_{oc}^i : ضریب جزءبندی کربن آلی خاک با آب برای هر مولفه i است؛

f_{oc} : بخش یا کسر کربن آلی خاک است؛

H_i : ثابت هنری هر مولفه i در دمای مورد نظر است؛

x_i : فراکسیون مولی هر ترکیب i در مخلوط NAPL است؛

S_i : قابلیت انحلال آبی خالص هر مولفه i است.

معادله بقای حجم به صورت زیر نوشته می شود:

$$\theta_w + \theta_a + \theta_{NAPL} = \theta \quad (۶۰-۲)$$

که در آن:

θ_w : آب محتوی حجمی؛

θ_a : محتوی حجمی هوا؛

θ_{NAPL} : محتوی حجمی NAPL.

تخلخل کل و آب محتوی حجمی ثابت فرض می شوند. جرم هر مولفه در هر فاز به صورت زیر بیان می شوند (Park, 1999; Park and Juan, 2000):

$$M_T^i = C_T^i \rho_b V \quad (۶۱-۲)$$

$$M_s^i = C_s^i m_{soil} = C_s^i \rho_b V = K_{oc}^i f_{oc} C_w^i \rho_b V \quad (۶۲-۲)$$

$$M_w^i = C_w^i \theta_w V \quad (۶۳-۲)$$

$$M_a^i = C_a^i \theta_a V = H_i C_w^i \theta_a V \quad (۶۴-۲)$$

که در آن:

C_T : غلظت کلی مولفه ها در خاک؛

V : حجم کل نمونه خاک؛

m_{soil} : جرم کلی خاک است.

با فرض این که هیچ NAPL در نمونه خاک وجود ندارد ($M_{NAPL}^i = 0$) ، غلظت کلی خاک، غلظت

مولفه در آب و هوا به صورت زیر بیان شوند (Park, 1999; Park and Juan, 2000):

$$C_T^i = \frac{M_w^i + M_a^i + M_s^i}{\rho_b} \quad (۶۵-۲)$$

$$C_w^i = \frac{C_T^i \rho_b}{\theta_w + K_{oc}^i f_{oc} \rho_b + H_i \theta_a} \quad (۶۶-۲)$$

$$C_a^i = \frac{C_T^i H_i \rho_b}{\theta_w + K_{oc}^i f_{oc} \rho_b + H_i \theta_a} \quad (۶۷-۲)$$

جایی که فاز NAPL وجود داشته باشد، بخش مولی مولفه i در مخلوط NAPL، وزن ملکولی مخلوط NAPL، دانسیته مولی مخلوط NAPL، جرم مولفه i در فاز NAPL و در نهایت غلظت کلی مولفه‌ها در خاک به صورت زیر بدست می‌آیند (Park, 1999; Park and Juan, 2000):

$$x_i = \frac{C_{NAPL}^i MW_{NAPL}}{\rho_{NAPL} MW_i} \quad (۶۸-۲)$$

$$MW_{NAPL} = \sum x_i MW_i \quad (۶۹-۲)$$

$$\rho_{NAPL} = \sum C_{NAPL}^i = \frac{\sum x_i MW_i}{\sum \left(x_i MW_i / \rho_i \right)} \quad (۷۰-۲)$$

$$M_{NAPL}^i = \frac{x_i MW_i \theta_{NAPL} \rho_{NAPL}}{MW_{NAPL}} = \frac{x_i MW_i \theta_{NAPL}}{\sum \left(x_i MW_i / \rho_i \right)} \quad (۷۱-۲)$$

$$C_T^i = \frac{M_T^i}{m_{soil}} = \frac{x_i S_i}{\rho_b} \left[H_i \theta_a + K_{oc}^i f_{oc} \rho_b + \theta_w + \frac{MW_i \theta_{NAPL}}{S_i \sum \left(x_i MW_i / \rho_i \right)} \right] \quad (۷۲-۲)$$

$$\sum x_i = 1 \quad (۷۳-۲)$$

که در آن:

MW_{NAPL} : وزن مولکولی معادل مخلوط NAPL بعد از موازنه فازی است؛

ρ_i : دانسیته مولفه i در شکل مایع است.

اشباع فاز NAPL از رابطه زیر تخمین زده شود (Parker et al., 1994; Wiedemeier et al., 1999):

$$S_{NAPL} = \frac{\rho_b \bullet TPH}{\rho_{NAPL} \theta} \quad (۷۴-۲)$$

که در آن:

S_{NAPL} : اشباع NAPL؛

TPH: کل هیدروکربن‌های نفتی؛

ρ_{NAPL} : دانسیته NAPL.

۶-۲. معادله انتقال LNAPL بر روی سطح آب زیرزمینی

منطقه NAPL جایی قرار دارد که LNAPL متحرک وجود داشته باشد. این منطقه شامل سه فاز جامد، آب در اشباع باقی مانده و NAPL متحرک است. فاز آبی فرض می شود فاز تر کننده و فاز NAPL فاز غیر تر کننده باشد. این فرض به این معنی است که آب فاز جامد را می پوشاند و هیچ تماس مستقیمی بین فازهای جامد و NAPL وجود ندارد. بین فازها تعادل محلی فرض می شود. انتقال جرم از منطقه NAPL به منطقه اشباع شده (به وسیله انحلال) و به منطقه غیر اشباع (به واسطه تبخیر) در نظر گرفته می شود.

معادله حاکم توصیف کننده انتقال NAPL بر روی سطح آب زیرزمینی برحسب ضخامت لنز NAPL و دیگر پارامترها (که مقادیر متوسط گیری شده اند) به صورت زیر بیان می گردد (Kim and Corapcioglu, 2003):

(۷۵-۲)

$$\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{q_w K_o}{K_w \theta S_{oo}} \nabla L - \frac{K_o L_o (\rho_w - \rho_o)}{\theta S_{oo} \rho_w} \nabla^2 L = \pm \frac{Q_o}{\theta S_{oo}} \delta(x - \xi)(y - \zeta) + \frac{S_{oun}}{S_{oo}} \frac{\partial L}{\partial t} - \frac{E_N^g}{\rho_o \theta S_{oo}} - \frac{E_N^w}{\rho_o \theta S_{oo}}$$

که در آن:

L : ضخامت محصول آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی؛

L_o : ضخامت مرجع لنز NAPL (حجم بر واحد سطح NAPL، تقسیم بر تخلخل پر شده از NAPL)؛

S_{oo} : درجه اشباع NAPL در لنز NAPL؛

S_{oun} : درجه اشباع NAPL در منطقه غیر اشباع؛

K_o : هدایت هیدرولیکی NAPL در لنز NAPL؛

K_w : هدایت هیدرولیکی آب زیرزمینی؛

q_w : تخلیه ویژه آب زیرزمینی؛

ρ_w : دانسیته آب؛

Q_0 : نرخ نشت / پمپاژ NAPL ، با علامت مثبت نشان دهنده نشت در نقطه (x_0, y_0) ، همان طور که به

وسیله تابع دلتای دیراک^۱ (δ) نشان داده شد؛

E_N^g : فلاکس جرمی از فاز NAPL به گاز خاک به واسطه تبخیر؛

E_N^w : فلاکس جرمی از فاز NAPL به آب زیرزمینی به واسطه انحلال.

این معادله تلفات جرمی به NAPL باقی مانده و انتقال جرم به دیگر فازها را در مرزهای سطحی ادغام می کند.

۷-۲. معادله انتقال آلاینده های محلول در آب زیرزمینی

منطقه اشباع شده منطقه ای است که در آن فضای منفذی با آب پر شده است. این منطقه با منطقه NAPL (به وسیله انحلال) و منطقه غیر اشباع (به واسطه انحلال و تبخیر)، بر اساس غلظت-های آلاینده در این دو منطقه متقابلاً اثر دارد. آلاینده ها در منطقه اشباع شده در بخشی از فاز پیوسته متحرک شده که در آن رفتار آلاینده ها به وسیله فرآیندهای شیمیایی و بیولوژیکی و جزءبندی فازی متاثر می شود.

معادله حاکم بر انتقال آلاینده های محلول در آب زیرزمینی به صورت زیر است (Kim and Corapcioglu, 2003):

$$b \frac{\partial}{\partial t} [\theta R C_w] + \nabla \cdot [b q_w C_w - b D \nabla (\theta C_w)] = -b R_{w,bio} + E_N^w - E_N^g \quad (76-2)$$

$$R = 1 + \frac{k_d \rho_b}{\theta} \quad (77-2)$$

$$R_{w,bio} = \lambda \theta C_w R_w \quad (78-2)$$

که در آن:

^۱. Dirac delta function

b : عمق سفره اندازه گیری شده از سطح آب زیرزمینی تا لایه کف غیر قابل نفوذ؛

R : جذب خطی؛

$R_{w,bio}$: تجزیه بیولوژیکی در منطقه اشباع شده؛

λ : ثابت تجزیه مرتبه اول آلاینده در هر دو فاز آبی و فاز جذب شده؛

E_w^g : فلاکس جرمی از آب زیرزمینی به گاز خاک.

۸-۲. معادله انتقال آلاینده های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع

منطقه غیر اشباع به منطقه ای اشاره می شود که بالای سطح آب زیرزمینی است و در آن فاز NAPL حضور ندارد. این منطقه شامل فازهای گاز خاک، آب و جامد است و در معرض فعل و انفعالات با منطقه NAPL، منطقه اشباع و اتمسفر می باشد. اگر منطقه غیر اشباع با آلاینده های تبخیر شده از NAPL یا منطقه اشباع آلوده شود، جزءبندی تعادلی محلی آلاینده ها در بین فازها فرض می شود.

معادله انتقال آلاینده های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع به صورت زیر بیان می گردد (Kim and Corapcioglu, 2003):

(۷۹-۲)

$$d \frac{\partial}{\partial t} [R \theta_a C_g] + \nabla \cdot \left[dq_g C_g - d \left(D_g + D_w H \frac{\theta_w}{\theta_a} \right) \theta_a \nabla C_g \right] = -d R_{g,bio} + E_N^g - E_g^A + E_w^g$$

$$R = 1 + H \frac{\theta_w}{\theta_a} + k_d H \frac{\rho_b}{\theta_a} \quad (۸۰-۲)$$

$$D_g = \frac{\theta_a^{7/3}}{\theta^2} D_g^b \quad (۸۱-۲)$$

$$D_w = \frac{\theta_w^{7/3}}{\theta^2} D_w^b \quad (۸۲-۲)$$

$$R_{g,bio} = \lambda_1 H \theta_w \left(1 + k_d \frac{\rho_b}{\theta_w} \right) C_g \quad (۸۳-۲)$$

که در آن:

q_g : فلاکس حجمی گاز خاک؛

D_g : ضریب نفوذ موثر آلاینده در گاز خاک؛

D_w : ضریب نفوذ موثر آلاینده در آب منطقه غیر اشباع؛

D_g^b : ضریب نفوذ آلاینده در هوای بلوک؛

D_w^b : ضریب نفوذ آلاینده در آب بلوک؛

$R_{g,bio}$: مصرف کلی به واسطه تجزیه بیولوژیکی در فازهای جامد، آب و گاز منطقه غیر اشباع؛

λ_1 : تجزیه مرتبه اول آلاینده در هر سه فاز آبی، فاز گاز خاک و فاز جذب شده؛

E_g^A : فلاکس جرمی از منطقه غیر اشباع به اتمسفر.

برای سطح زمین غیر قابل نفوذ، E_g^A در معادله (۷۹-۲) برابر با صفر است. برای زمین قابل نفوذ معادله (۷۹-۲) استفاده نمی شود و عمق منطقه غیر اشباع به عنوان عمق نفوذ برای ارزیابی فلاکس جرمی به اتمسفر بدون در نظر گرفتن آلودگی در منطقه غیر اشباع استفاده می گردد. فلاکس جرمی از فاز NAPL به اتمسفر از طریق منطقه غیر اشباع از معادله (۲۱-۲) تعیین می گردد.

۹-۲. مدل انتقال و تجزیه بیولوژیکی دو بعدی ارائه شده توسط چویی و همکاران^۱ (۲۰۰۹)

(۸۴-۲)

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v C) - k_1 C - \frac{\mu_{\max}}{Y} \left(B + \frac{\rho_b B_s}{\theta} \right) \left(\frac{C}{K_c + C + \frac{C^2}{K_I}} \right) \left(\frac{O}{K_o + O} \right)$$

(۸۵-۲)

^۱. Choi et al

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ij} \frac{\partial B}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v B) - K_A B + K_D \frac{\rho_b}{\theta} B_s + \mu_{\max} B \left(\frac{C}{K_C + C + \frac{C^2}{K_I}} \right) \left(\frac{O}{K_O + O} \right) - k_{dec} B$$

$$\frac{\partial B_s}{\partial t} = K_A \frac{\theta}{\rho_b} B - K_D B_s + \mu_{\max} B_s \left(\frac{C}{K_C + C + \frac{C^2}{K_I}} \right) \left(\frac{O}{K_O + O} \right) - k_{dec} B_s \quad (۸۶-۲)$$

$$(۸۷-۲)$$

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{ij} \frac{\partial O}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v O) - \frac{\mu_{\max} f}{Y} \left(B + \frac{\rho_b B_s}{\theta} \right) \left(\frac{C}{K_C + C + \frac{C^2}{K_I}} \right) \left(\frac{O}{K_O + O} \right)$$

که در آن:

C : غلظت آلاینده در فاز آبی؛

B : غلظت باکتری معلق در فاز آبی؛

B_s : جرم باکتری چسبیده به فاز جامد بر واحد جرم فاز جامد؛

f : ضریب استوکیومتری اکسیژن؛

O : غلظت اکسیژن در فاز آبی؛

K_A : ضریب نرخ چسبیدن باکتری به فاز جامد؛

K_D : ضریب نرخ جداسازی باکتری از فاز جامد.

فصل سوم

دینامیک سیالات محاسباتی و معرفی ابزار آن

۳-۱. مقدمه

برای مدل سازی تحول و انتقال هیدروکربن های نفتی در سیستم جریان آب زیرزمینی به روش می توان از نرم افزارهای مختلفی از جمله Bioscreen (Cecan and Schniker, 2008)، RT3D (Gomez et al., 2008)، PHT3D (Appelo and Rolle, 2010) و غیره استفاده نمود. یکی از توانمندترین این نرم افزارها، نرم افزار PHOENICS (Spalding, 1981) است. نرم افزار PHOENICS این قابلیت را دارد که بتوان کدنویسی های لازم جهت اعمال هر گونه شرایط مرزی، عبارات تولید و

مصرف آلاینده ها در نتیجه واکنش های شیمیایی ضمن انتقال فیزیکی آن ها را انجام داد. در ذیل به شرح مختصری از این نرم افزار خواهیم پرداخت.

۲-۳. دینامیک سیالات محاسباتی و نرم افزار PHOENICS

دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)^۱ به عنوان ابزار تحلیل سیستم های در برگیرنده جریان سیال، حرارت و انتقال جرم که همراه با واکنش های شیمیایی می باشند، تعریف می شود که از شبیه سازی کامپیوتری استفاده می گردد (Versteeg and Malalasekera, 1995). برای پیش بینی مسیری که سیال جریان می یابد و تحلیل آمار ی این جریان، معادلات جریان سیال فرمول بندی می شود. کدهای CFD قادر هستند این روابط را با روش های عددی حل نمایند. برای ایجاد یک روش حل، این معادلات باید به یک فرمت عددی با استفاده از تکنیک های گسسته سازی از قبیل روش های تفاوت های محدود، اجزاء محدود و حجم های محدود تبدیل گردند.

کدهای CFD تجاری به طور گسترده با مجموعه ای از ویژگی های مخصوص به خود که با مسائل جریان سیال همراه می باشد در دسترس هستند. ادوارد و همکارانش (Edwards et al., 1995) مقایسه ای از برخی کدهای تجاری CFD را ارائه دادند که این مقایسه در جدول (۳-۱) آمده است.

PHOENICS یک بسته نرم افزاری برای مقاصد عمومی است که برای پیش بینی کمی موارد

زیر استفاده می گردد (Spalding, 1981):

• چگونگی جریان سیالات (هوا، آب، نفت و در اطراف و درون موتور، تجهیزات فرآیندی،

ساختمان ها، عوارض محیط طبیعی و مانند آن؛

• تغییرات همراه با ترکیب شیمیایی و فیزیکی؛

• استرس های همراه در اجسام غوطه ور.

PHOENICS به وسیله افراد زیر بکار برده می شود (CHAM, 2008):

¹. Computational Fluid Dynamics

- مهندسين طراح تجهيزات؛
- مهندسين معمار برای طراحی ساختمان‌ها؛
- متخصصين زیست‌محیطی برای پیش‌بینی اثرات زیست‌محیطی آلاینده‌ها و خطرات آن.

۳-۲-۱. عملیات اصلی PHOENICS

نرم‌افزار PHOENICS سه عمل اصلی زیر را انجام می‌دهد:

۱. تعریف مسأله: که در آن کاربر موقعیتی که باید شبیه‌سازی شود و سوالاتی که می‌خواهد پاسخ دهد را تعریف می‌کند.

جدول (۳-۱): مقایسه کدهای CFD (Edwards et al., 1995; Doulati Ardejani, 2003).

ویژگی‌ها	FLUENT	PHOENICS	FLOW3D	FIDAP
روش گسسته‌سازی	حجم محدود	حجم محدود	حجم محدود	حجم محدود
مدل‌سازی جریان تراکم‌پذیر	فراهم شده	فراهم شده	فراهم شده	توسط کاربرد رابطه حالت تعیین می‌شود.
مدل‌سازی جریان چند فازي	فراهم شده	فراهم شده	فراهم شده	فراهم شده
قابلیت سطح آزاد	فراهم نشده	فراهم شده	محدود می‌باشد	فراهم شده
تولید مش	مش نامنظم	مش منظم، مش اصلاحی، انطباق بدنه با مختصات کارتیزین / استوانه‌ای	مش منظم، مختصات کارتیزین / استوانه‌ای، مختصات دوار، چند بلوکه	مش نامنظم
مدل‌سازی احتراق	واکنش احتراق / شیمیایی	واکنش احتراق / شیمیایی	واکنش احتراق / شیمیایی	واکنش‌های شیمیایی سطح
توسعه‌پذیری کد	امکان پذیر نیست	امکان نوشتن کد وجود FORTRAN دارد	امکان نوشتن کد وجود FORTRAN دارد	امکان نوشتن کد وجود FORTRAN دارد
کاربرد اصلی	اهداف عمومی	اهداف عمومی	اهداف عمومی	اهداف عمومی

خودرو، الکترونیک و نیمه رساناها، شیمی، جو زمین/ استحکامات	مدل سازی احتراق و آتش، ایرو دینامیک، ایمنی ساحل، مهندسی مکانیک، انتقال حرارت	حرارت و تهویه، مهندسی، مطالعات ژئوفیزیکی، کنترل آلودگی، سرد کردن لوازم الکتریکی، انتقال حرارت، مدل سازی زیست محیطی معادن و صنعت نفت	مهندسی فرآیند و شیمی، انتقال حرارت، کنترل آلودگی و طراحی معماری	کاربردها
بله	بله	بله	بله	کاربردهای معدنی
FLUID DYNAMICS INTERNATIONAL L Evanston,LL,USA	CFDA AEA Technology Oxford,UK	CHAM London,uk	Fluent Europe Sheffield,UK	فروشنده

۲. شبیه سازی: معادلات اساسی حاکم بر مسأله با اعمال شرایط مرزی مناسب به روش عددی

حجم های محدود (Versteeg and Malalasekera, 1995) حل می گردند.

۳. نمایش نتایج محاسبه: به وسیله نمایش گرافیکی، جداول اعداد و سایر موارد.

این نرم افزار مانند بیشتر کدهای

CFD اما نه همه آنها، برای هر یک از سه عمل فوق یک ماژول مجزا دارد. این سه ماژول عبارتند از:

• SATELLITE؛

• EARTH؛

• PHOTON.

در کنار ماژول PHOTON، می توان از ماژول های دیگری همچون AUTO PLOT، RESULT

و VR VIEWER برای نمایش نتایج استفاده نمود.

۳-۲-۲. ساختار PHOENICS

این نرم افزار یک آرایش سیاره ای

با یک هسته مرکزی از زیر روال ها به نام EARTH و یک برنامه SATELLITE دارد که ورودی ها را از

طریق واسط (Virtual Reality (VR دریافت می کند.

برنامه های مجزا هستند. کاربران PHOENICS عمدتاً با SATELLITE کار می کنند، اما آن ها می-توانند تحت روش های کنترل شده به EARTH نیز دسترسی داشته باشند.

۳-۲-۳. چگونه در PHOENICS مسأله تعریف می گردد؟

تعریف مسأله شامل بیان وضعیت در موارد زیر است:

۱. هندسه، یعنی شکل ها، اندازه ها و موقعیت های اشیاء و فضاهای تداخل؛
 ۲. مواد، یعنی ترمودینامیک، انتقال و دیگر ویژگی های سیالات و جامدات درگیر؛
 ۳. فرآیندها، به عنوان مثال آیا مواد بی اثر یا واکنش پذیر هستند، آیا جریان متلاطم شبیه سازی شوی و اگر چنین است به وسیله چه مدلی، آیا انتقال حرارت در سیالات و جامدات محاسبه می شوند و آیا وضعیت تنش ها در جامدات محاسبه می گردند؛
 ۴. شبکه بندی، یعنی روش و دقت در تقسیم فضا و زمان که گسسته سازی نامیده می شود؛
 ۵. دیگر پارامترهای عددی (یعنی غیرفیزیکی) متأثر کننده سرعت، دقت و اقتصاد شبیه سازی.
- مشخصات ویژه تعریف مسأله که PHOENICS تشخیص می دهد عبارتند از:
۱. تعریف مسأله می تواند در تنوعی از روش های انتخاب شده به وسیله کاربر بر طبق تجربه و اولویتش انجام شود.
۲. مهندسی که از نرم افزارهایی همچون CAD استفاده می کنند، می توانند فایل های متناظر را مستقیماً به PHOENICS – VR (یعنی Virtual Reality) وارد کنند.
۳. در محیط VR نرم افزار PHOENICS، یک «فایل دستور» مانند یک گزارش ایجاد می گردد که Q1 نامیده می شود. کاربران با تجربه می توانند این فایل را اصلاح نمایند.

۴. ویژگی‌ها و قابلیت‌های « PLANT » و « IN-FORM » این امکان را بوجود می‌آورند تا ویژگی مواد جدید و منابع با شرایط مرزی غیر استاندارد به وسیله فرمولیسی در فایل دستوری فراهم شوند.

صدها فایل دستوری قابل اعتماد با نرم افزار PHOENICS استاندارد در یک مجموعه از کتابخانه‌های به آسانی قابل دسترسی تأمین شده‌اند.

PHOENICS در حقیقت زبان

ورودی سطح بالای خودش به نام PIL^۱ را دارد که در آن فایل‌های Q1 نوشته می‌شوند. PIL یک زبان مستقیماً فلسفه شده است و به هیچ مترجمی نیاز ندارد. PIL توانمندترین و انعطاف پذیرترین زبان ورودی تعبیه شده برای تنظیم مسایل CFD است (CHAM, 2008).

۳-۲-۴. چگونه PHOENICS پیش‌بینی می‌کند؟

PHOENICS اکثر پدیده‌های فیزیکی شامل موارد زیر را شبیه‌سازی می‌کند:

ابیان قوانین مربوط به فیزیک و شیمی و مدل‌هایی که آن‌ها را به صورت ریاضی توجیه می‌کنند که عموماً شامل معادلات مربوط به فشار، درجه حرارت، غلظت و هستند که در مکان و زمان تغییر می‌نمایند.

قرار دادن گروه زیادی از نقاط (که شبکه محاسباتی را تشکیل می‌دهند) قدر کافی نزدیک به همدیگر برای نمایش مناسب پیوستگی اشیاء و سیالات واقعی.

حل معادلات به وسیله روش‌های سیستماتیک، تکرار شونده، کاهش - خطا پیشرفت حل در صفحه VDU با نمایش گرافیکی قابل رویت است.

۴. قطع محاسبات و اصلاح تنظیمات کنترلی هر وقت که کاربر بخواهد.

۵. پایان دادن به محاسبات، وقتی خطاها به قدر کافی کاهش داده شوند.

^۱. PHOENICS Input Language

برخی مشخصات ویژه در ارتباط با این که چگونه PHOENICS پیش‌بینی می‌کند عبارتند از (Spalding, 1981):

۱. PHOENICS می‌تواند نسبت به سایر نرم افزارها دامنه وسیع‌تری از فرآیندهای فیزیکی را مدیریت کند و به یک تنوع وسیع‌تری از مدل‌های فیزیکی مجهز است.

۲. هوشی که در آن فرآیندهای فیزیکی در زبان کامپیوتر (فرترن) نمایش داده می‌شوند، به رای کاربران قابل رویت و قابل دسترسی است و مانند اکثر کدهای دیگر مخفی نیست . GROUND . زیربنای نامت با کدهایی به زبان فرترن که کدنویسی های لازم که برای نرم‌افزار PHOENICS استاندارد نیست در آن انجام می شود. GROUND ییش از ۵۰ درصد مازول EARTH را تشکیل می‌دهد.

۳. کدنویسی‌های لازم در یک روش با جستجوی آسان و طبقه بندی شده انجام میشود تا این که کاربران قادر باشند:

- کدها را بفهمند.
 - تصمیم‌گیری کنند که آیا امکانات نرم‌افزار نیازشان را بر آورده می‌سازد.
 - کدهای موجود را اصلاح کنند یا کدهای خودشان را به آنها اضافه نمایند.
- برای کاربرانی که به توانایی خود برای این کار مطمئن نیستند، شرکت توسعه دهنده نرم افزار (CHAM) گزینه PLANT فراهم ساخته است که وظایف کاربران را برای وارد سازی فرمول‌های مورد نیاز در فایل دستوری کاهش می‌دهد.

۵. کاربرانی که ابتدا نمی‌خواهند با گردآوری و مرتبط‌سازی فرمول‌ها درگیر شوند، می‌توانند IN-FORM بکار برند . فرمول‌های IN-FORM مستقیماً به وسیله EARTH در زمان اجرا تجزیه می‌شوند و به هیچ تغییری برای اجرا در EARTH نیاز ندارند.

۶. PHOENICS برای یک مشخصه منحصر به فرد EXPERT ت که به طور اتوماتیک

پارامترهای عددی را همان طور که محاسبه پیش می‌رود، بهینه می‌سازد.

۳-۲-۵. PHOENICS چگونه نتایج را نمایش می دهد؟

PHOENICS می تواند نتایج

شبیه سازی را به شکل های مختلف نمایش دهد. این لفرور، از بسته گرافیکی منحصر به فردی برخوردار بوده که PHOTON نامیده می شود.

همچنین PHOENICS می تواند

نتایج پیش هلیخی خود را در محیط VIRTUAL-REALITY مشابه به آن چه که

برای تنظیم مسأله در شروع شبیه سازی استفاده شد، نمایش دهد. این روش درک کاربر را آسان می کند و همچنین یک وسیله انتقال اهمیت عملیات شبیه سازی جریان را برای اشخاص ذیفع اما غیر فنی مانند مدیران سطح بالا فراهم می سازد.

البته، نتایج عددی در فایل

RESULT هم ذخیره می گردد. این نرم افزار بر طبق دستوراتی که در فایل Q1 وارد می شوند، می تواند اطلاعات پراکنده یا متراکم را فراهم سازد.

۳-۲-۶. روش حل

PHOENICS شامل حل کننده -

های مختلفی برای مجموعه معادلات همزمانی خطی است. گزینه ها عبارتند از:

• point by point

• slab-wise

• whole-3D-field

معادلات هیدرودینامیکی کوپل شده به وسیله روش SIMPLEST حل می شوند. برای

جریان های دو فازی، نسخه IPSA این نرم افزار استفاده می شود.

عموماً تحلیل جریان با کدهای CFD در سه فاز مختلف انجام می شود که در شکل (۳-۱) نشان داده شده است.

۳-۲-۷. ماژول های PHOENICS

برنامه PHOENICS شامل ماژول های متفاوتی می باشد که فازهای مختلف تحلیل جریان را شامل می شود که عبارتند از ماژول پیش از پردازش (SATELLIT)، ماژول پردازش گر (EARTH) و ماژول های بعد از پردازش شامل AUTOPLOT، PHOTON، RESULT و VR VIEWER (CHAM, 2008). شکل (۳-۲) مراحل حل مساله توسط نرم افزار PHOENICS را نشان می دهد.

۳-۲-۷-۱. SATELLITE

SATELLITE بخش پیش پردازشگر PHOENICS است که داده های ورودی را می خواند و برای محاسبه آماده می کند. این برنامه به صورت PIL (زبان ورودی PHOENICS) به کد تبدیل شده و در فایل Q1 ذخیره می شود. بنابراین SATELLITE یک مفسر است و از ساختارهای فراهم شده توسط کاربر یک فایل به نام EARDAT ایجاد می شود. کدهای تکمیلی از طریق زیربرنامه GROUND به زبان FORTRAN برای همه محاسبات غیر استاندارد اضافه می گردد.

۳-۲-۷-۲. EARTH

EARTH برنامه اصلی بسته نرم افزاری PHOENICS است. فاز شبیه سازی یا مرحله حل روابط حاکم توسط EARTH انجام می شود. EARTH فایل EARDAT که توسط SATELLITE ایجاد شده را می خواند و محاسبات مربوط به آن را انجام می دهد.

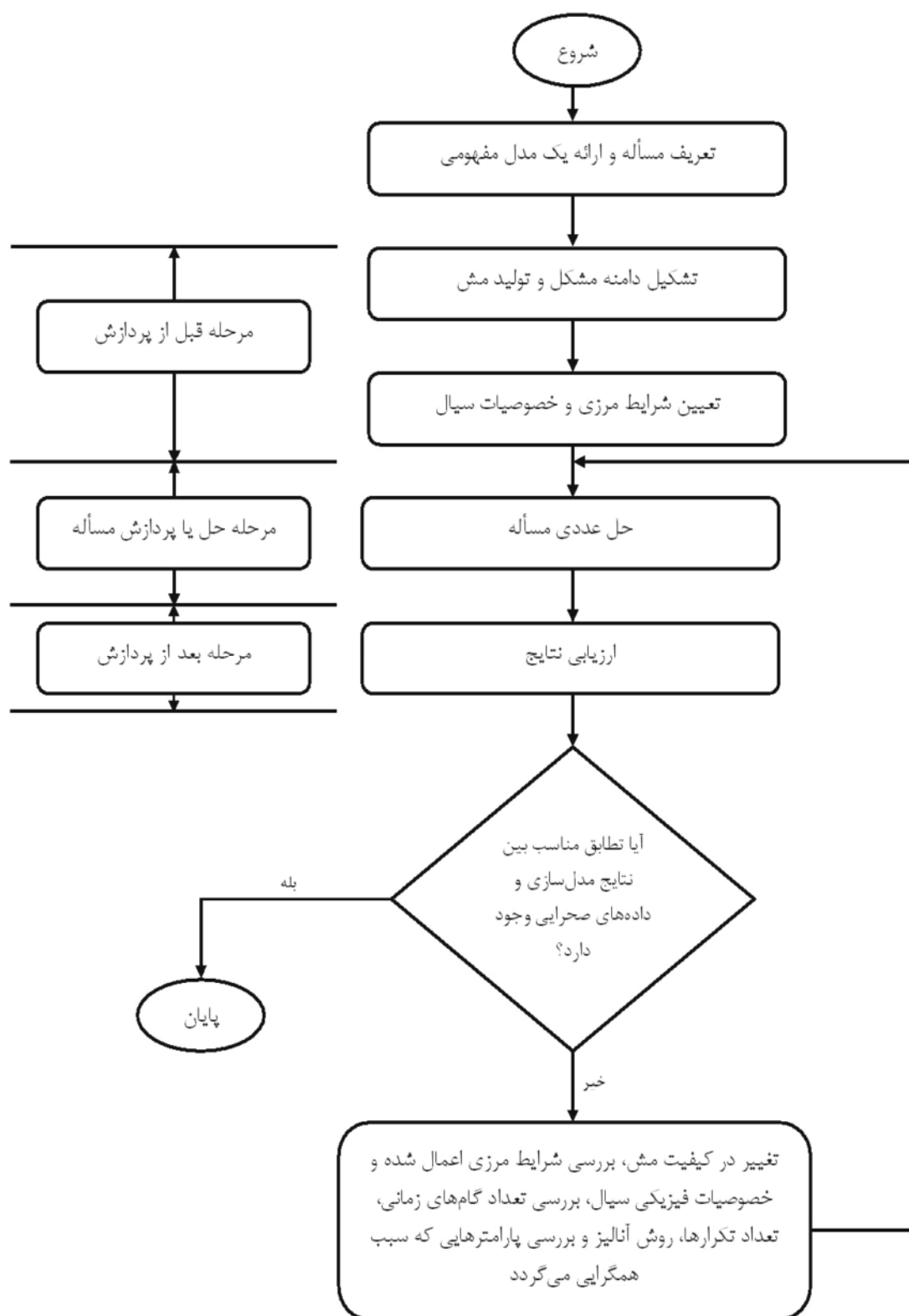
EARTH یک فایل خروجی که RESULT نامیده می شود را ایجاد می کند و همچنین فایل دیگری به نام PHI تولید می نماید که می تواند تفسیر شود و توسط ماژول های PHOTON و AUTO PLOT خوانده شود. EARTH به GROUND برای پی جویی اطلاعات بیشتر و افزودن اهداف بر می گردد.

EARTH مراحل زیر را انجام می دهد:

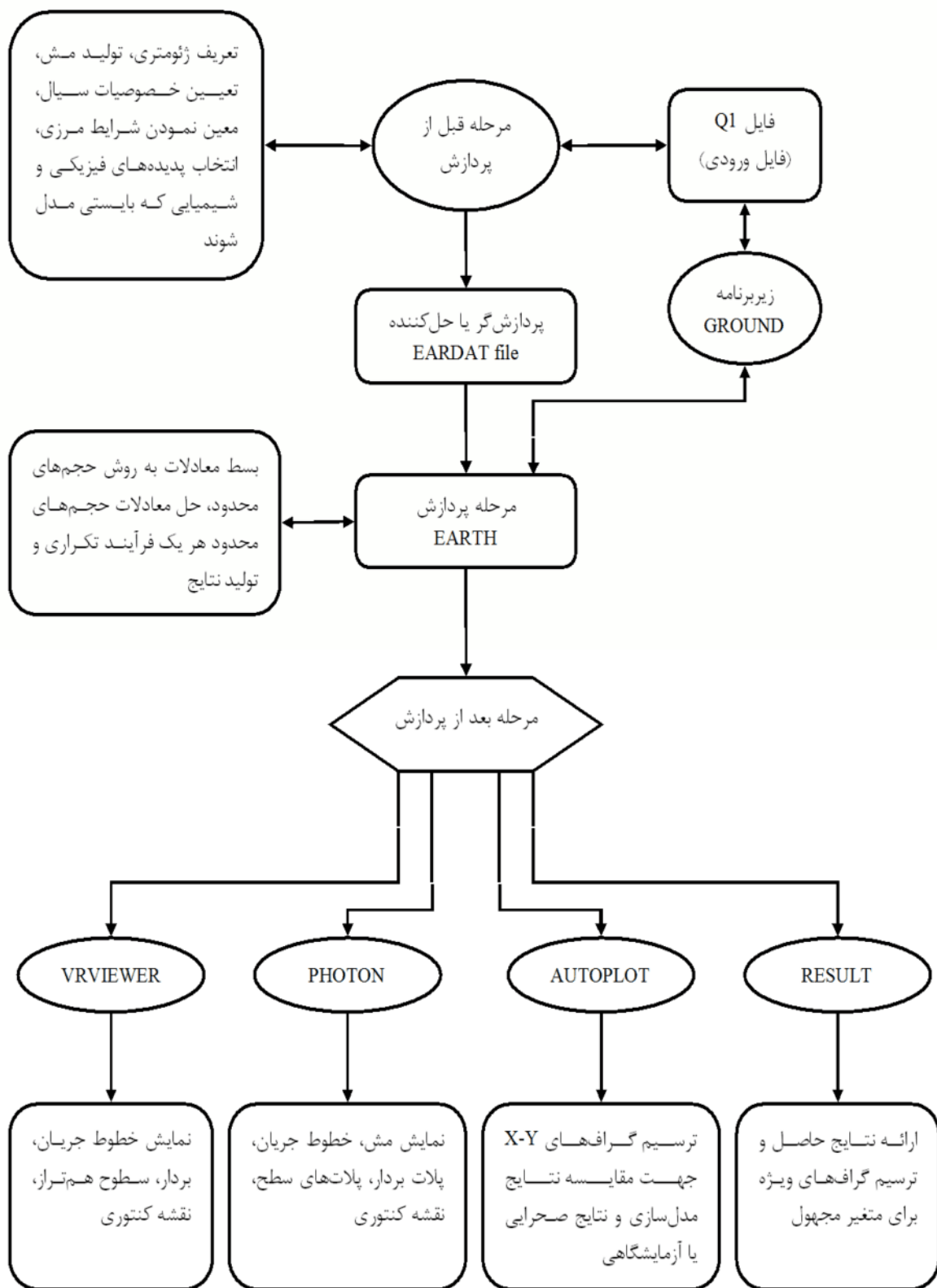
- تخصیص حافظه؛
- فرمول بندی معادلات حجم های محدود؛
- حل معادلات حاکم با تکنیک حجم های محدود در یک فرآیند تکراری؛
- فراخوانی GROUND وقتی که نیاز باشد؛
- پایان دادن به مراحل تکرار شونده؛
- نتایج خروجی.

EARTH مسایل را به صورت های زیر اداره می کند:

- پایا و ناپایا؛
- سهمی گون یا بیضوی؛
- صفر، یک، دو و سه بعدی.



شکل (۳-۱): فلوچارت انجام فازهای اصلی در آنالیزهای CFD (Doulati Ardejani et al., 2004).



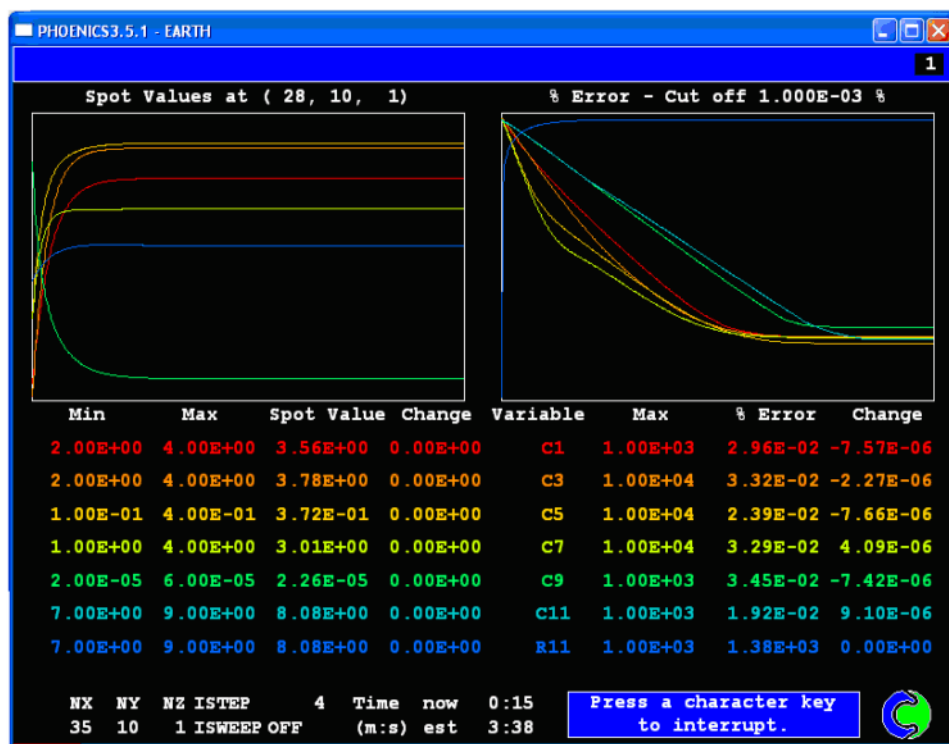
شکل (۳-۲): مراحل حل مسأله توسط نرم‌افزار PHOENICS (Doulati Ardejani et al., 2004).

EARTH ، تعریف شبکه، ویژگی

ماده، مقادیر اولیه و اطلاعات شرایط مرزی منتقل شده از SATELLITE را دریافت می کند.

EARTH به GROUND برای تنظیمات اضافی داده ها مراجعه می کند. شکل (۳-۳) نمونه ای از

تصویر نمایشگر وضعیت همگرایی EARTH را نشان می دهد.



شکل (۳-۳): نمونه ای از تصویر نمایشگر همگرایی EARTH.

GROUND. ۳-۷-۲-۳

GROUND زیربرنامه ای به زبان فرترن بوده که بخشی از ماژول حل کننده PHOENICS یعنی

EARTH را تشکیل می دهد. GROUND یک زیربرنامه ای است که به وسیله EARTH در نقاط از

پیش تنظیم شد ه در فرآیند حل فرا خوانده می شود. اگر کاربر عبارات فرترن مناسب را در نقاط

ورودی در GROUND تعبیه کند، EARTH آن ها را در فرآیند حل فرا می خواند.

زیرروال های ارتباطی مناسب امکان می دهند که کاربر اطلاعات را از EARTH استخراج کند، آن ها را در GROUND اصلاح کند و سپس اطلاعات و دستورالعمل های جدید را به EARTH برگرداند.

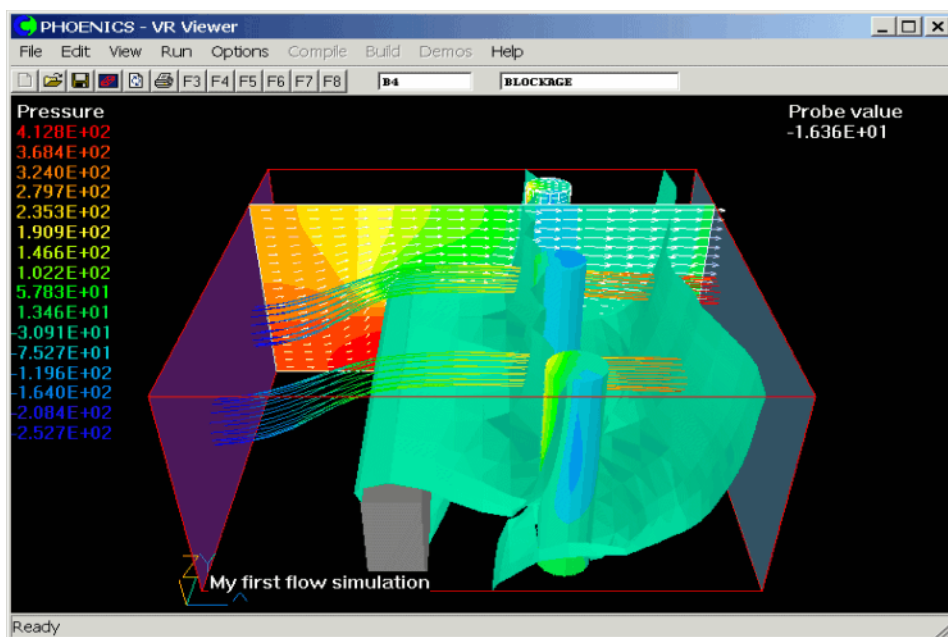
زیرروال های خدماتی زیادی به این نرم افزار برای اجرای عملیات محاسباتی ضمیمه می شوند که به شدت نیاز کاربر را برای نوشتن مراحل کدنویسی فرتن کاهش می دهد.

۳-۲-۷-۴. VR VIEWER

این نرم افزار می تواند وسیله نمایشی دیگر برای نتایج ایجاد کند که VR VIEWER نامیده می شود. مزیت عمده VR VIEWER به برنامه قدیمی تر PHOTON این است که در آن کاربر به آسانی می تواند خطوط جریان، بردارها، سطوح هم ارزش و تصاویر کانتوری را مشاهده نماید (شکل ۳-۴).

۳-۲-۷-۵. PHOTON

PHOTON بخشی از نرم افزار PHOENICS (بخش بعد از پردازش) است که می تواند برای نمایش نتایج شبیه سازی جریان سیال استفاده شود. PHOTON فایل PHI تولید شده توسط EARTH را می خواند و در پاسخ به ساختارهای ایجاد شده توسط کاربر، شبکه محاسبه شده و الگوی جریان را به طور گرافیکی ارائه می دهد.



شکل (۳-۴): نمونه‌ای از نمودار VR VIEWER (CHAM, 2008).

PHOTON می‌تواند از PHOENICS خروجی‌های زیر را ایجاد نماید:

- شبکه‌ها و طرح‌های کلی شبکه‌ها؛
- نمودارهای کانتوری، به صورت خطوط رنگی یا نواحی رنگی پر شده؛
- خطوط جریان با رنگ‌های متفاوت؛
- نمودار برداری برای دو فاز؛
- نمودار سطحی؛
- بزرگنمایی نمایش قسمت‌هایی از میدان؛
- انتخاب دلخواه نقاط نمایش در چندین پنجره.

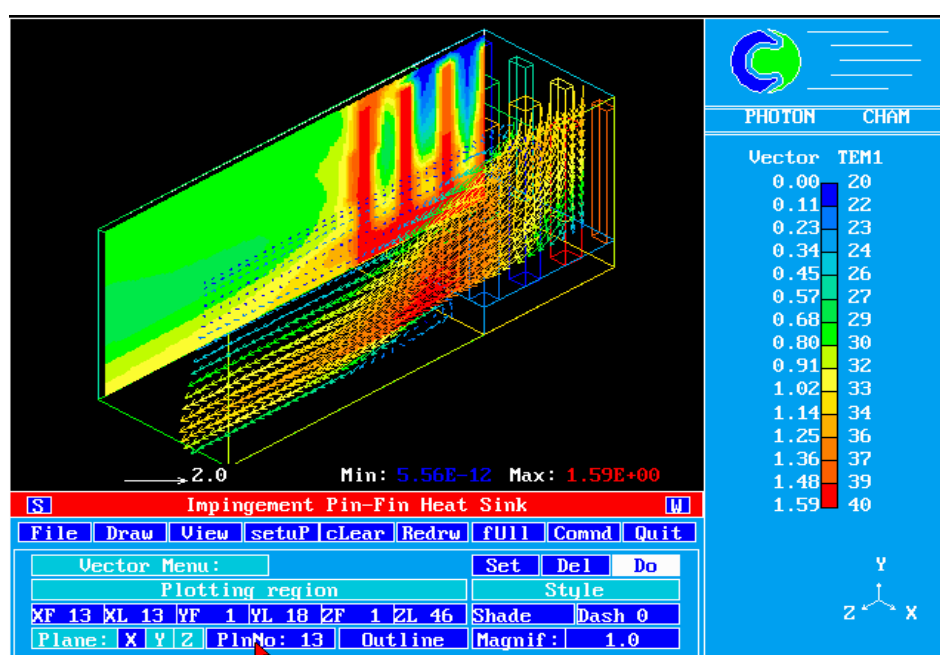
شکل (۳-۵) نمونه‌ای از خروجی نرم‌افزار PHOENICS که در PHOTON نشان داده شده را

نشان می‌دهد.

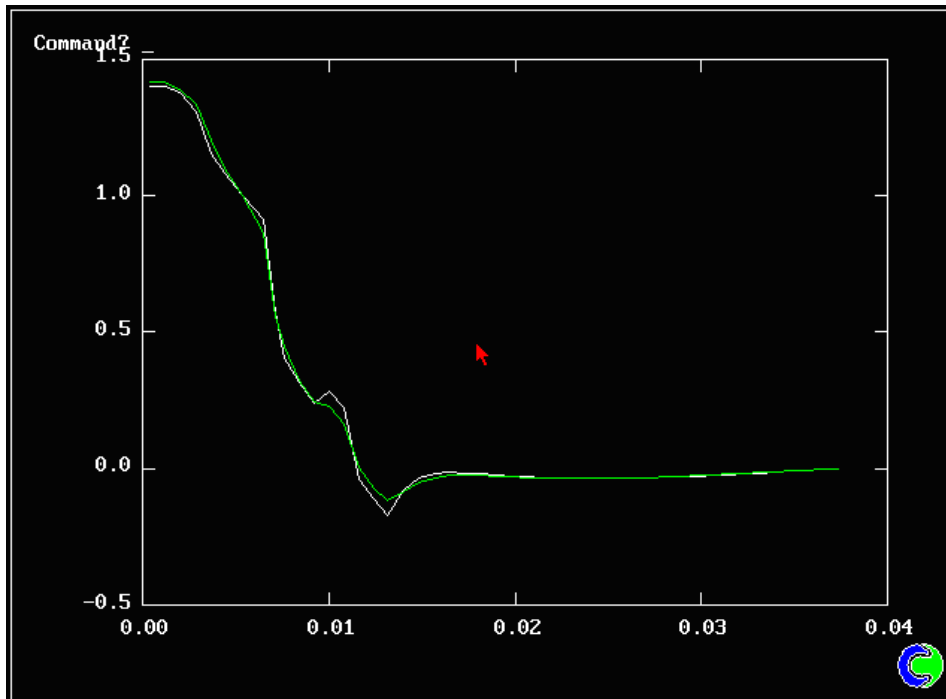
۳-۲-۷-۶. AUTO PLOT

AUTOPLOT عضو سوم خانواده گرافیکی PHOENICS است. این ماژول می‌تواند داده‌ها را از فایل PHI و همچنین فایل‌های تعریف شده توسط کاربر بخواند. AUTOPLOT می‌تواند عملیات زیر را انجام دهد:

- گراف‌های x-y را از فایل‌های خروجی PHOENICS و فایل‌های داده‌ای تهیه شده توسط کاربر ترسیم کند. این روش، مقایسه آسان نتایج شبیه‌سازی‌های PHOENICS با داده‌های تجربی و تحلیلی را امکان می‌دهد.
- اداره کردن داده‌ها در تعدادی از روش‌ها، مانند اضافه‌سازی یا کسر نمودن مقادیر ثابت، ضرب در یا تقسیم بر مقادیر ثابت، افزایش توان‌ها، لگاریتم و آنتی لگاریتم گرفتن و ...
- داده‌ها می‌توانند در تعدادی از سبک‌های خطی نمایش داده شوند (شکل ۳-۶).



شکل (۳-۵): نمونه‌ای از نمودار PHOTON (CHAM, 2008).



شکل (۳-۶): نمونه‌ای از تصویر AUTO PLOT (CHAM, 2008).

۳-۲-۸. معادله حاکم بر PHOENICS

در تمامی شبیه‌سازی های PHOENICS ، رابطه دیفرانسیلی زیر حل می‌شود (Spalding, 1981):

$$(۳-۱) \quad \frac{\partial}{\partial t}(r_j \rho_j \psi_j) + \frac{\partial}{\partial x} \left(r_j \rho_j u \psi_j - r_j \Gamma_{\psi j} \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \right) = r_j S_{\psi j}$$

که در آن:

عبارات $\frac{\partial}{\partial t}(r_j \rho_j \psi_j)$ ، $r_j \rho_j u \psi_j$ ، $r_j \Gamma_{\psi j} \frac{\partial \psi_j}{\partial x}$ و $r_j S_{\psi j}$ به عنوان فرآیند های تغییر زمانی ذخیره، پهنرفت، نفوذ و منبع تولید/ مصرف ارائه شده‌اند که در آن‌ها :

ψ_j : هر متغیر وابسته فاز؛

t : زمان؛

r_j : درصد حجم فاز j ؛

ρ_j : چگالی فاز j ؛

u : مولفه سرعت در جهت x ؛

$\Gamma_{\psi j}$: ضریب تغییر نفوذ برای متغیر ψ در فاز j ؛

$S_{\psi j}$: نرخ منبع ψ_j .

در حالتی که مسأله یک فازی باشد درصد حجم یعنی r_i از روابط حذف می گردد و در این

حالت رابطه حاکم به صورت زیر خواهد بود:

$$(2-3) \quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho \psi) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u \psi - \Gamma_{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = S_{\psi}$$

برخی از عبارات معادله (۲-۳) بالا مشابه عبارات معادلات حاکم بر مسأله بوده که تنها به

اصلاحات جزئی به ویژه روی اعداد و ضرائب ثابت این عبارات نیاز دارد. برای آن دسته از عبارات

معادلات حاکم (مانند شرایط مرزی، عبارات تولید و مصرف) که در معادله اساسی (۲-۳) دیده

نمی شوند لازم است تا در زیربرنامه GROUND کدنویسی های لازم انجام شود. به بیان دیگر، عبارات

غیر استاندارد برای معادله اساسی نرم افزار با دستورالعمل هایی که در فایل Q1 به زبان PIL نوشته

می شود، در محل های خاصی در زیربرنامه GROUND به زبان فرترن اعمال می گردد. پس از

کدنویسی، لازم است تا زیربرنامه GROUND کمپایل شده و نهایتاً به بخش حل کننده نرم افزار یعنی

EARTH متصل شود.

فصل چهارم

تأیید، اعتبارسنجی و کالیبراسیون مدل

۴-۱. مقدمه

در سال‌های اخیر،

مهندسی عددی در هیدرولیک و مهندسی محیط زیست برای پیش‌بینی و بهبود درک

فرآیندهای درگیر ضروری به نظر می‌رسد. بیشتر مسایل، برای یک شبیه‌سازی صحیح از

لحاظ فیزیکی و دقیق از لحاظ ریاضی فرآیندهای پیچیده و کوپل شده، به روش‌های عددی

قوی با تفکیک‌گیری بالا در فضا و زمان نیاز است (Hinkelmann, 2003) روی هم رفته،

یک نیاز ضروری برای توسعه بیشتر و کاربرد مهندسی عددی مؤثر در هیدرولوژی و

هیدروژئولوژی زیست‌محیطی شامل هوشیاری عددی مؤثر همراه با تکنیک‌های پردازش

اطلاعات مؤثر وجود دارد. هوشیاری عددی فرآیندهای جریان را به همراه فرآیندهای انتقال

واکنشی توصیف می‌کنند. شایسته عددی، باعث فهم بهتر این فرآیندها می‌شوند. به

عنوان مثال، شبیه‌سازی عددی، فرآیندهای مختلف در یک سیستم زیر سطحی چند فاز

را در نظر می‌گیرد و اثرات آنها را بر آلاینده‌ها بررسی می‌کند تا بر اساس نتایج حاصله از

شبیه‌سازی یک استراتژی به‌سازی مناسب طراحی شود. علاوه بر این، مدل‌های عددی می‌توانند

برای تعیین پارامترها یا شرح متغیرهایی که به طور مستقیم قابل اندازه‌گیری نمی‌باشند،

استفاده شوند با ارجاع، اعتبار، احتمال و پهنای باند نتایج حاصل از این مدل‌ها

باید از نظر فرضیات و خلاصه سه‌زغای انجام شده، کیفیت کالیبراسیون و اعتبارسنجی مدل، بعلاوه کیفیت داده‌های استفاده شده ارزیابی شوند.

در اولین مرحله مدل سازی، برای

فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی رخ دهنده در یک سیستم طبیعی مانند سیستم های آبخانه‌ای یک مدل مفهومی توصیف می‌شود مرحله بعد مدل ریاضی، مدل مفهومی را به یک فرمولای ریاضی در یک روش قطعی یا تصادفی تبدیل می‌کند. مدل‌های ریاضی می‌توانند تنها به طور تحلیلی برای یک تعداد محدودی از حالات ساده حل شوند. اما مدل‌های عددی انعطاف‌پذیری بیشتری دارند زیرا، آن‌ها قادر به شبیه سازی هندسه‌های پیچیده، توزیع‌های پارامتری بعلاوه شرایط اولیه و مرزی مختلف می‌باشند (Hinkelmann, 2005) مدل عددی به یک برنامه کامپیوتری منتقل می‌شود و فرآیندهای مشخص شده را شبیه‌سازی می‌کند.

در مرحله بعد، می‌باید صحت

نتایج مدل عددی تأیید^۱ شود. این کار به وسیله مقایسه نتایج مدل عددی با حل‌های تحلیلی برای سهیل‌تم‌هاد و فرآیندهای منفرد و نتایج حاصل از سناریوهای مدل شده توسط سایر محققین برای سیستم های پیچیده انجام می‌پذیرد. یک پیشنهاد برای پیش‌بینی صحیح، کالیبراسیون^۲ و اعتبارسنجی^۳ قبلی مدل است طی فرآیند کالیبراسیون، نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی یا صحرایی مقایسه می‌شوند پارامترهای کالیبراسیون به طور فیزیکی در طیف‌های محدود تغییر داده شوند تا بهترین تقریب با داده‌ها حاصل گردد. کالیبراسیون اغلب به صورت دستی و بر اساس تجربه مهندسی انجام می‌شود، با این حال، روش‌های اتوماتیک نیز وجود دارد کالیبراسیون اولین نشانه کیفیت مدل را ارائه می‌دهد اعتبارسنجی، اثبات بیشتر کالیبراسیون تحت شرایط مشابه با یک مجموعه داده مستقل یعنی مجموعه داده‌ای که برای تأیید و کالیبراسیون استفاده نشده باشد، است.

¹. Verification

². Calibration

³. Validation

نظر به این که، هر مجموعه از داده های جدید، بصیرت جدیدی را در مدل و بعلاوه پارامترهایش ارائه می دهد، یک مدل هرگز به طور نهایی اعتبارسنجی نمی گردد.

در این فصل، مدل ارائه شده در

نرم افزار PHOENICS استفاده از راه حل های تحلیلی و سناریوهای مدل شده توسط سایر محققین تأیید می گردد.

۴-۲. تأیید مدل با استفاده از راه حل های تحلیلی

۴-۲-۱. مدلهای یک بعدی فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت، جذب خطی و تجزیه مرتبه

اول

چهار حالت در زیر برای تأیید توانایی روش حجم های محدود به کمک نرم افزار PHOENICS

برای مدل معادله انتقال آلودگی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت، جذب خطی و تخریب مرتبه اول توصیف می شود.

در اولین حالت، توانایی مدل

حجم های محدود برای مدل سازی معادله انتقال که تنها فرآیند پراکندگی را شامل می شود (معادله ۴-۴)

(۱) توسط راه حل های تحلیلی بررسی می گردد (معادله ۴-۲) برای حل این حالت به صورت عددی با

استفاده از نرم افزار PHOENICS یک بعدی با طول ۱۰ متر و ۸۰ مش یکنواخت در صفحه x-y

ساخته شد. جهت به عنوان جهت جریان در نظر گرفته شد شرط مرزی نوع اول یا دریکله در

ورودی (x=0) یعنی C(0,t)=1 تعیین گردید مقدار اولیه صفر در t=0 مشخص شد غلظت برابر

صفر برای آلاینده در خروجی یعنی C(∞,t)=0 در نظر گرفته شد. مدل ساخته شده برای زمان های

مختلف اجرا گردید. برای مدل سازی راه حل های تحلیلی از نرم افزار MATLAB استفاده شد.

$$(۴-۱) \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

حل تحلیلی معادله (۴-۱) به صورت زیر خواهد بود (دولتی ارده جانی و همکاران، ۱۳۸۴):

$$(۲-۴) \quad C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_x t}}\right)$$

$$(۳-۴) \quad \operatorname{erfc}(\beta) = 1 - \operatorname{erf}(\beta) = 1 - \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right) \int_0^\beta e^{-u^2} du$$

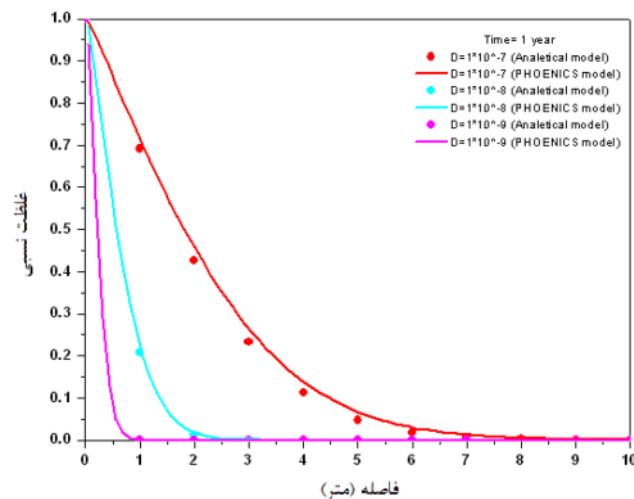
که در آن:

C_0 : غلظت منبع آلودگی؛

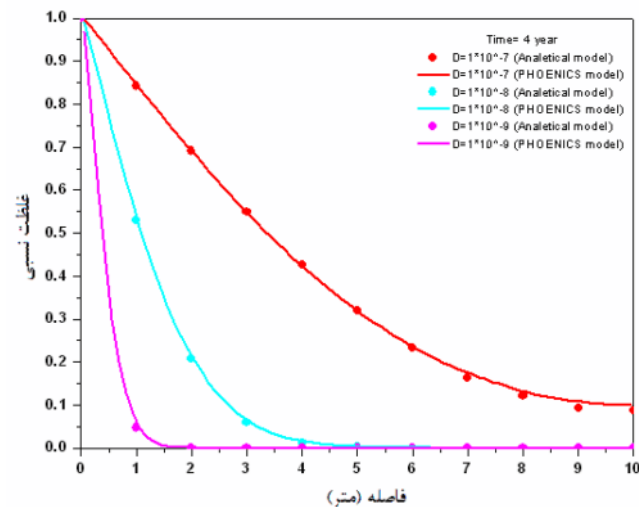
erfc ^۱: مکمل تابع خطای erf که بر حسب پارامتر β تعریف می‌شود.

شکل‌های (۱-۴) تا (۴-۴) نتایج مدل‌سازی عددی را با نتایج حاصله از راه حل تحلیلی برای

معادله انتقال شامل فرآیند پراکندگی مقایسه می‌نماید.

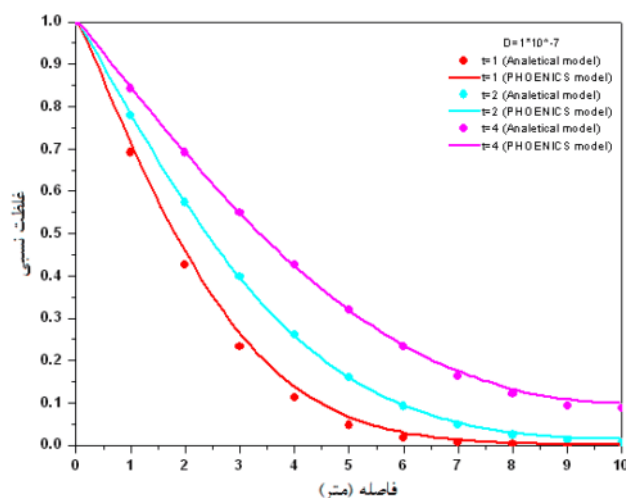


شکل (۴-۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی عددی (خطوط) و حل تحلیلی (نقاط) انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از ضریب پراکندگی و به ازای زمان ۱ سال.

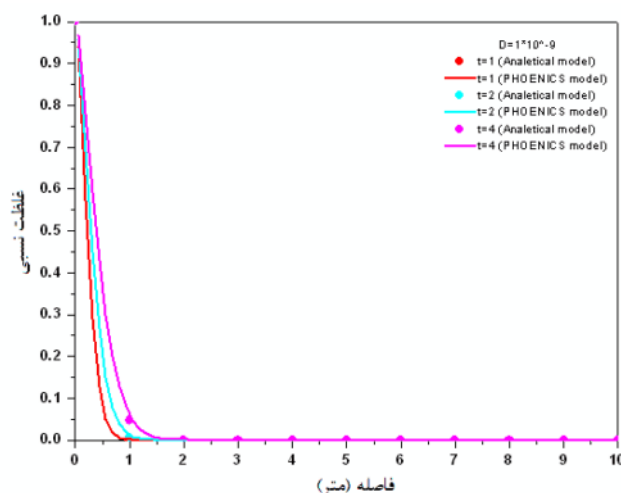


¹. Complimentary of the error function

شکل (۴-۲): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و حل تحلیلی (نقاط) انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از ضریب پراکندگی و به ازای زمان ۴ سال.



شکل (۴-۳): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از زمان و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه.



شکل (۴-۴): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از زمان و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-9} متر مربع بر ثانیه.

در دومین حالت، توانایی مدل حجم های محدود با استفاده از نرم افزار PHOENICS برای

مدل سازی فرآیند پراکندگی و پهنرفت بررسی می گردد. برای حل این حالت به مدل توسعه یافته در

حالت قبلی فرآیند پهنرفت اضافه گردید. شکل (۴-۵) انطباق مناسب نتایج حاصل از دو روش تحلیلی

و عددی را نشان می دهد.

(۴-۴)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

حل تحلیلی معادله انتقال شامل فرآیندهای پراکندگی و پهنرفت به قرار زیر خواهد بود (دولتی ارده جانی و همکاران، ۱۳۸۴):

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) + \exp \left(\frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \right\} \quad (۵-۴)$$

سومین حالت، مدل سازی فرآیند پراکندگی، پهنرفت و جذب خطی را شامل می شود. برای حل این حالت به مدل ایجاد شده در حالت دوم فرآیند جذب خطی اضافه گردید.

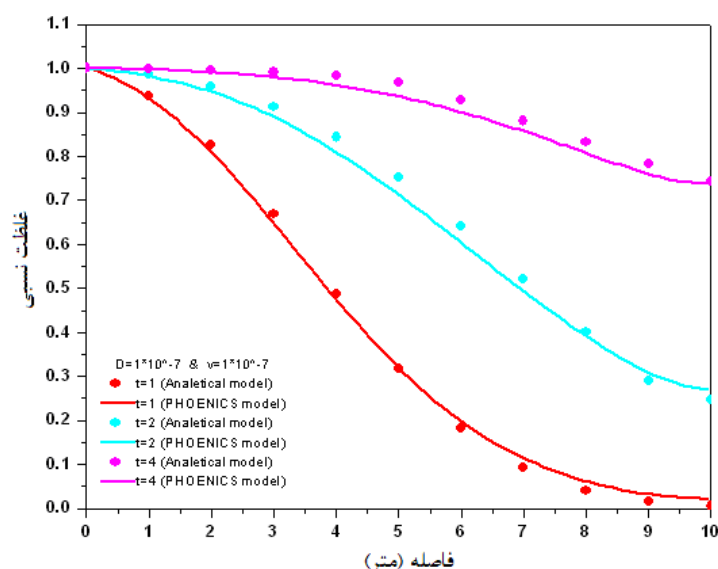
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{v_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (۶-۴)$$

حل تحلیلی معادله (۶-۴) به صورت زیر خواهد بود (دولتی ارده جانی و همکاران، ۱۳۸۴):

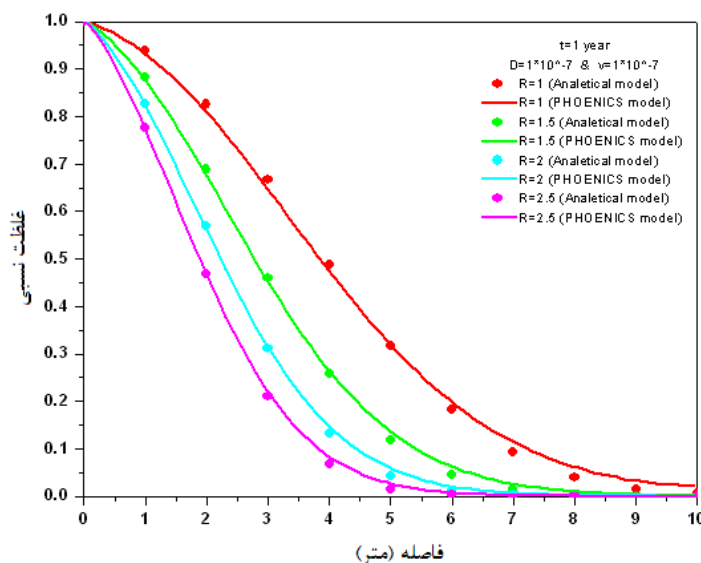
$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx - v_x t}{2\sqrt{RD_x t}} \right) + \exp \left(\frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx + v_x t}{2\sqrt{RD_x t}} \right) \right\} \quad (۷-۴)$$

شکل (۶-۴) نتایج حاصل از نرم افزار PHOENICS را با نتایج تحلیلی برای مسأله انتقال ماده

محلول شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت و جذب خطی را در محیط های زیر سطحی مقایسه می نماید.



شکل (۵-۴): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی و پهنرفت در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از زمان و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه و سرعت 1×10^{-7} متر بر ثانیه.



شکل (۴-۶): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت و جذب خطی در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از ضریب جذب و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه، سرعت 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه و زمان ۱ سال.

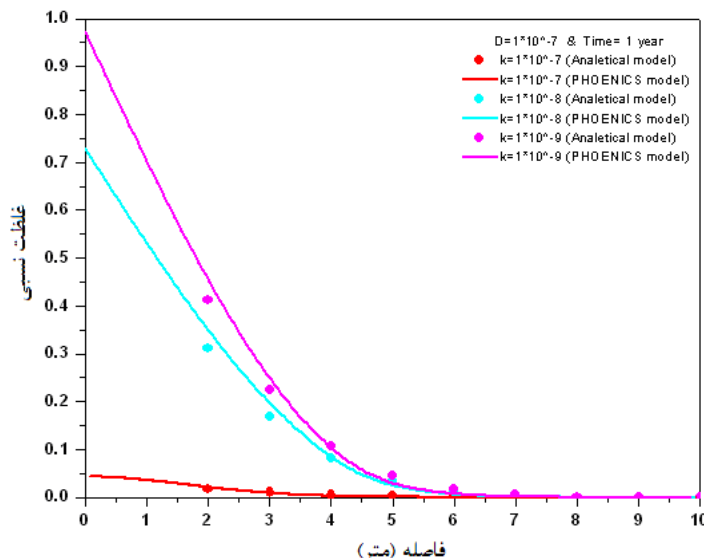
در آخرین حالت، توانایی مدل حجم های محدود با استفاده از نرم افزار PHOENICS برای مدل سازی فرآیند پراکندگی و تخریب مرتبه اول بررسی می گردد. برای حل این حالت به مدل توسعه یافته در حالت اول، فرآیند تخریب مرتبه اول اضافه گردید.

$$(۴-۸) \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k_1 C$$

حل تحلیلی معادله (۴-۸) به صورت زیر خواهد بود (Ghez, 1988):

$$(۴-۹) \quad C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_x t}} \right) e^{-k_1 t}$$

شکل (۴-۹) مطابق خوب نتایج حاصل از دو روش تحلیلی و عددی را نشان می دهد. انطباق خوب نتایج حاصل از دو روش عددی و تحلیلی در تمامی حالات مدل شده نشان می دهد که مدل PHOENICS می تواند بر مبنای انتقال آلاینده محلول با فرآیندهای مذکور را در محیط های متخلخل شبیه سازی کند.



شکل (۴-۸): مقایسه نتایج مدل سازی عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی فرآیند پراکندگی و تخریب مرتبه اول در انتقال جسم محلول در محیط متخلخل به صورت تابعی از ثابت سینتیک و به ازای ضریب پراکندگی 1×10^{-7} متر مربع بر ثانیه و زمان ۱ سال.

۳-۴. تأیید مدل با استفاده از حالت های مدل شده به وسیله سایر محققین

علاوه بر راه های تحلیلی،

داده ها و نتایج مدل سازی حالت ارائه شده توسط پیکنز و لنوکس (Pickens and Lennox, 1976)، جین و همکاران (Jean et al., 2002) رول و همکاران (Rolle et al., 2008) سان و همکاران (Sun et al., 2002) برای تأیید و ارزیابی پیش بینی های مدل عددی استفاده گردید. ادامه این چهار حالت مورد بررسی قرار می گیرند.

۱-۳-۴. حالت اول: شبیه سازی عددی حرکت آلاینده در سیستم جریان پایای آب زیرزمینی

- در اولین حالت، دقت مدل حجم

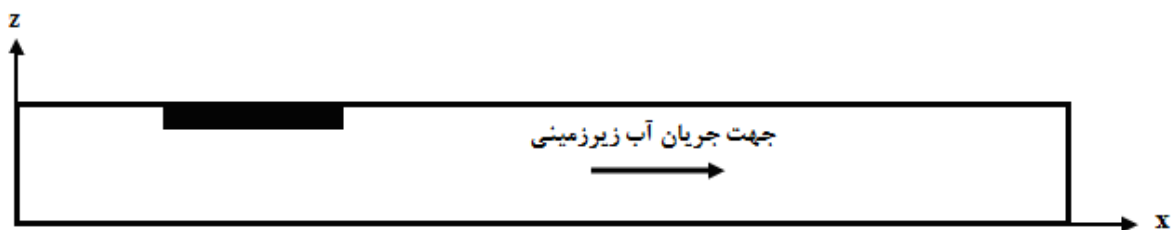
های محدود با استفاده از نرم افزار PHOENICS برای شبیه سازی فرآیندهای موثر در انتقال جسم محلول در محیط آبخانه ای به وسیله داده ها و نتایج مدل سازی ارائه شده توسط پیکنز و لنوکس ارزیابی گردید (Pickens and Lennox, 1976) در این حالت، انتقال ناپایای غیر واکنشی و واکنشی

آلاینده در سیستم اشباع شده جریان آب زیرزمینی تحت شرایط جریان پایا که قبلاً توسط محققان مذکور به کمک روش اجزاء محدود شبیه سازی گردیده بود، مجدداً مدل سازی شد.

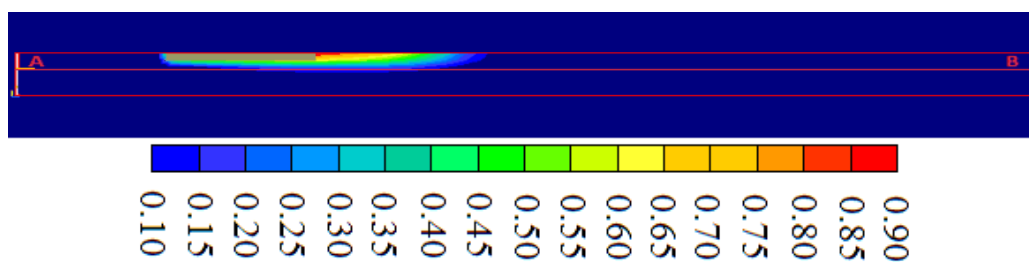
در ابتدا، یک مدل حجم های محدود دو بعدی با طول ۱۰۲۰ متر و عرض ۶۰ متر شامل ۶۱۲ حجم کنترلی با اندازه مساوی در نرم افزار PHOENICS ایجاد شد. جهت x به عنوان جهت جریان آب زیرزمینی در نظر گرفته شد (شکل ۴-۸). شرط مرزی نوع اول یا دریکله با غلظت ثابت در ورودی مدل تعیین شد. مقدار غلظت اولیه صفر در هر سلول مدل و مقدار غلظت صفر در خروجی مدل در نظر گرفته شد. ۱۸۰ گام زمانی و تعداد ۱۰۰۰ تکرار برای شبیه سازی تعیین گردید. مقادیر ورودی مدل در جدول (۴-۱) آورده شده است. مدل در حالت غیر واکنشی به ازای مقادیر مختلف پراکندگی طولی و عرضی برای مدت زمان ۱۵ سال اجرا شد (شکل های ۴-۹ تا ۴-۱۳).

جدول (۴-۱): پارامترهای ورودی مدل (Pickens and Lennox, 1976).

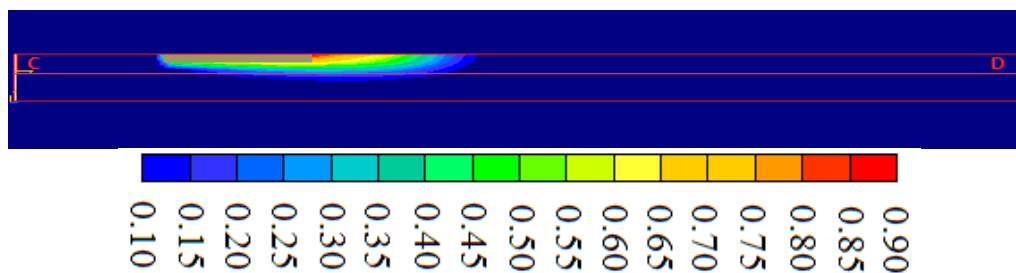
پارامتر	مقدار
طول مدل	۱۰۲۰ متر (در امتداد x)
عرض مدل	۶۰ متر (در امتداد z)
مدت زمان شبیه سازی	۶۰ سال
تعداد گام های زمانی	۷۲۰
فاصله زمانی برای هر پیش بینی	۱ ماه
بستگی زمانی مدل	ناپایا
تعداد المان های حجمی	۶۱۲
ضریب پراکندگی طولی	۱۰ متر
ضریب پراکندگی عرضی	۰/۵ متر
تعداد تکرارها	۱۰۰۰
تخلخل	۰/۳
هدایت هیدرولیکی	۰/۵ (m/day)
چگالی جرمی خشک	۱/۸ (g/cm^3)
ثابت سینتیک مرتبه اول	1×10^{-8} ($1/s$)



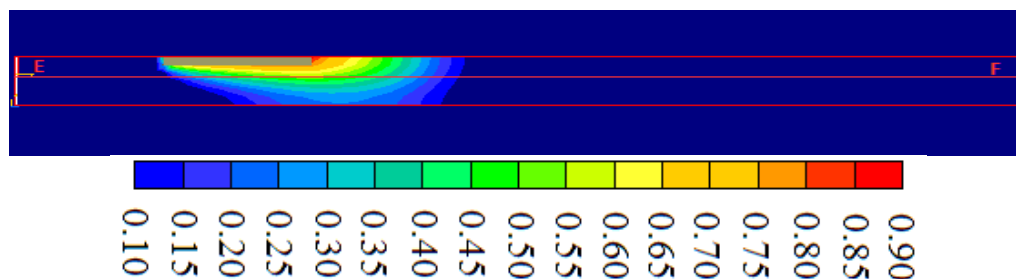
شکل (۴-۸): دامنه مدل استفاده شده برای شبیه‌سازی.



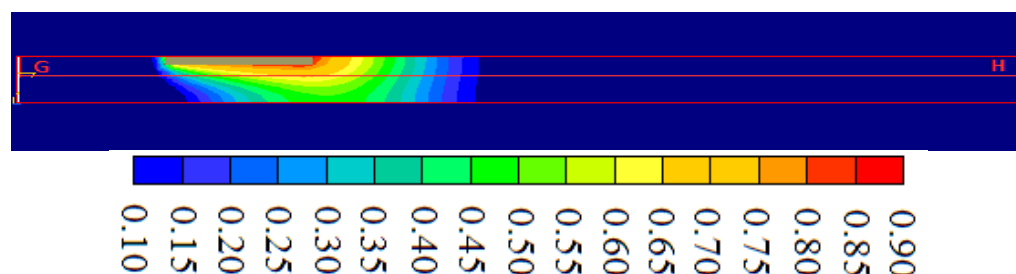
شکل (۴-۹): توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان ۱۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با $\alpha_L = \alpha_T = 0.5 m$.



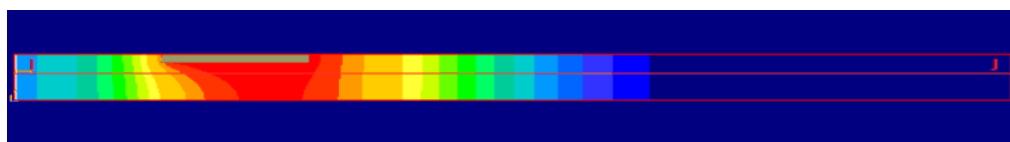
شکل (۴-۱۰): توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان ۱۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با $\alpha_L = \alpha_T = 1 m$.

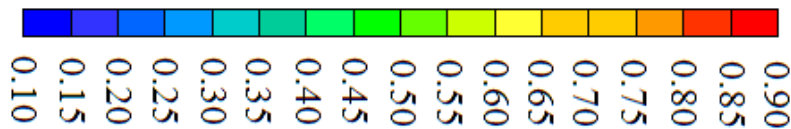


شکل (۴-۱۱): توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان ۱۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با $\alpha_L = \alpha_T = 5 m$.



شکل (۴-۱۲): توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان ۱۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با $\alpha_L = \alpha_T = 10 m$.

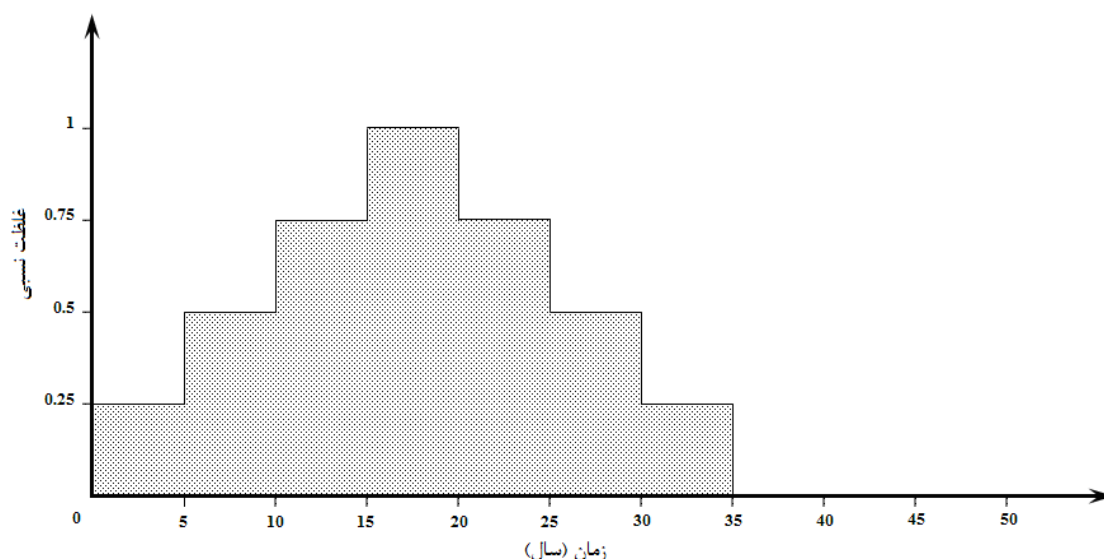




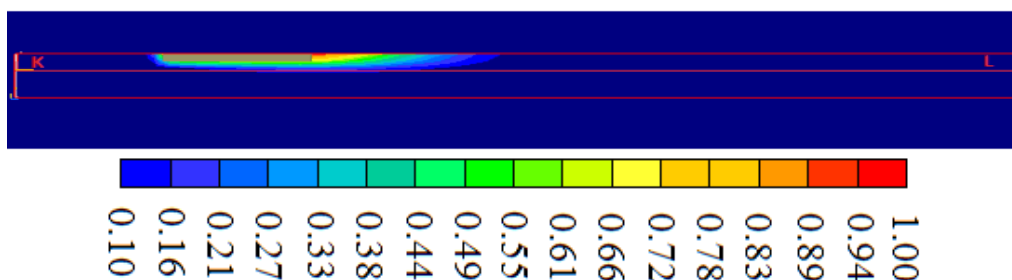
شکل (۴-۱۳): توزیع غلظت آلاینده برای مدت زمان ۱۵ سال به ازای ضریب پراکندگی برابر با $\alpha_L = \alpha_T = 100 m$.

نتایج نشان می‌دهند که همان‌طور که مقدار ضریب پراکندگی افزایش می‌یابد، آلودگی بیشتر در محیط جریان آب پخش می‌شود. این به آن معنی است که فرآیند پراکندگی یک مکانیزم مهم موثر بر تحول و انتقال آلاینده محلول است. بعلاوه، افزایش ضریب پراکندگی گرادیان غلظت کاهش می‌دهد. چون جریان آب زیرزمینی به صورت افقی فرض می‌شود، افزایش ضریب پراکندگی عرضی باعث می‌شود که آلاینده‌ها بیشتر به سمت مرز پایینی مدل پخش شوند.

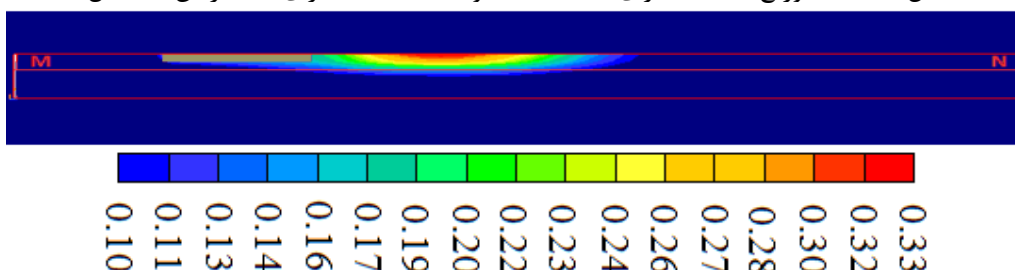
در مرحله بعدی مدل سازی، یک منبع با غلظت‌های ورودی متغیر با زمان تعیین و مدل برای مدت زمان‌های ۲۰، ۳۵ و ۵۰ سال اجرا شد. غلظت‌های ورودی مدل بر اساس شکل (۴-۱۴) تعیین گردید. نتایج این حالت نشان می‌دهد که چگونه یک ناحیه سابقا آلوده در سیستم جریان آب زیرزمینی در زیر منطقه نشت به وسیله تغذیه طبیعی آب زیرزمینی با گذشت زمان بعد از قطع ورود آلاینده تجدید می‌شود (شکل‌های ۴-۱۵ تا ۴-۱۷).



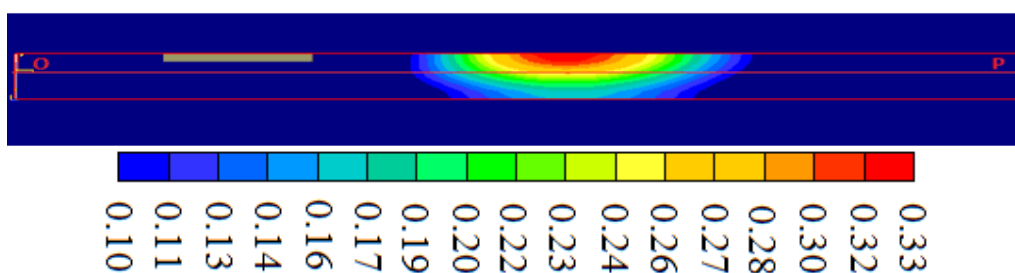
شکل (۴-۱۴): منبع تولید آلاینده با غلظت متغیر با زمان (Pickens and Lennox, 1976).



شکل (۴-۱۵): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ برای مدت زمان ۲۰ سال.



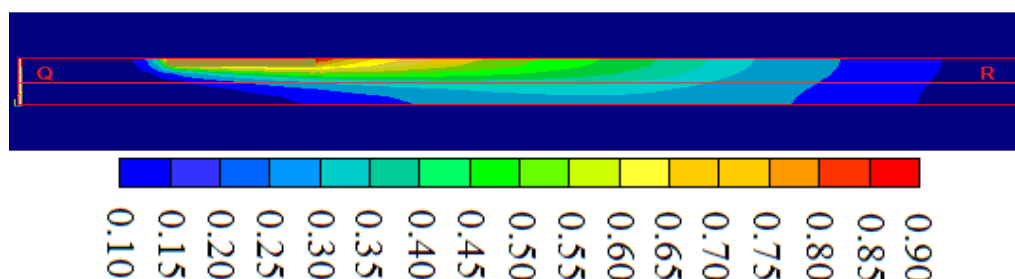
شکل (۴-۱۶): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ برای مدت زمان ۳۵ سال.



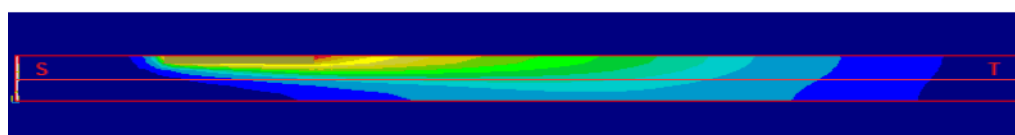
شکل (۴-۱۷): توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.

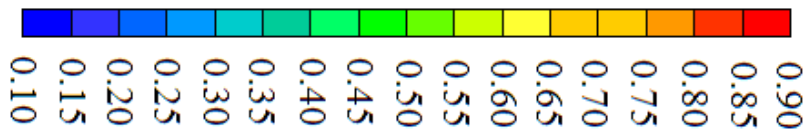
در مرحله سوم، مدل در حالت واکنشی به ازای مقادیر مختلف ضریب توزیع و برای مدت زمان

۶۰ سال اجرا گردید (شکل‌های ۴-۱۸ تا ۴-۲۲).

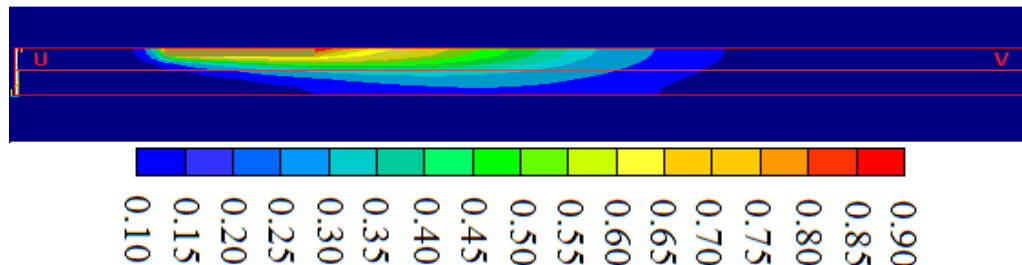


شکل (۴-۱۸): اثر تغییر مقدار ضریب توزیع $k_d = 0$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$.

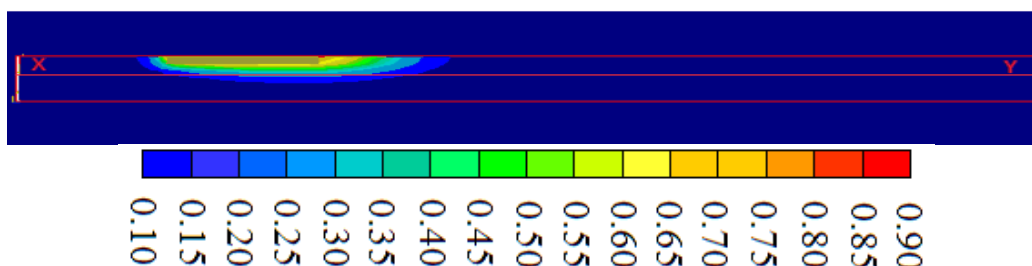




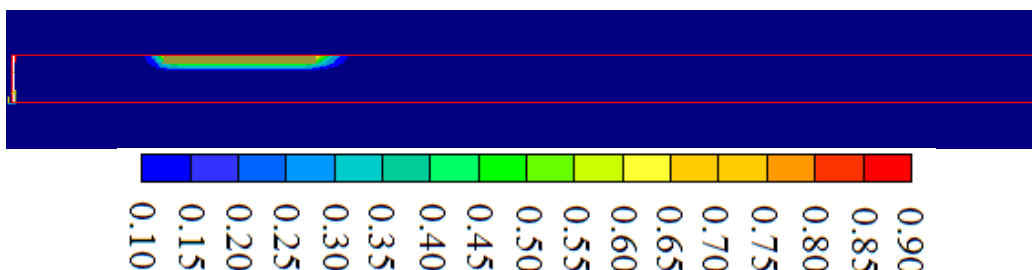
شکل (۴-۱۹): اثر تغییر مقدار ضریب توزیع $k_d = 0.01$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ ، در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$.



شکل (۴-۲۰): اثر تغییر مقدار ضریب توزیع $k_d = 0.1$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ ، در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$.



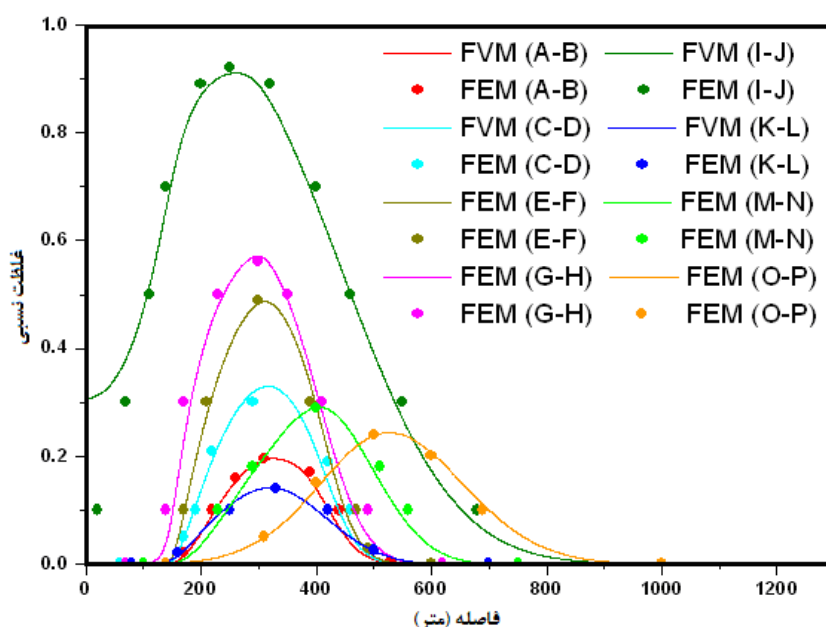
شکل (۴-۲۱): اثر تغییر مقدار ضریب توزیع $k_d = 1$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ ، در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$.



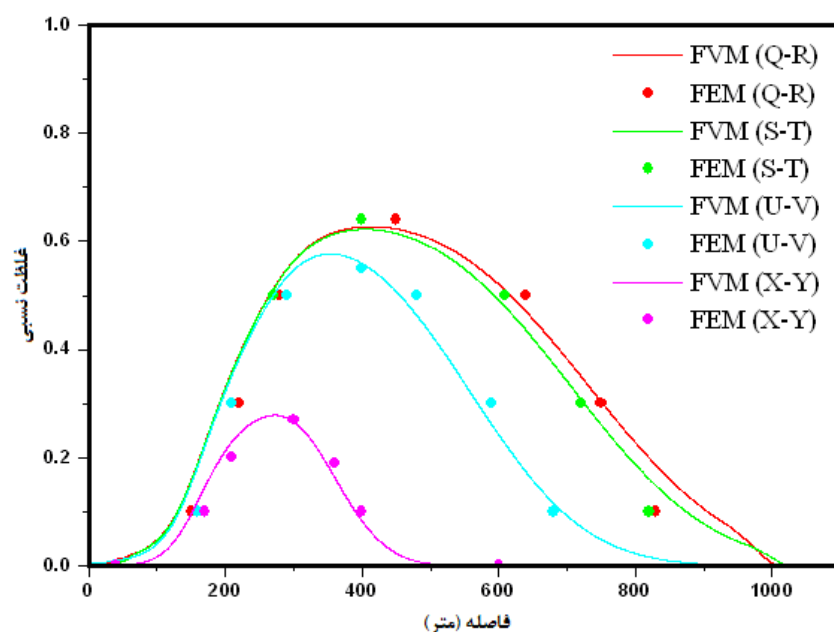
شکل (۴-۲۲): اثر تغییر مقدار ضریب توزیع $k_d = 10$ بر توزیع غلظت به ازای $\alpha_L = 10m$ و $\alpha_T = 0.5m$ ، در مدت زمان ۶۰ سال و غلظت ورودی $C/C_o = 1$.

نتایج نشان می دهد که ضمن انتقال آلاینده، فرآیند جذب روی سطوح جامد سبب می گردد تا بخشی از آلاینده محلول در آب زیرزمینی از آن خارج گردد که نتیجه آن تأخیر در فرآیند انتقال در محیط متخلخل خواهد بود. انتقال آلاینده برای مقادیر بزرگ k_d در جهت جریان خیلی آهسته می باشد.

مقایسه نتایج مدل سازی حاضر با نتایج به دست آمده توسط پیکنز و لنوکس حاکی از انطباق خوب آن ها است (شکل های ۴-۲۳ و ۴-۲۴). بنابراین، مدل حجم های محدود حاضر به طور قابل اعتمادی می تواند برای مدل سازی انتقال غیر واکنشی و واکنشی آلاینده به کار رود.



شکل (۴-۲۳): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود حاضر (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل اجزاء محدود پیکنز و لنوکس (نقاط) (Pickens and Lennox , 1976) برای انتقال آلودگی بر روی مقاطع AB, CD, EF, GH, IJ, KL, MN, OP. مشخص شده روی شکل های (۴-۱۰) تا (۴-۱۴) و شکل های (۴-۱۶) تا (۴-۱۸).



شکل (۴-۲۴): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود حاضر (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل اجزاء محدود پیکنز و لنوکس (نقاط) (Pickens and Lennox , 1976) برای انتقال آلودگی بر روی مقاطع QR, ST, UV, XY.

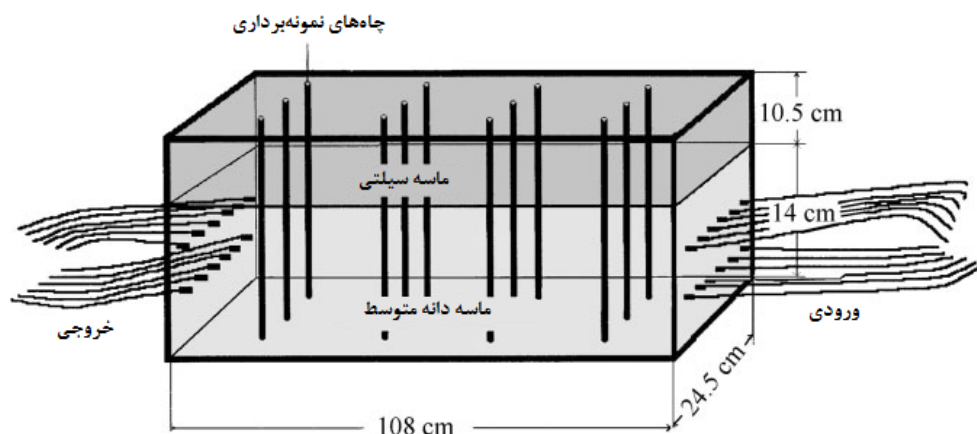
مشخص شده روی شکل‌های (۴-۱۹) تا (۴-۲۳).

۴-۳-۲. حالت دوم: شبیولوی تجزیه بیولوژیکی و انتقال بنزن، تلوئن و زایلن در یک سفره

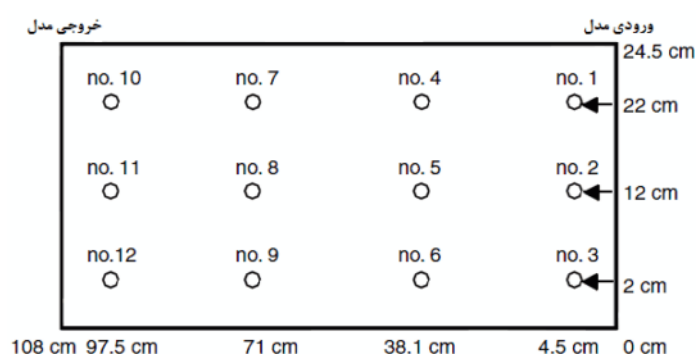
شبیه‌سازی شده، مقایسه نتایج مدل شده و آزمایشگاهی

در دومین حالت، برای ارزیابی مدل عددی از داده‌ها و نتایج مدل‌سازی یک بعدی اجزاء محدود که توسط جین و همکاران برای انتقال و تجزیه بیولوژیکی ترکیبات BTX در یک سفره شبیه‌سازی شده ارائه گردید، استفاده شد (Jean et al, 2002). شکل شماتیک و نمای از بالای سفره شبیه‌سازی شده و موقعیت چاه‌های نمونه برداری در آن در شکل‌های (۴-۲۵ و ۴-۲۶) نشان داده شده است (Jean et al, 2002).

برای حل عددی این مسأله، در ابتدا یک مدل حجم‌های محدود یک بعدی با طول ۱۰۸ سانتی‌متر شامل ۱۰۸ حجم کنترلی با اندازه مساوی در محیط نرم‌افزار PHOENICS ساخته شد. جهت x به عنوان جهت جریان در نظر گرفته شد. شرط مرزی نوع اول یا دریکله با غلظت ثابت در ورودی مدل تعیین شد. مقدار غلظت اولیه صفر در هر سلول مدل و یک مقدار غلظت صفر در خروجی مدل در نظر گرفته شد. ۷۰ گام زمانی و به تعداد ۱۰۰۰ تکرار برای شبیه‌سازی تعیین گردید. مدل ابتدا در حالت دینامیک برای شبیه‌سازی انتقال غیر واکنشی BTX برای مدت زمان ۷۰ ساعت برای چاه شماره (۸) در سفره اجرا شد (شکل ۴-۲۷). مرحله دوم مدل سازی بعد از تزریق توده باکتری به سفره در حالت استاتیک انجام گردید. در این مرحله، تجزیه بیولوژیکی ترکیبات BTX با در نظر گرفتن سینتیک مرتبه اول و موند مدل گردید (شکل ۴-۲۸). مقایسه نتایج مدل‌سازی PHOENICS با نتایج به دست آمده توسط جین و همکاران حاکی از انطباق خوب آن‌ها است. بنابراین، مدل حاضر به طور قابل اعتمادی می‌تواند برای مدل‌سازی انتقال واکنشی آلاینده‌ها در محیط‌های آبخانه‌ای به کار رود. مقادیر ورودی مدل در جدول (۴-۲) آورده شده است.



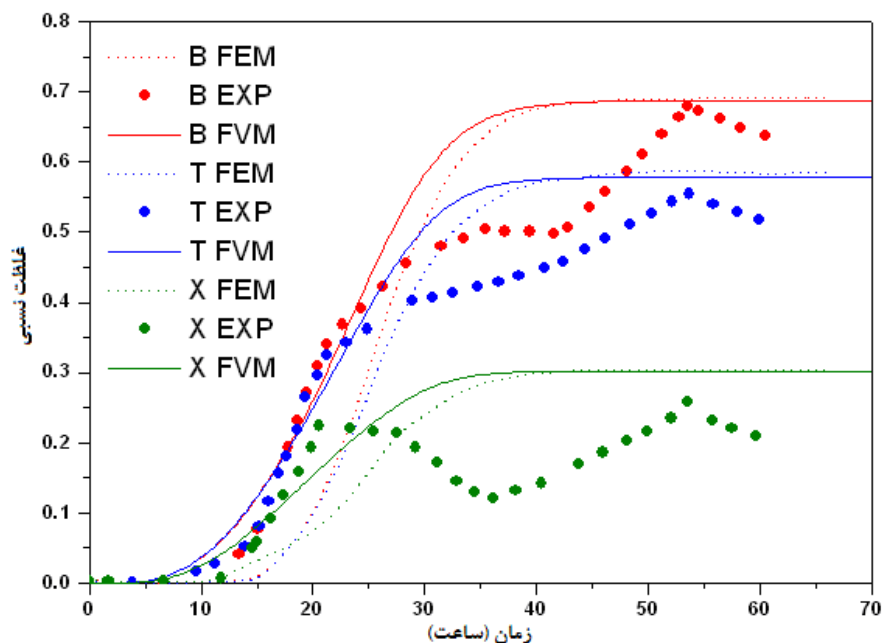
شکل (۴-۲۵): شکل شماتیک سفره نیمه محدود شبیه‌سازی شده (Jean et al, 2002).



شکل (۴-۲۶): نمای از بالای سفره شبیه‌سازی شده و موقعیت چاه‌های نمونه‌برداری در آن (Jean et al, 2002).

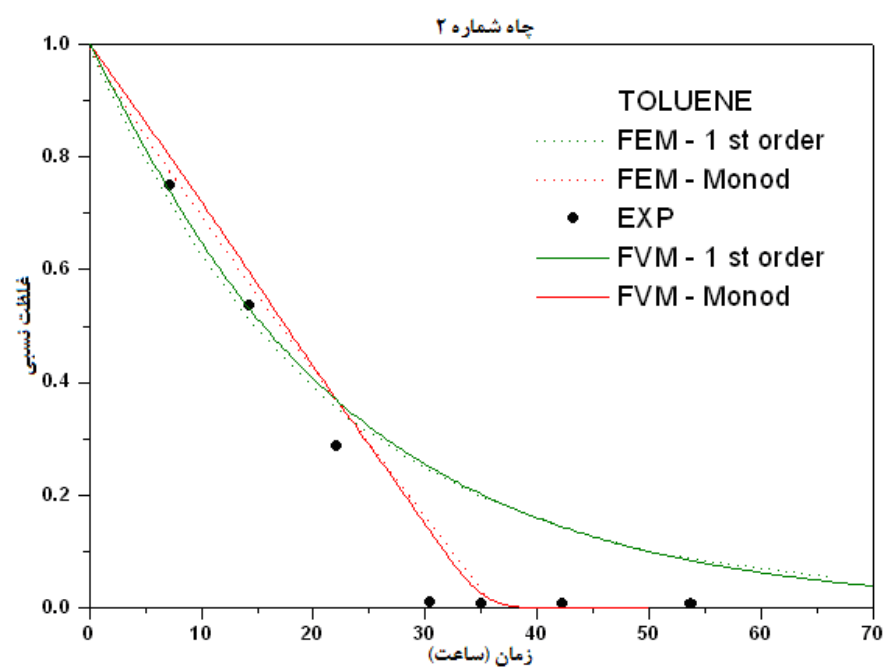
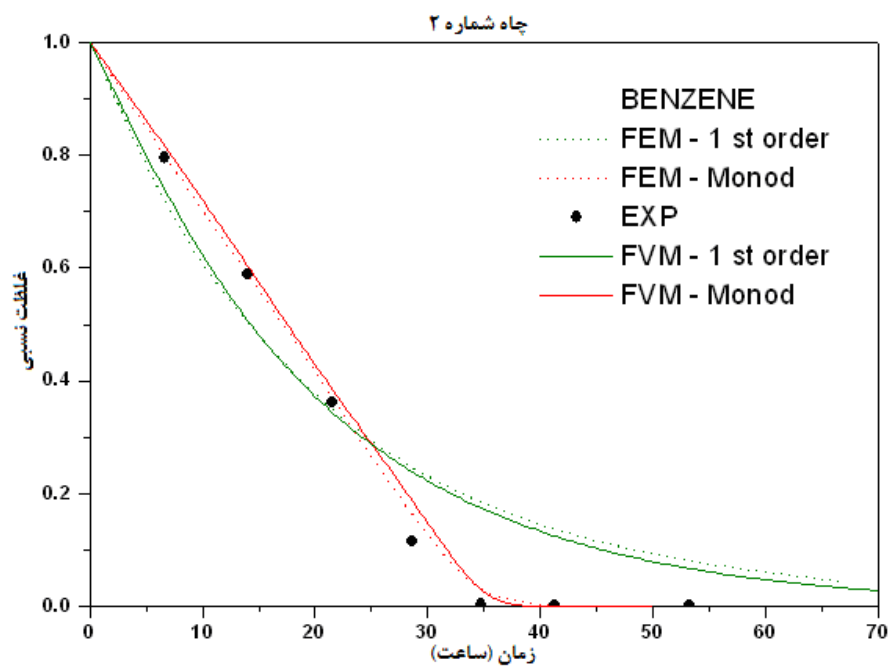
جدول (۴-۲): پارامترهای ورودی مدل (Jean et al, 2002).

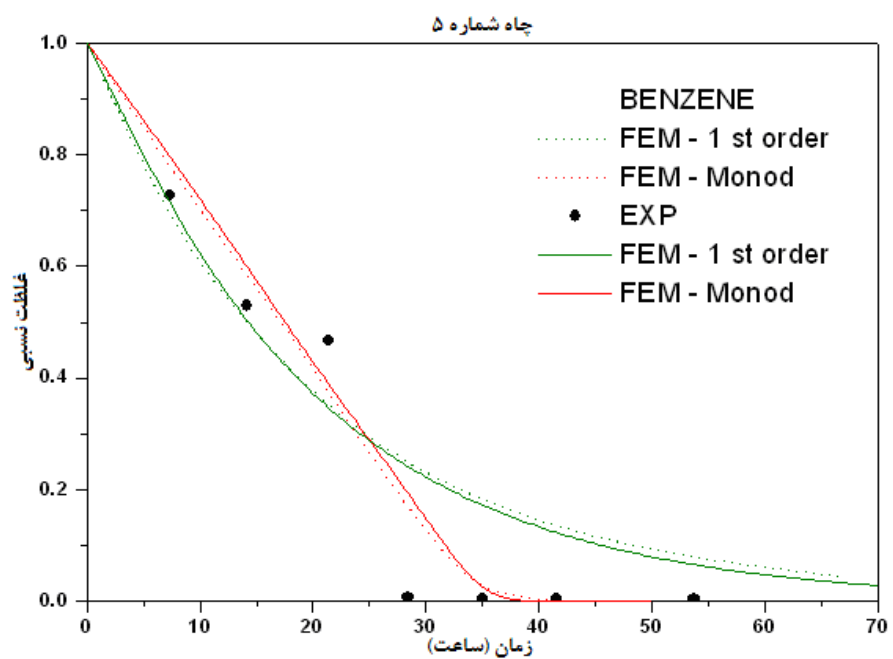
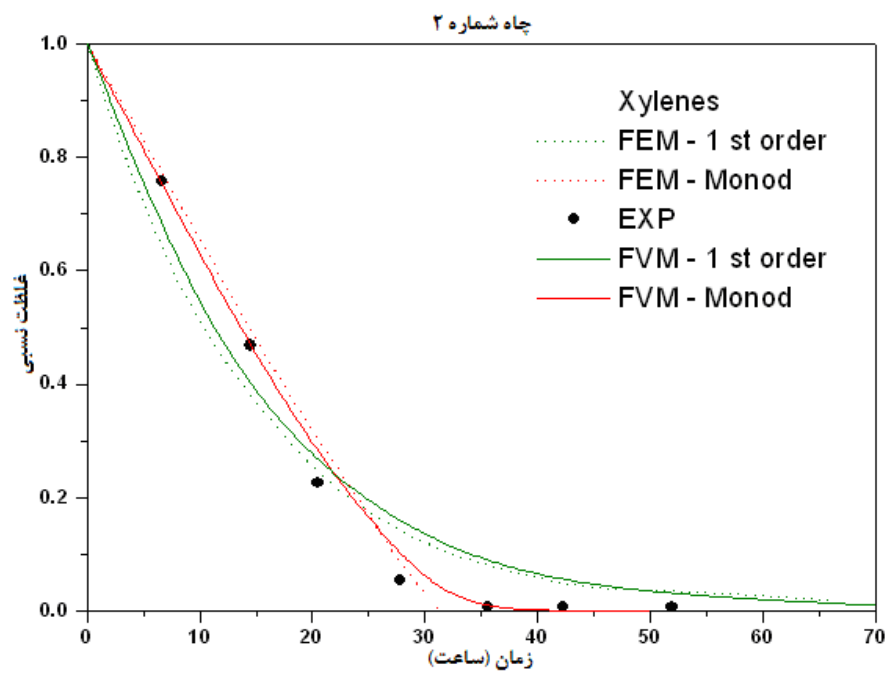
پارامتر	مقدار
طول مدل	۱۰۸ سانتی‌متر (در امتداد x)
مدت زمان شبیه‌سازی	۷۰ ساعت
تعداد گام‌های زمانی	۷۰
فاصله زمانی برای هر پیش‌بینی	۱ ساعت
بستگی زمانی مدل	ناپایا
تعداد المان‌های حجمی	۱۵۱۲
ضریب پراکندگی	۰/۷۲۵ سانتی متر
تعداد تکرارها	۱۰۰۰
تخلخل	۰/۴
هدایت هیدرولیکی	۵/۰۷ (cm/min)
چگالی جرمی خشک	۱/۹ (g/cm^3)

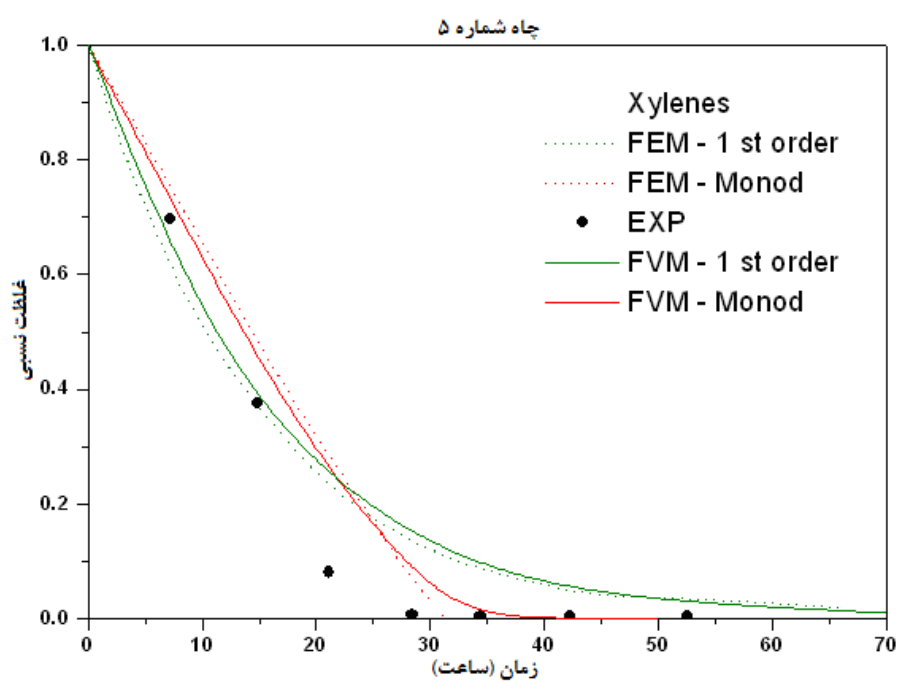
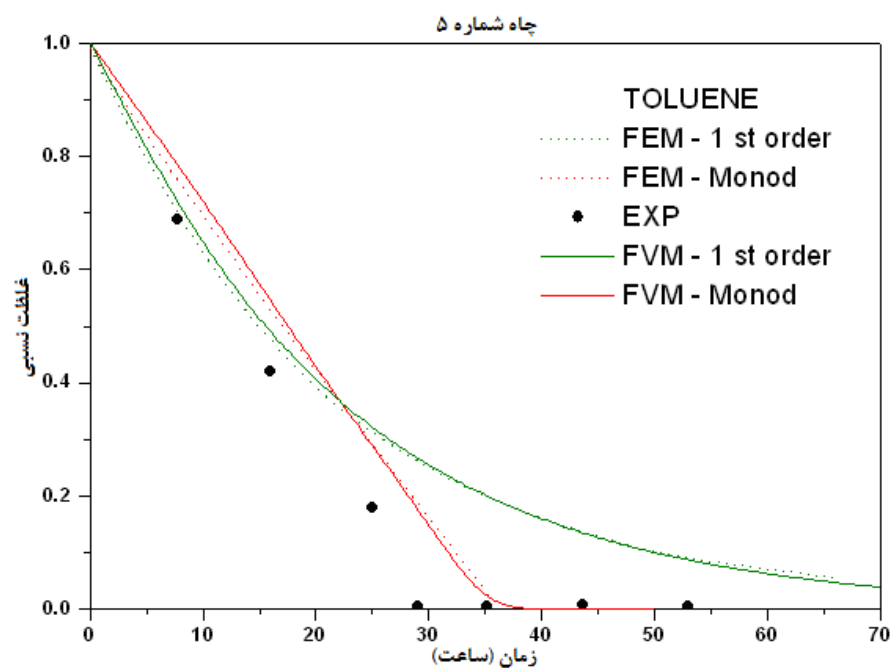


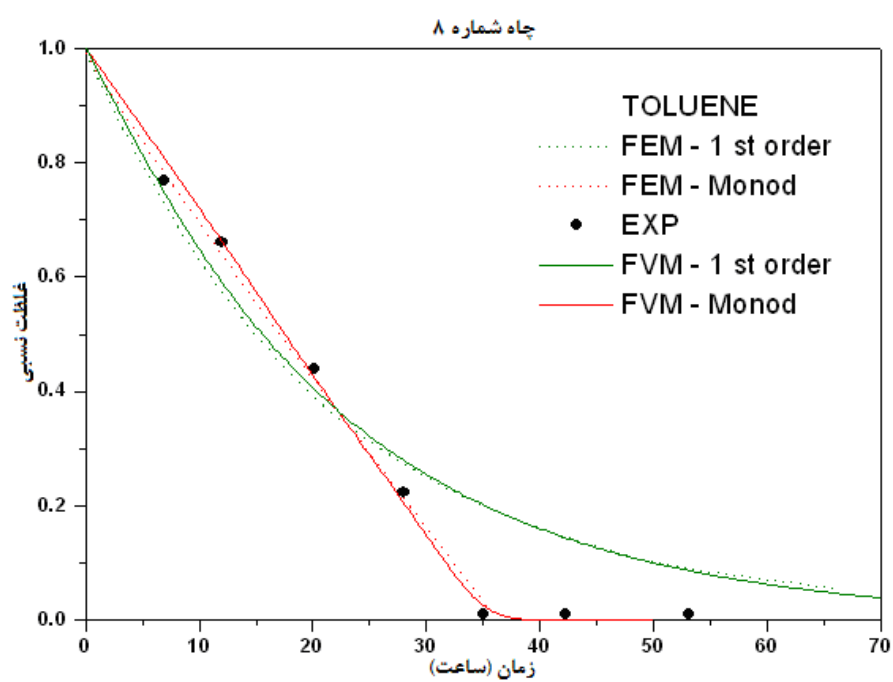
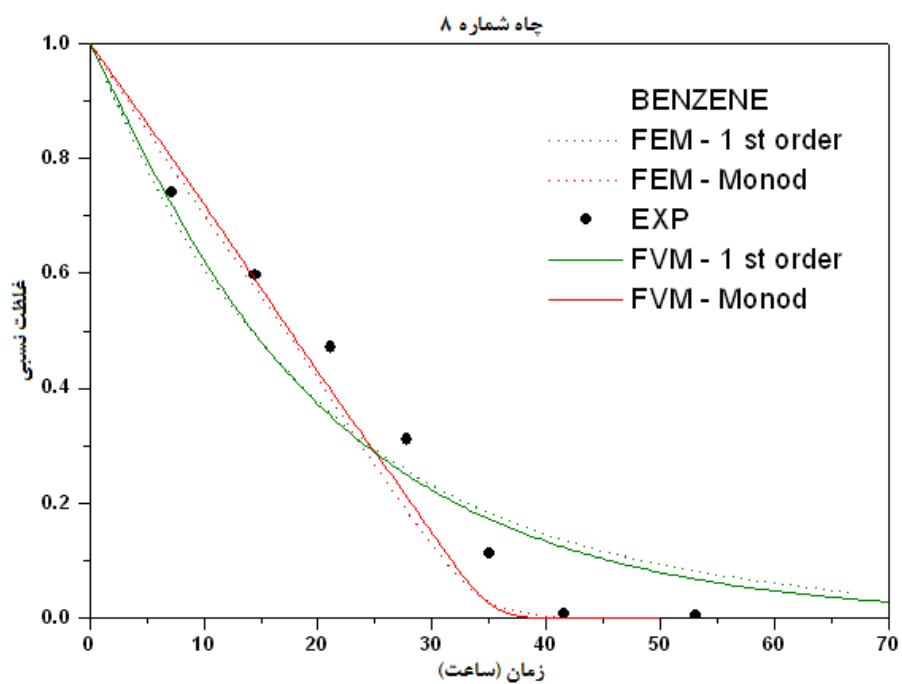
شکل (۴-۲۷): منحنی‌های رخنه برای بنزن، تولوئن و زایلن در چاه شماره (۸) قبل از تزریق توده باکتری (FEM مدل اجزای محدود (Jean et al, 2002)، EXP نتایج آزمایشگاهی (Jean et al, 2002)، FVM مدل حجم‌های محدود).

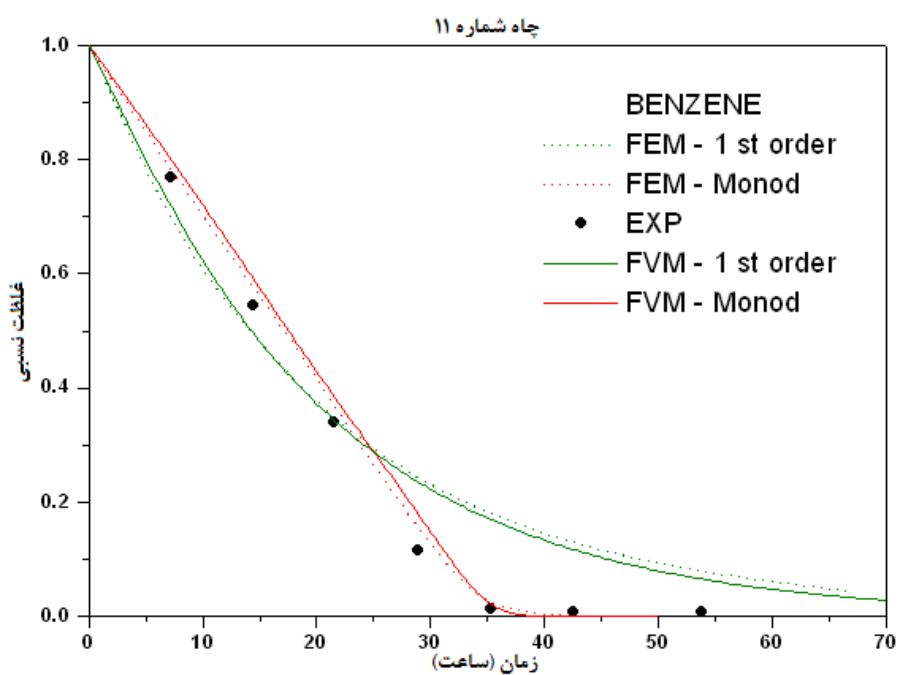
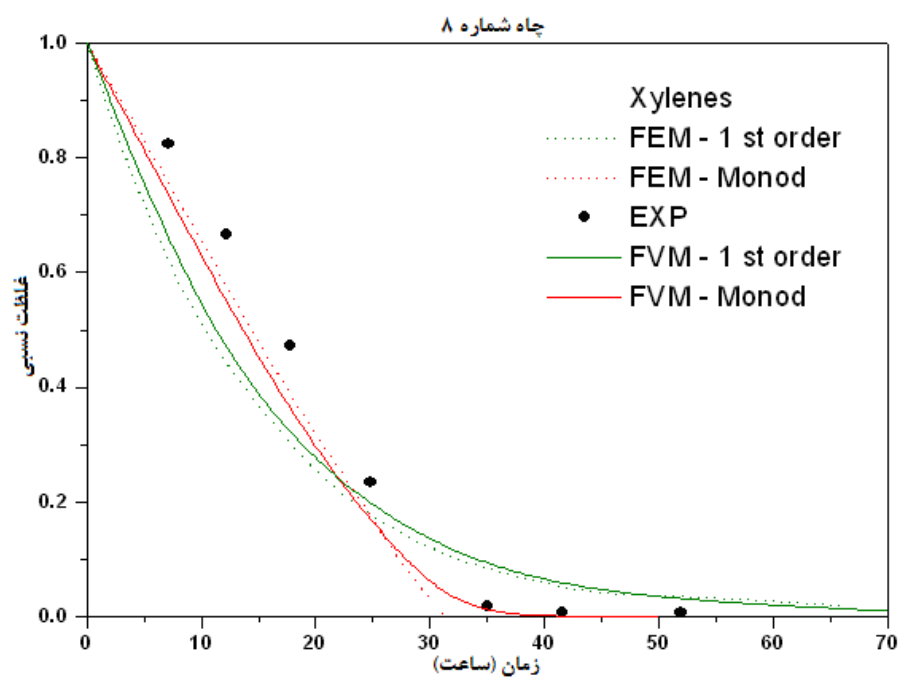
همان طور که در شکل (۴-۲۷) مشاهده می شود غلظت ترکیبات BTX در زمان‌های مختلف نوسان دارد. اختلاف بین اثرات تجزیه و تبخیر باعث می شود که منحنی های سه ترکیب از هم جدا شوند. نوسانات مشاهده شده در نتایج آزمایشگاهی می توانند به وسیله رقیق سازی ترکیبات BTX از طریق فرآیند پراکندگی هیدرودینامیکی ایجاد شده باشند. ترکیبات BTX به آسانی در آب حل نمی شوند و بنابراین ممکن است طی انتقال، در خلل و فرج بین دانه های ماسه تبخیر یا به دانه‌های ماسه جذب شوند. این ترکیبات وقتی سرعت جریان آب زیرزمینی تغییر کرد می توانند به آسانی به داخل آب منفذی از روی سطوح جامد واجذب شوند. فرآیندهای جذب و واجذب به همراه پراکندگی هیدرودینامیکی ممکن است باعث نوسانات در غلظت سه ترکیب آلاینده شوند. چون زایلن بیشترین اثر جذب را دارد، نمودار آن نسبت به نمودارهای بنزن و تولوئن نوسانات کمتری دارد. تبخیر می تواند عامل دیگری در ایجاد نوسانات غلظت باشد. زیرا این فرآیند می تواند وسعت فرآیندهای جذب و واجذب را تحت تاثیر قرار دهد.

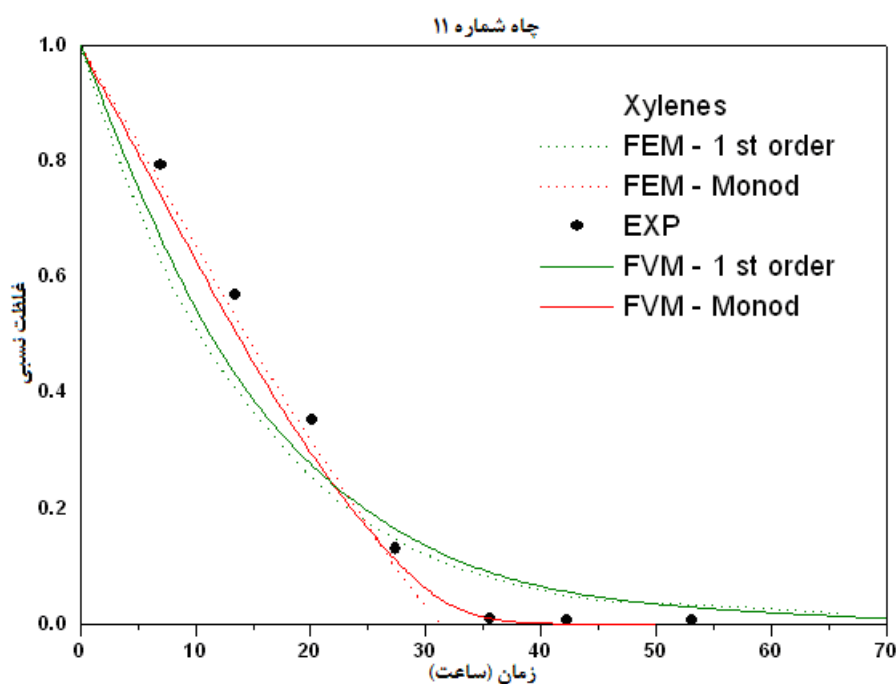
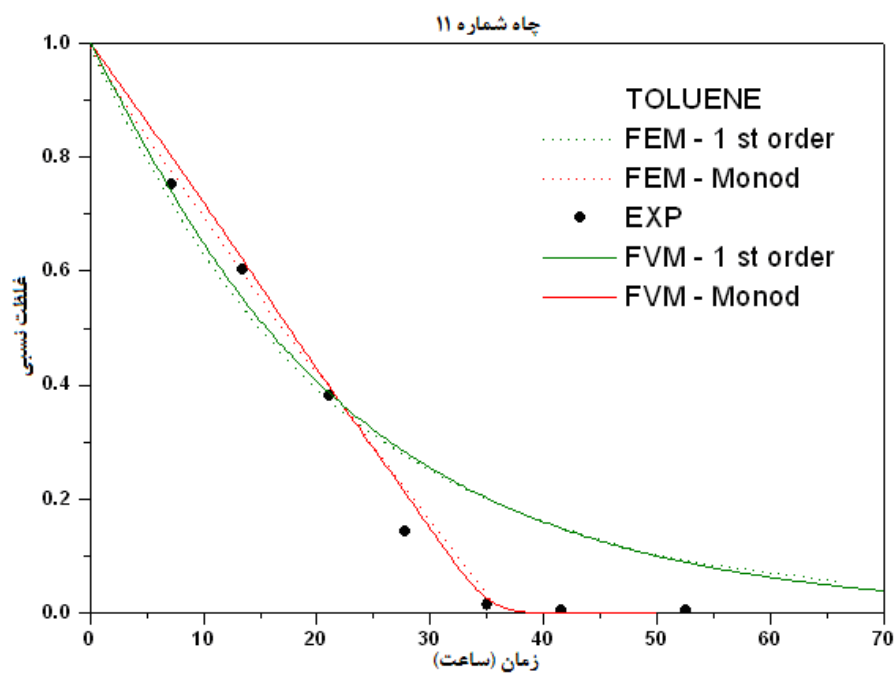












شکل (۴-۲۸): مقایسه نتایج بدست آمده برای تجزیه بیولوژیکی بنزن، تولوئن و زایلن به وسیله داده‌های آزمایشگاهی (Jean et al, 2002) و مدل سازی اجزای محدود (Jean et al, 2002) و حجم های محدود در چاه‌های شماره (۲)، (۵)، (۸) و (۱۱).

مقایسه نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی عددی در شکل (۴-۲۸) نشان می دهد که نتایج حاصله از روش موند دقیق تر از نتایج بدست آمده از روش تجزیه مرتبه اول است. منحنی های تجزیه بیولوژیکی

ترکیبات BTX تعیین شده از روش تجزیه موند در طیف غلظت های پایین و بالا در زمان های یکسان با نتایج آزمایشگاهی در انطباق خوبی هستند. این ترکیبات تقریباً در مدت زمان ۳۵ ساعت با استفاده از روش موند و نتایج آزمایشگاهی به طور کامل تجزیه می شوند. در حالی که، منحنی های حاصل از روش مرتبه اول با نتایج آزمایشگاهی فقط در غلظت های بالا مطابقت دارند. ترکیبات BTX در چاه ها با استفاده از سینتیک تجزیه مرتبه اول در مدت زمان ۷۰ ساعت به طور کامل با فرآیند بیولوژیکی تجزیه نمی شوند. غلظت های نسبی نشان داده شده در شکل (۴-۲۹) بدون نوسان هستند. زیرا تلفات جرم ترکیبات BTX توسط تجزیه بیولوژیکی بزرگ تر از تلفات به واسطه فرآیندهای جذب و تبخیر است.

۴-۳-۳. حالت سوم: روشی سینتیکی برای شبیه سازی فرآیندهای تجزیه بیولوژیکی حاشیه

و هلمتکنترل شده به وسیله اکسیداسیون و احیاء در آب زیرزمینی توسعه مدل و به

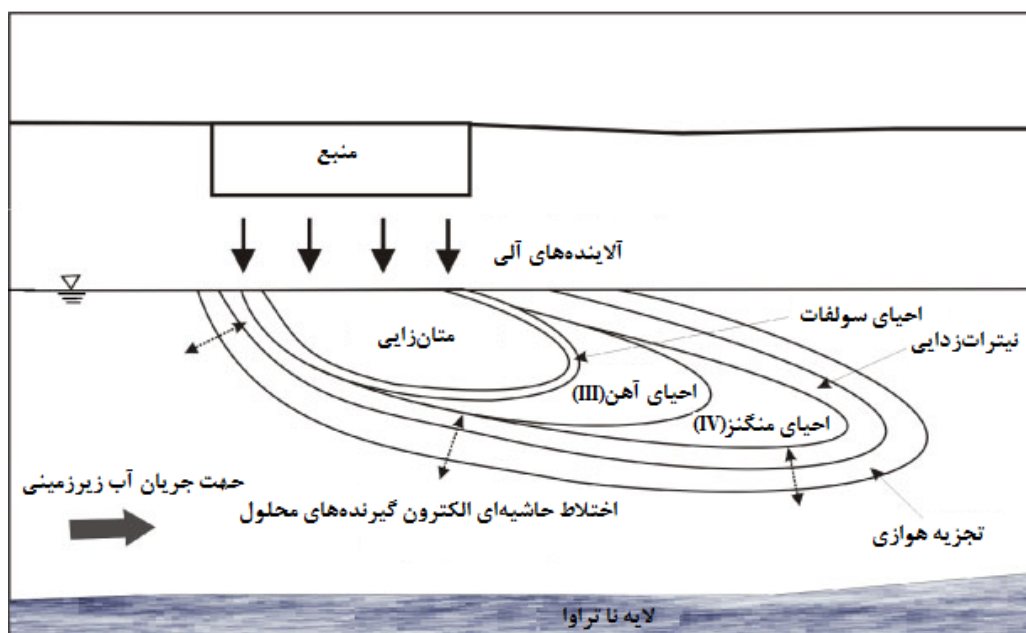
کارگیری آن برای یک سایت لندفیل در پیدمونت^۱ ایتالیا

در حالت سوم، توانایی مدل

عددی حجم های محدود ارائه شده توسط نرم افزار PHOENICS با استفاده از داده ها و نتایج مدل اختلاف محدود ارائه شده توسط رول و همکاران (Rolle et al, 2008) برای مدل سازی واکنش های تجزیه بیولوژیکی رخ دهنده در سه ناحیه حاشیه، شبه هسته و هسته پلوم آلاینده توسط الکترون-گیرنده های مختلف اثبات گردید. مدل مفهومی برای منطقه بندی اکسیداسیون و احیاء در آب زیرزمینی در شکل (۴-۲۹) نشان داده شده اند. واکنش های اکسیداسیون و احیاء در سفره های آلوده شده به وسیله متانال^۲ قابل اکسایش در جدول (۴-۳) آورده شده اند.

^۱. Piedmont

^۲. Methanal



شکل (۴-۲۹): مدل مفهومی برای منطقه‌بندی اکسیداسیون و احیاء در آب زیرزمینی (Rolle et al, 2008).

جدول (۴-۳): واکنش‌های اکسیداسیون و احیاء در سفره‌های آلوده شده به وسیله ترکیبات آلی قابل اکسایش (Rolle et al, 2008).

انرژی آزاد گیبس $\Delta G \text{ (kcal mol}^{-1}\text{)}$	واکنش اکسیداسیون و احیاء	فرآیند
-۱۲۰	$CH_2O + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$	تجزیه هوازی
-۱۱۴	$5CH_2O + 4NO_3^- + 4H^+ \rightarrow 5CO_2 + 2N_2 + 7H_2O$	نیترات‌زدایی
-۸۱	$CH_2O + 2MnO_2 + 4H^+ \rightarrow CO_2 + 2Mn^{2+} + 3H_2O$	احیای منگنز
-۲۸	$CH_2O + 4Fe(OH)_3 + 8H^+ \rightarrow CO_2 + 4Fe^{2+} + 11H_2O$	احیای آهن
-۲۵	$2CH_2O + SO_4^{2-} + H^+ \rightarrow 2CO_2 + HS^- + 2H_2O$	احیای سولفات
-۲۲	$2CH_2O + CO_2 \rightarrow CH_4 + 2CO_2$	متان‌زایی

در اولین مرحله، تجزیه بیولوژیکی متانال در اتصال با الکترون گیرنده های مختلف در یک

سیستم پیوسته^۱ مدل سازی گردید. برای این کار، یک مدل حجم های محدود یک بعدی با طول یک

متر و شامل تنها یک حجم کنترلی در محیط نرم افزار PHOENICS ایجاد گردید. شبیه سازی ها با

استفاده از پارامترهای سینتیکی و شرایط اولیه خلاصه شده در جدول (۴-۴) کامل گردید. مدل برای

مدت زمان ۵۰ روز اجرا شد (شکل های ۴-۳۰ و ۴-۳۱).

^۱. Batch

در مرحله دوم، الگو جدایش مناطق اکسیداسیون و احیاء در یک سفره سطحی بعد از رهاسازی متانال از یک منبع نقطه ای به صورت دو بعدی مدل گردید. شکل (۴-۳۲) هندسه و شرایط مرزی مدل را نشان می‌دهد. پارامترهای جریان و انتقال مدل در جدول (۴-۵) خلاصه شده‌اند. برای این کار، یک مدل حجم‌های محدود دو بعدی با طول ۵۱۰ متر و عرض ۳۱۰ متر شامل ۲۵۲۹۶ حجم کنترلی با اندازه‌های مساوی در نرم‌افزار PHOENICS ایجاد شد. جهت x به عنوان جهت جریان در نظر گرفته شد. شرط مرزی نوع ۱ ول یا دریگله با غلظت ثابت در ورودی مدل تعیین گردید. مقدار غلظت اولیه صفر در هر سلول مدل و یک مقدار غلظت صفر در خروجی مدل در نظر گرفته شد. ۱۱ گام زمانی و تعداد تکرار ۲۰۰ برای شبیه‌سازی تعیین گردید. سپس مدل برای مدت زمان ۱۰۰۰ روز اجرا گردید. شکل‌های (۴-۳۳) تا (۴-۴۸) نتایج شبیه‌سازی را بعد از ۲ سال انتقال واکنشی نشان می‌دهد. مقایسه نتایج مدل سازی به روش حجم های محدود با نتایج به دست آمده توسط رول و همکاران حاکی از انطباق خوب آن‌ها است (شکل‌های ۴-۳۰ و ۴-۳). بنابراین، مدل حاضر می‌تواند به طور قابل اعتمادی برای مدل سازی انتقال واکنشی آلاینده‌های آلی به کار رود.

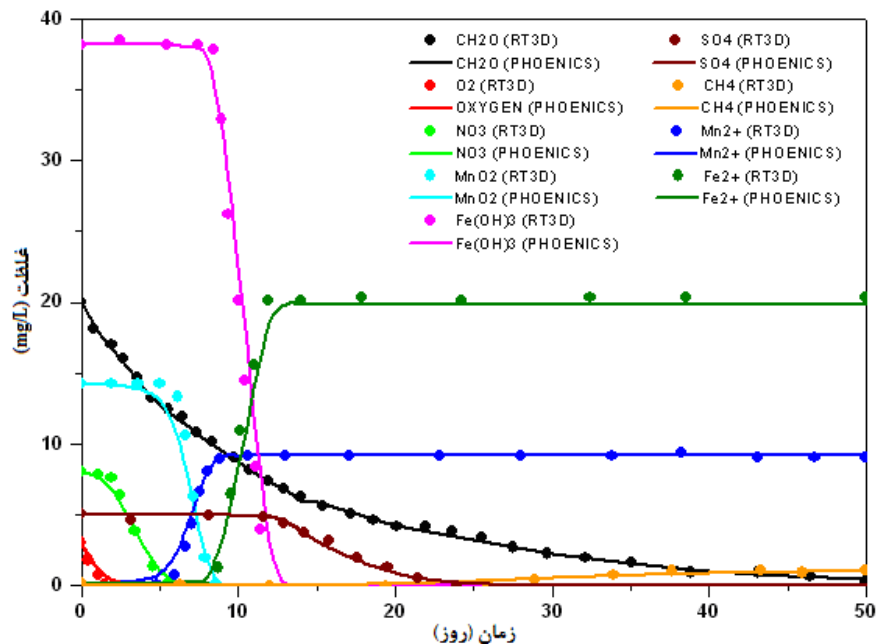
جدول (۴-۴): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه‌سازی سیستم پیوسته (Rolle et al, 2008).

پارامترهای سینتیکی	مقدار
ثابت تجزیه هوازی (k_{O_2})	$0.15 (d^{-1})$
ثابت تجزیه نیترات زدایی (k_{NO_3})	$0.12 (d^{-1})$
ثابت تجزیه احیای منگنز (k_{Mn})	$0.11 (d^{-1})$
ثابت تجزیه احیای آهن (k_{Fe})	$0.1 (d^{-1})$
ثابت تجزیه احیای سولفات (k_{SO_4})	$0.09 (d^{-1})$
ثابت تجزیه متان زایی (k_{CH_4})	$0.08 (d^{-1})$
ثابت نیمه اشباع اکسیژن (K_{O_2})	$0.15 (mg/L)$
ثابت نیمه اشباع نیترات (K_{NO_3})	$0.15 (mg/L)$
ثابت نیمه اشباع منگنز (K_{Mn})	$0.15 (mg/L)$
ثابت نیمه اشباع آهن (K_{Fe})	$0.15 (mg/L)$
ثابت نیمه اشباع سولفات (K_{SO_4})	$0.15 (mg/L)$
ثابت نیمه اشباع متان (K_{CH_4})	$0.15 (mg/L)$

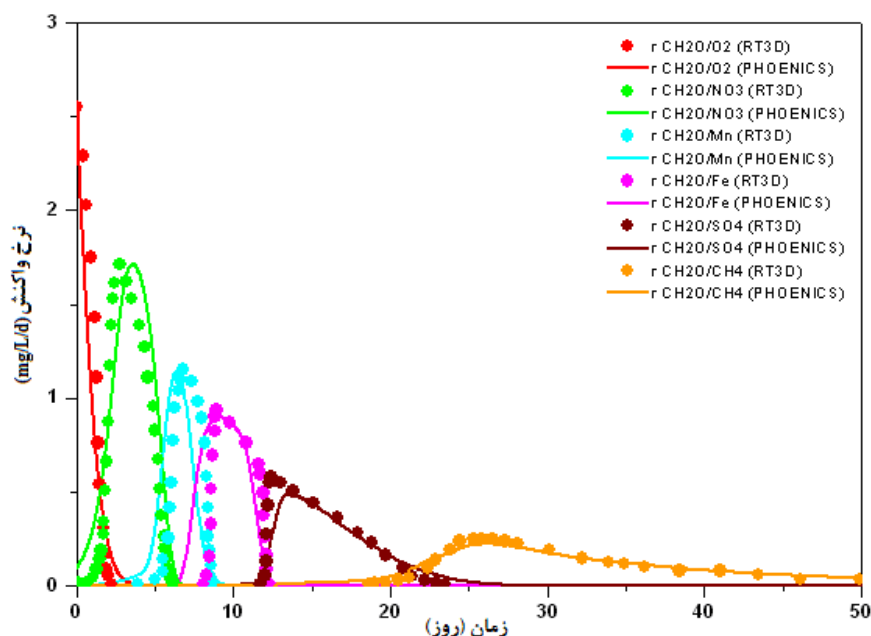
$0.1 (mg/L)$	ثابت جلوگیری اکسیژن (K_{i,O_2})
$0.1 (mg/L)$	ثابت جلوگیری نیترات (K_{i,NO_3})
$0.1 (mg/L)$	ثابت جلوگیری منگنز ($K_{i,Mn}$)
$0.1 (mg/L)$	ثابت جلوگیری آهن ($K_{i,Fe}$)
$0.1 (mg/L)$	ثابت جلوگیری سولفات (K_{i,SO_4})
شرایط اولیه برای گونه‌های شیمیایی	
$20 (mg/L)$	CH_2O
$3 (mg/L)$	O_2
$8 (mg/L)$	NO_3^-
$0.1 (mg/L)$	Mn^{2+}
$0.1 (mg/L)$	Fe^{2+}
$5 (mg/L)$	SO_4^{2-}
$0.1 (mg/L)$	CH_4
$14/24 (mg/L)$	MnO_2
$38/21 (mg/L)$	$Fe(OH)_3$
ضرایب استوکیومتری	فرآیند
$1/0.7$	تجزیه هوازی Y_{O_2/CH_2O}
$1/65$	نیترازدایی Y_{NO_3/CH_2O}
$3/67$	$\left. \begin{array}{l} Y_{Mn^{2+}/CH_2O} \\ Y_{MnO_2/CH_2O} \end{array} \right\}$ احیای منگنز
$5/8$	
$7/47$	$\left. \begin{array}{l} Y_{Fe^{2+}/CH_2O} \\ Y_{Fe(OH)_3/CH_2O} \end{array} \right\}$ احیای آهن
$14/27$	
$1/6$	احیای سولفات Y_{SO_4/CH_2O}
$0/27$	متان‌زایی Y_{CH_4/CH_2O}

شکل (۴-۳۰) پروفیل‌های غلظت گونه‌های واکنشی را برای مدت زمان ۵۰ روز نشان می‌دهد. روند کاهشی غلظت متانال از تجزیه بیولوژیکی با مصرف متوالی الکترون گیرنده‌های مختلف ناشی می‌شود. در این سیستم، ابتدا اکسیژن و به دنبال آن نیترات و سپس گونه‌های جامد MnO_2 و $Fe(OH)_3$ تهی می‌شوند. در اثر واکنش گونه‌های جامد MnO_2 و $Fe(OH)_3$ به ترتیب Mn^{2+} و

Fe^{2+} محلول تولید می‌شود. بعد از آن‌ها، سولفات شروع به مصرف می‌کند و در نهایت متان تحت شرایط احیایی حداکثر (متان‌زایی) تولید می‌شود.



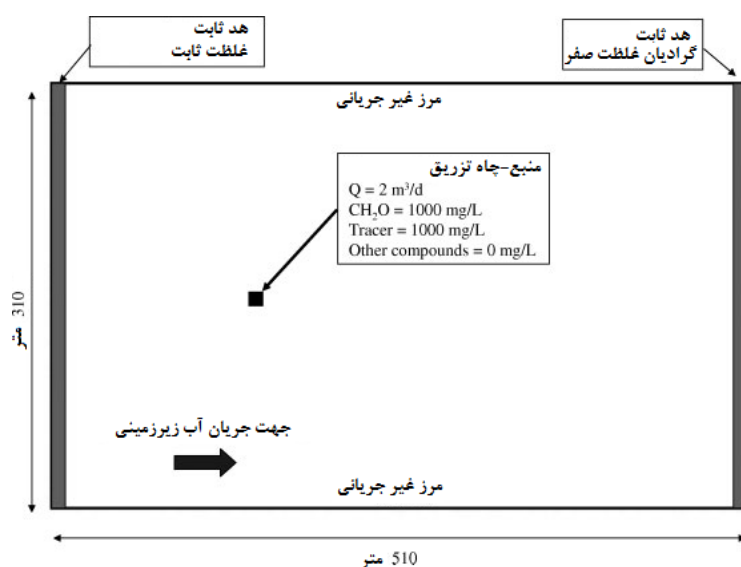
شکل (۴-۳۰): مقایسه نتایج مدل‌سازی حجم‌های محدود (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل اختلاف محدود رول و همکاران (نقاط) (Rolle et al, 2008) برای تجزیه بیولوژیکی در سیستم پیوسته.



شکل (۴-۳۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی PHOENICS (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل اختلاف محدود رول و همکاران (نقاط) (Rolle et al, 2008) برای تجزیه بیولوژیکی در سیستم پیوسته.

در شکل (۴-۳۱) ، پروفیل‌های

مربوط به نرخ‌های واکنش‌های رخ داده در سیستم در مدت زمان ۵۰ روز نشان داده شده است. در آغاز شبیه سازی، تجزیه هوازی فرآیند اکسیداسیون و احیا غالب است. وقتی اکسیژن موجود در سیستم مصرف شد، احیای نیترات رخ می‌دهد. تجزیه متوالی متانال به واسطه الکترون گیرنده‌ها تا واکنش متان‌زایی پیش می‌رود. واکنش متان‌زایی در شبیه‌سازی وقتی که تمام الکترون‌گیرنده‌ها کاملاً مصرف شدند دیرتر از دیگر واکنش‌ها رخ می‌دهد.

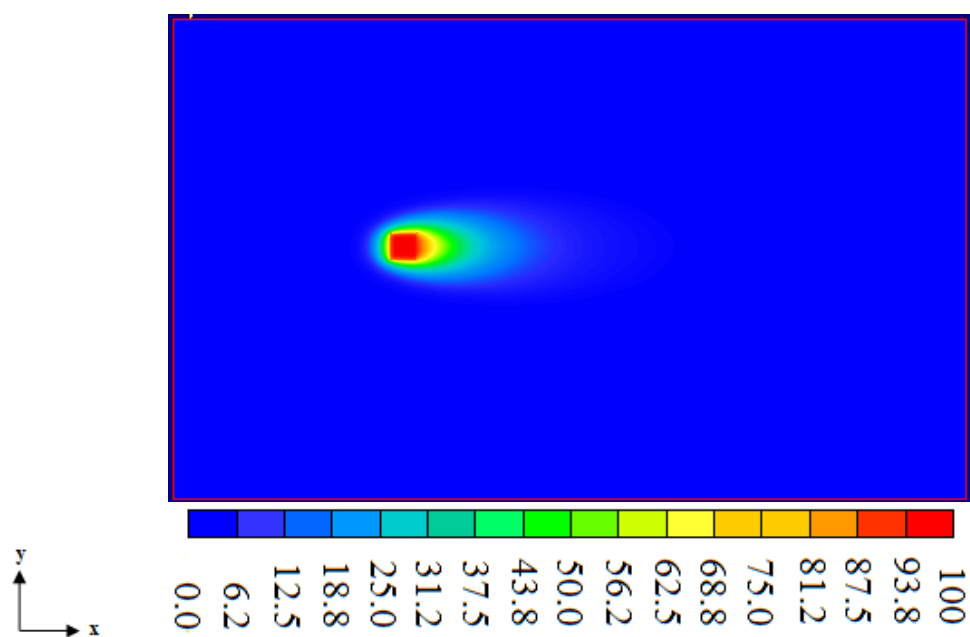


شکل (۴-۳۲): هندسه و شرایط مرزی برای مدل دو بعدی (Rolle et al, 2008).

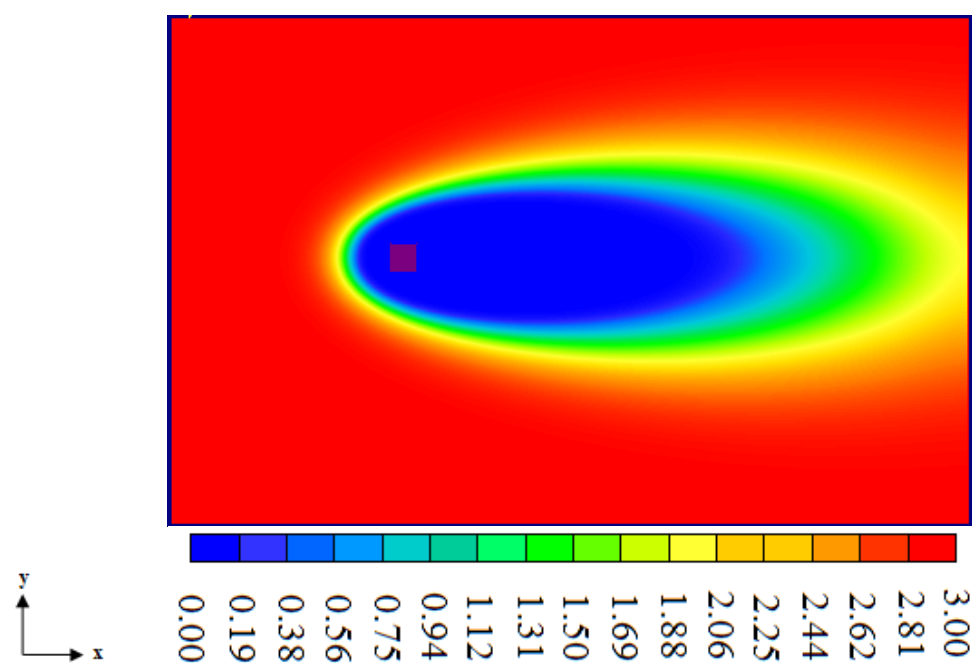
جدول (۴-۵): پارامترهای مدل استفاده شده در شبیه‌سازی دو بعدی (Rolle et al, 2008).

مقدار	گسسته‌سازی فضایی و زمانی
$510\text{ m} \times 310\text{ m}$	مساحت مدل
204×124	تعداد مش‌ها
۱۰۰۰ روز	زمان شبیه‌سازی
مقدار	پارامترهای جریان و انتقال
50 m/d	هدایت هدرولیکی
۰/۳	تخلخل
۱۰۰ متر	هد ثابت (مرز سمت چپ)
۹۹ متر	هد ثابت (مرز سمت راست)
۱۰ متر	ضریب پراکندگی طولی α_x

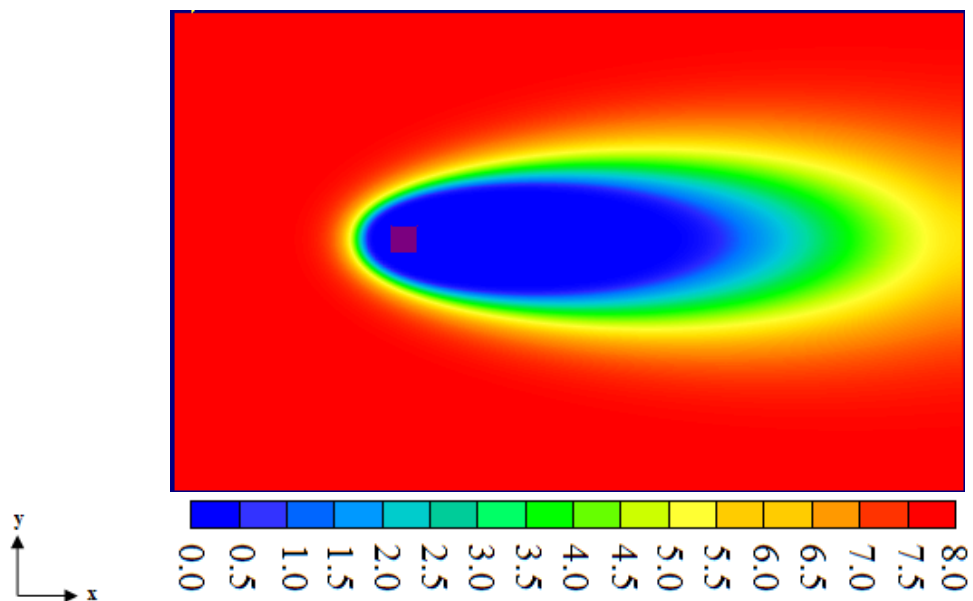
α_x ۰/۳ متر	ضریب پراکندگی عرضی α_y
	شرایط مرزی انتقال
خروجی: گرایان غلظت صفر ۲۰ (mg/L) ۳ (mg/L) ۸ (mg/L) ۰/۱ (mg/L) ۰/۱ (mg/L) ۵ (mg/L) ۰/۰۱ (mg/L) ۰ (mg/L)	ورودی: غلظت ثابت CH_2O O_2 NO_3^- Mn^{2+} Fe^{2+} SO_4^{2-} CH_4 ردیاب
مقدار	شرایط اولیه
۲۰ (mg/L) ۳ (mg/L) ۸ (mg/L) ۰/۱ (mg/L) ۰/۱ (mg/L) ۵ (mg/L) ۰/۰۱ (mg/L)	CH_2O O_2 NO_3^- Mn^{2+} Fe^{2+} SO_4^{2-} CH_4
۰ (mg/L) ۱۴/۲۴ (mg/L) ۳۸/۲۱ (mg/L)	ردیاب MnO_2 $Fe(OH)_3$
مقدار	منبع آلودگی
۲ (m ³ /d) ۱۰۰ (mg/L) ۱۰۰ (mg/L)	نرخ جریان غلظت CH_2O غلظت ردیاب
مقدار	پارامترهای سینتیکی
۰/۱۸ (d ⁻¹) ۰/۱۱ (d ⁻¹) ۰/۰۷ (d ⁻¹) ۰/۰۱ (d ⁻¹) ۰/۰۱ (d ⁻¹)	ثابت تجزیه هوازی (k_{O_2}) ثابت تجزیه نیترات زدایی (k_{NO_3}) ثابت تجزیه احیای منگنز (k_{Mn}) ثابت تجزیه احیای آهن (k_{Fe}) ثابت تجزیه احیای سولفات (k_{SO_4})



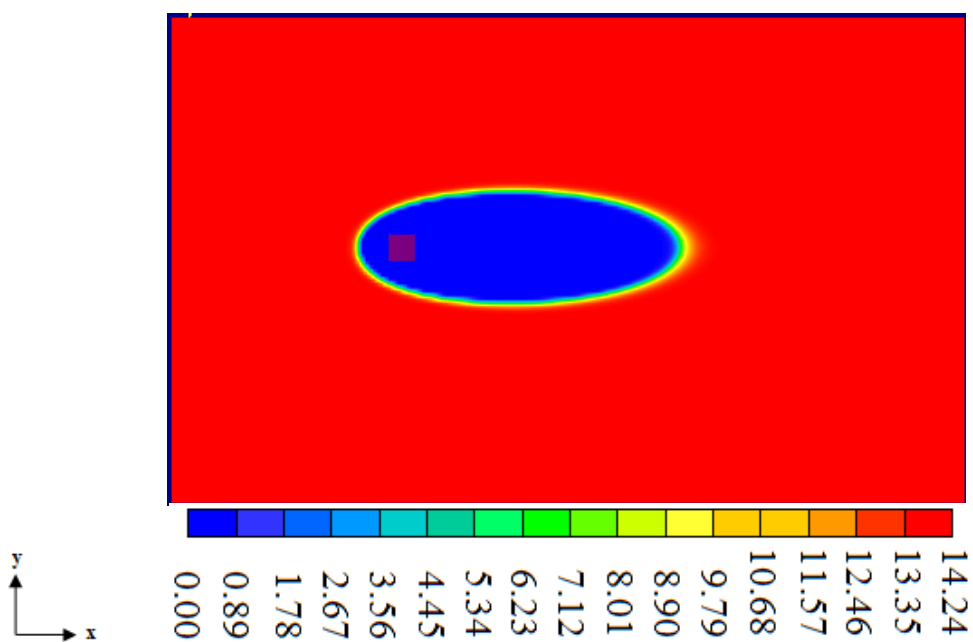
شکل (۴-۳۳): توزیع غلظت متانال (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.



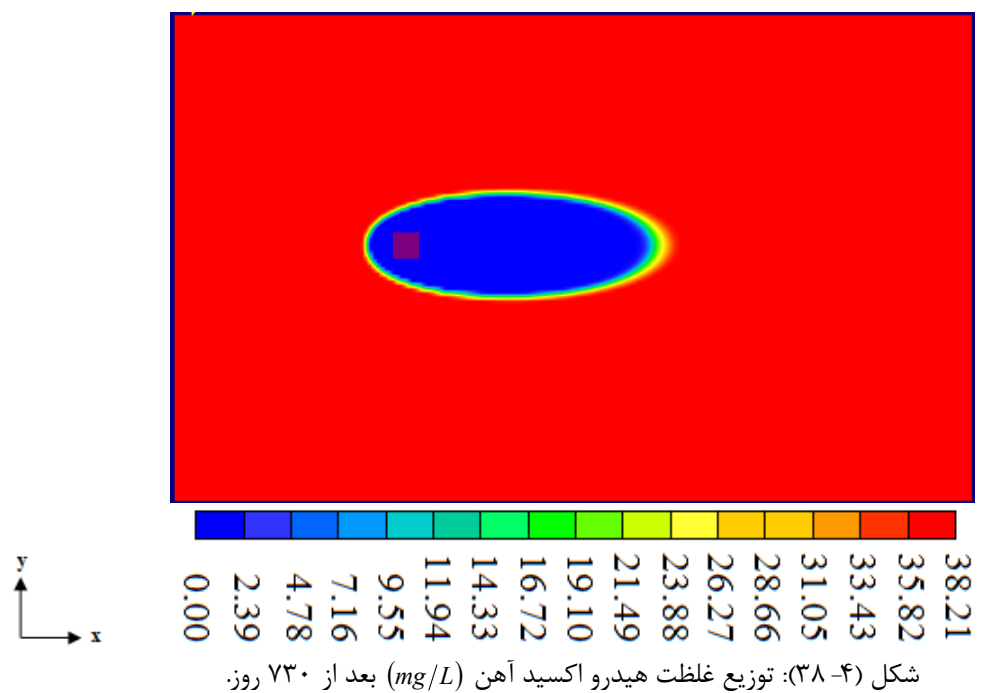
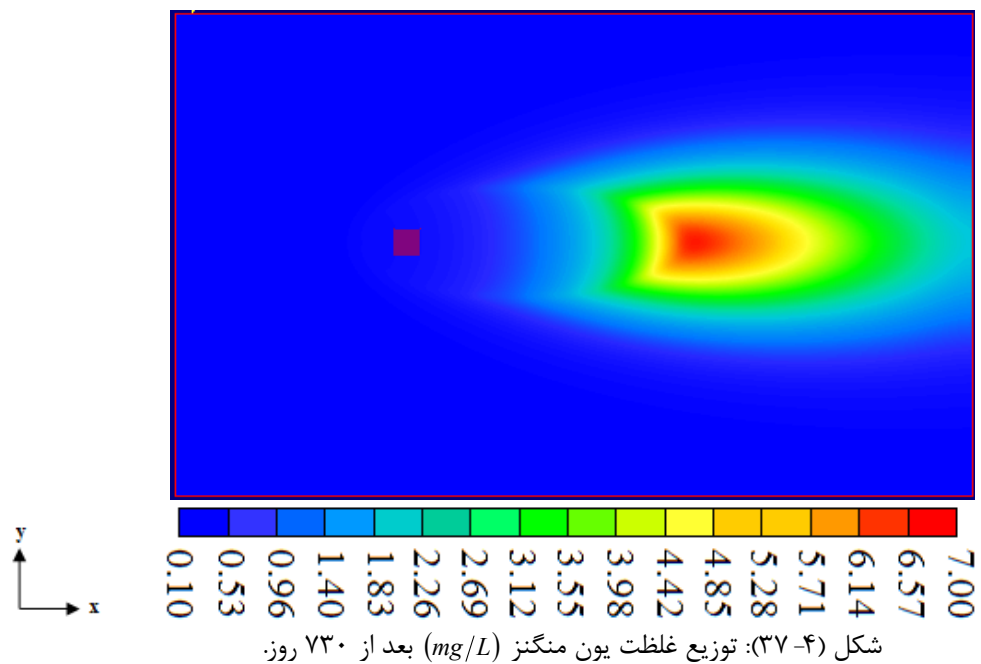
شکل (۴-۳۴): توزیع غلظت اکسیژن (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.

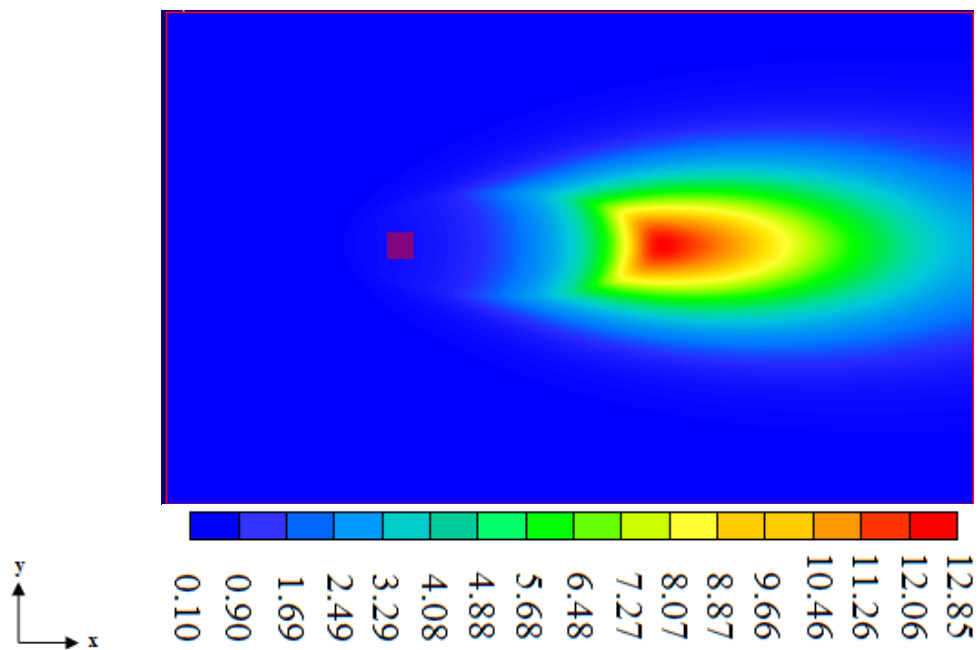


شکل (۴-۳۵): توزیع غلظت نیترات (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.

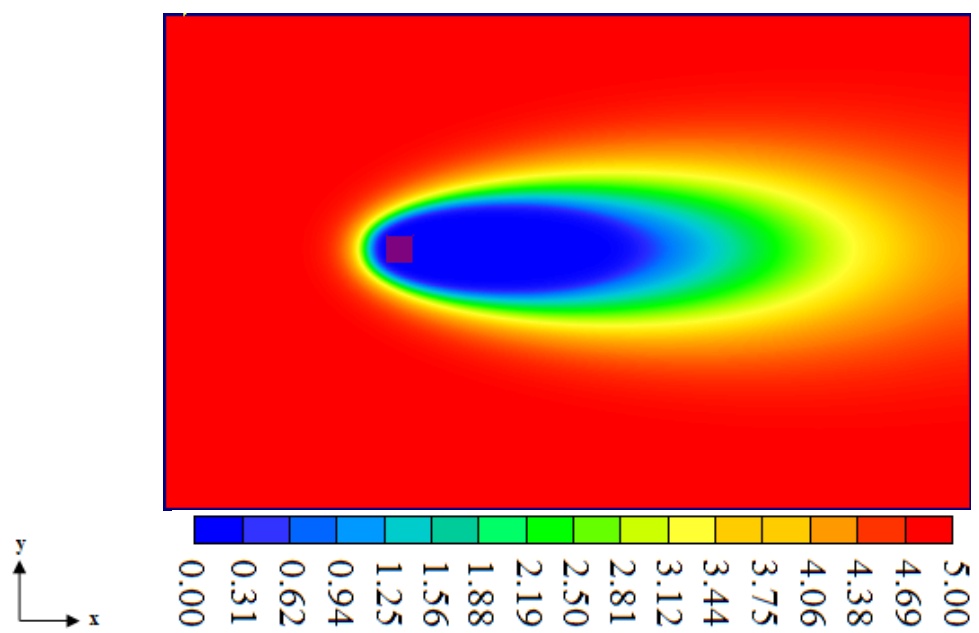


شکل (۴-۳۶): توزیع غلظت اکسید منگنز (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.

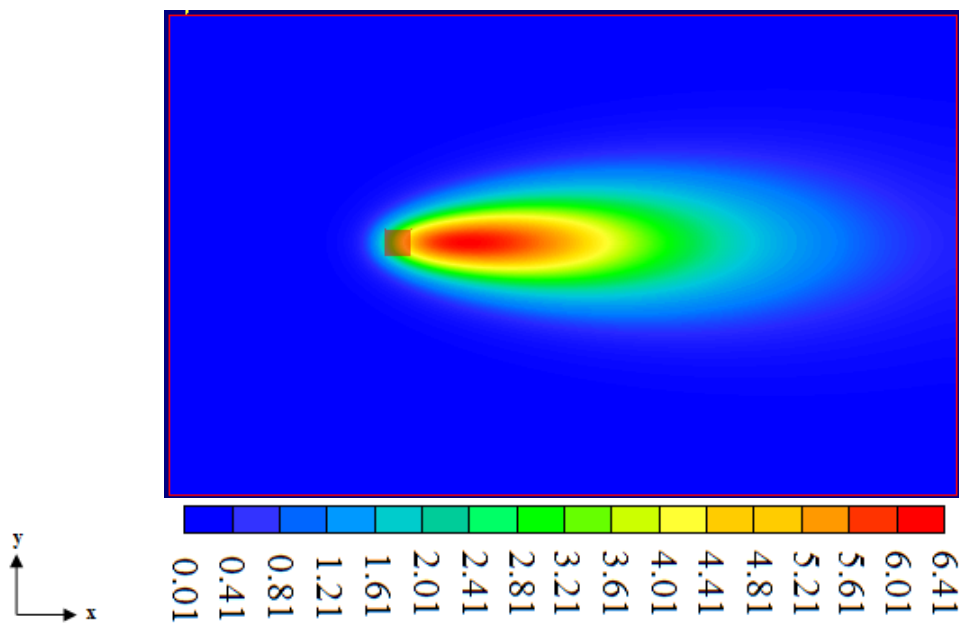




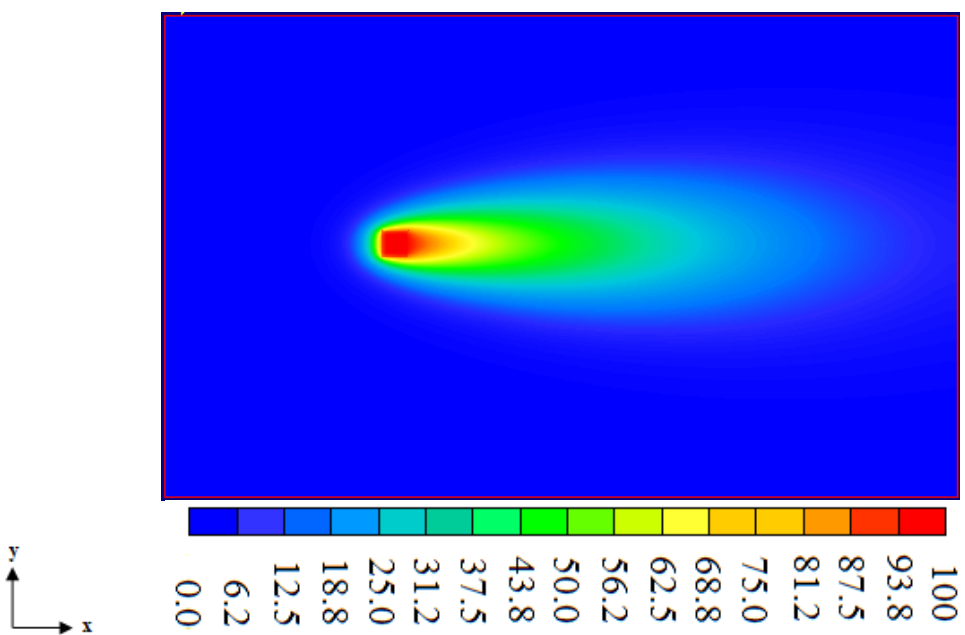
شکل (۴-۳۹): توزیع غلظت یون آهن (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.



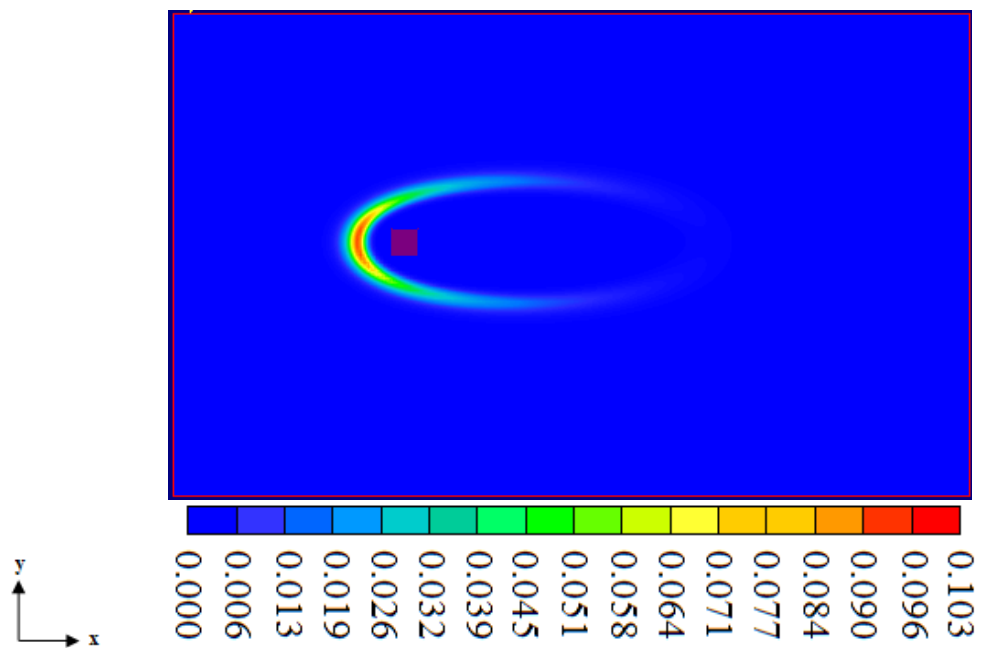
شکل (۴-۴۰): توزیع غلظت سولفات (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.



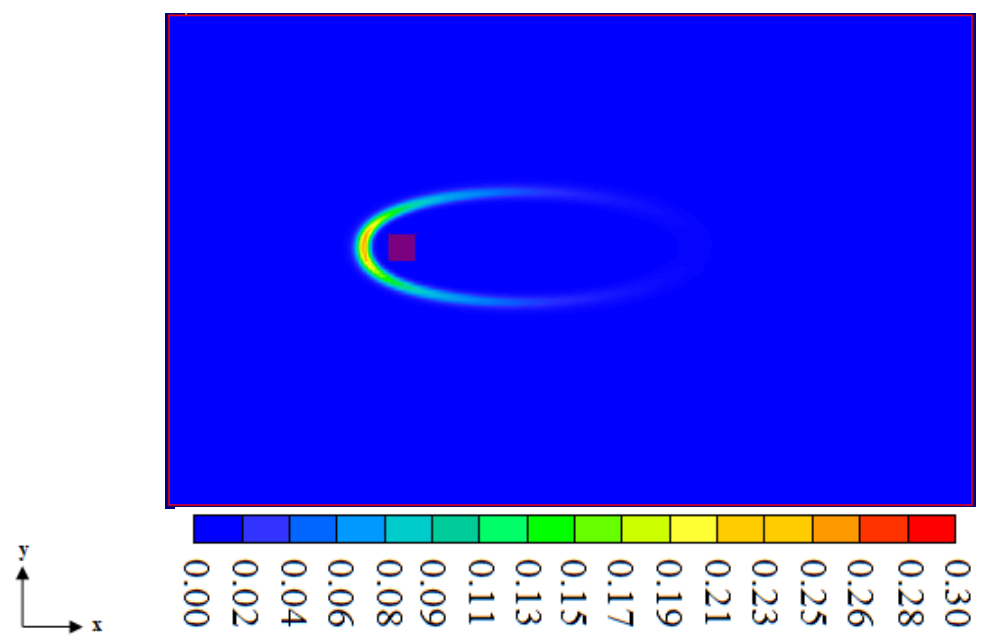
شکل (۴-۴۱): توزیع غلظت متان (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.



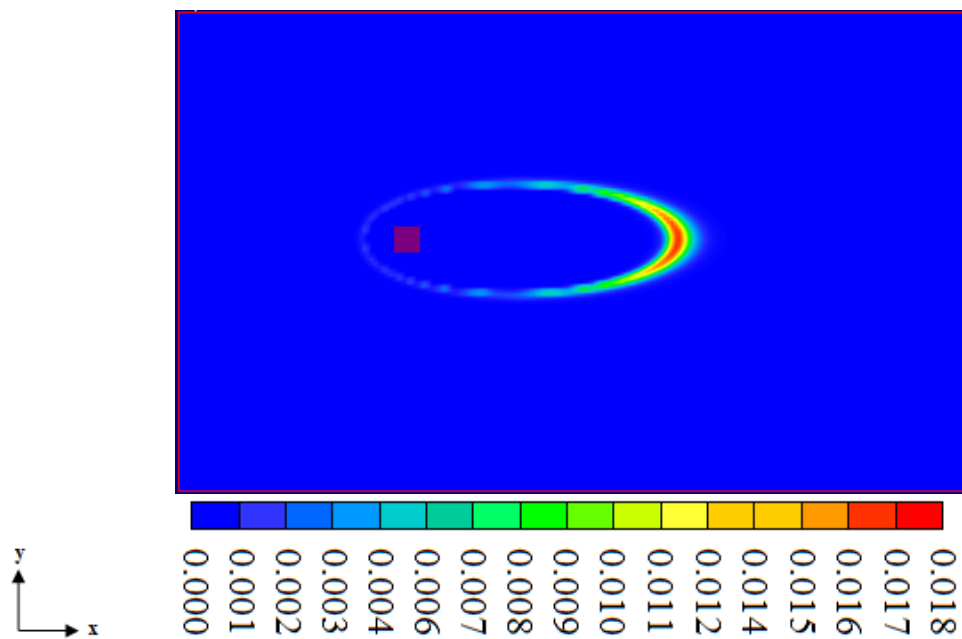
شکل (۴-۴۲): توزیع غلظت ماده ردیاب (mg/L) بعد از ۷۳۰ روز.



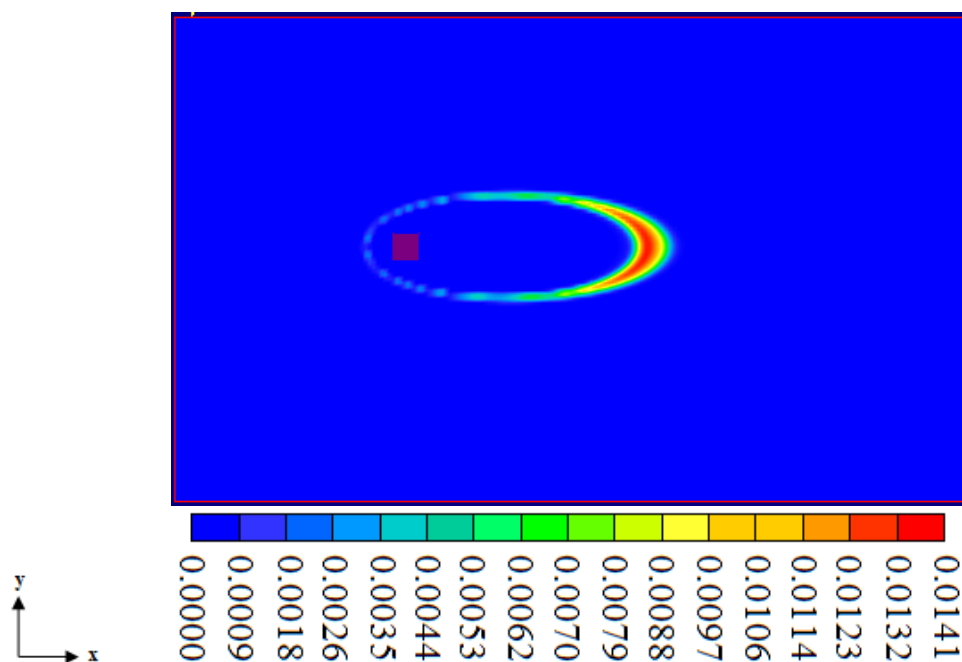
شکل (۴-۴۳): نرخ واکنش تجزیه هوازی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.



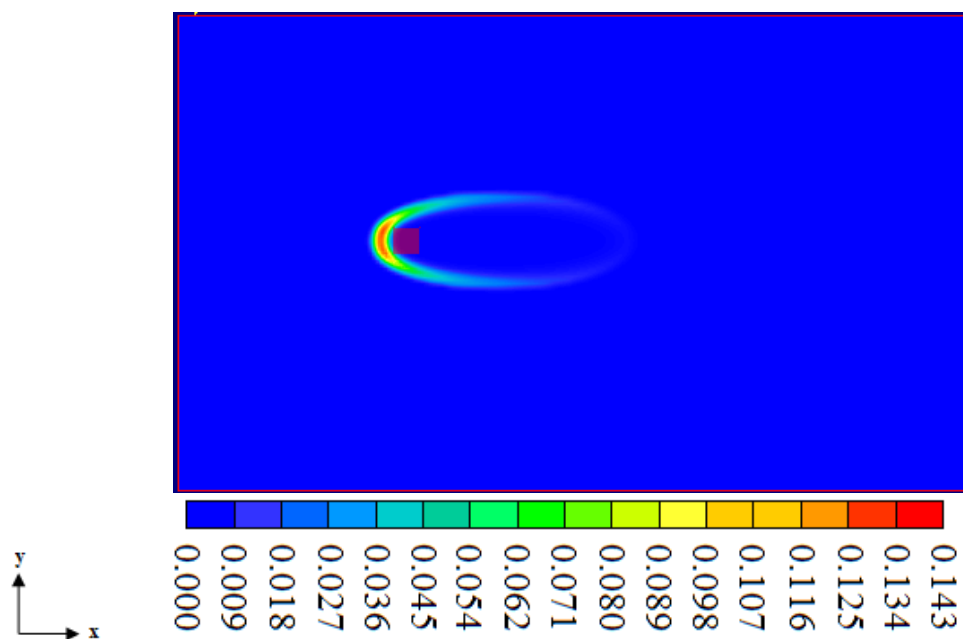
شکل (۴-۴۴): نرخ واکنش نیترات زدایی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.



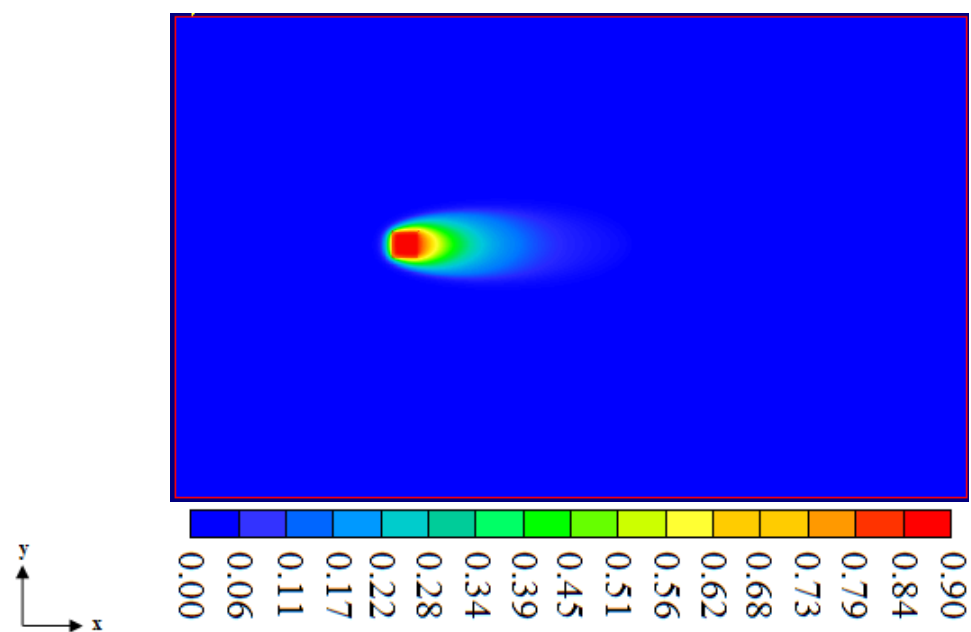
شکل (۴-۴۵): نرخ واکنش احیای منگنز (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.



شکل (۴-۴۶): نرخ واکنش احیای آهن (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.



شکل (۴-۴۷): نرخ واکنش احیای سولفات (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.



شکل (۴-۴۸): نرخ واکنش متان‌زایی (mg/Ld) بعد از ۷۳۰ روز.

نتایج مدل سازی دو بعدی نشان

می‌دهد که فرآیند تجزیه بیولوژیکی شبیه سازی شده، به طور آشکار مهاجرت پلوم متانال به سمت

پایین دست سیستم را محدود می‌کند. این موضوع می‌تواند به وسیله مقایسه ابعاد پلوم متانال با ابعاد

پلوم ردیاب استنباط شود. همچنین شکل ها نشان می دهند که در ناحیه پایین دست منبع آلودگی، الکترون گیرنده های محلول (O_2 ، NO_2 و SO_4^{2-}) به صورت زنجیره ای تهی می شوند. علاوه بر این، پلوم های محصولات واکنش Fe^{2+} ، Mn^{2+} و CH_4 نیز تشکیل شده و در جهت پایین دست منتقل می شوند. شکل پلوم Mn^{2+} و Fe^{2+} ناشی از انتقال آن ها توسط فرآیند پهنرفت است (شکل های ۴-۳۷ و ۴-۳۹). بنابراین در سیستم های احیای اکسید منگنز، هیدروکسیل آهن و متان زایی، جایی که محصولات واکنش مانند Fe^{2+} ، Mn^{2+} و CH_4 می توانند توسط فرآیند پهنرفت منتقل شوند، حضور این محصولات واکنش در یک محل ممکن است نشانه خوبی برای وضعیت فعالیت الکترون گیرنده ها در محل نباشد. برای حل این مشکل رول و همکاران (۲۰۰۸) پیشنهاد کردند که به جای غلظت گونه های واکنشی، نرخ واکنش های الکترون گیرنده های مختلف جهت بررسی الگوهای تکامل مناطق اکسیداسیون و احیا بکار برده شوند. مقادیر نسبی نرخ واکنش ها برای الکترون گیرنده های مشخص، سطح فعالیت فرآیند آن ها را در یک مکان و زمان معین نشان می دهند. استفاده مستقیم از این نرخ ها یک روش بهبود یافته برای محاسبه وسعت فضایی مناطق واکنشی مختلف است.

این مناطق اکسیداسیون و احیا یک الگو مشخصی را نشان می دهند که نتیجه سه نوع مشخص از فرآیندهای اختلاط تعیین شده در این تحقیق است: فرآیندهای حاشیه ای، هسته ای و شبه هسته ای. رول و همکاران (۲۰۰۸) فرآیندهای حاشیه ای را برای تعیین واکنش هایی که به اختلاط یک الکترون گیرنده و یک الکترون دهنده نیاز دارند (مثل تجزیه هوازی) بکار بردند. این واکنش توسط فرآیند پراکندگی که موجب اختلاط است، آسان می شود و عمدتاً در حاشیه پلوم آلاینده رخ می دهد. فرآیندهای هسته ای برای تعیین واکنش هایی که نیازی به اختلاط الکترون گیرنده و الکترون دهنده ندارند (به عنوان مثال، واکنش متان زایی) بکار برده می شوند. این واکنش ها در هسته پلوم بدون کمک هیچ مکانیزم انتقال فیزیکی رخ می دهند. در نهایت، عبارت فرآیندهای شبه هسته ای برای تعیین فرآیندهایی بکار می رود که در آن ها الکترون دهنده ها به کمک فرآیند پهنرفت با الکترون گیرنده های جامد (واکنش ها با اکسید منگنز و هیدروکسیل آهن) تماس یابند.

۴-۳-۴. حالت چهارم: حل تحلیلی انتقال واکنشی چندین آلاینده فرار در منطقه هوادار

در چهارمین حالت، برای ارزیابی

مدل عددی از داده ها و نتایج مدل تحلیلی یک بعدی ارائه شده توسط سان و همکاران برای انتقال واکنشی آلاینده های فرار در منطقه هوادار استفاده گردید (Sun et al., 2002).

در ابتدا یک مدل حجم های محدود یک بعدی با طول ۱۲۰ سانتی متر شامل ۲۴ حجم کنترلی با اندازه های مساوی در محیط نرم افزار PHOENICS ساخته شد. امتداد محور z به عنوان جهت جریان در نظر گرفته شد. شرط مرزی نوع اول یا دریکله با غلظت ثابت در ورودی مدل تعیین شد. مقدار غلظت اولیه صفر در هر سلول مدل و یک مقدار غلظت صفر در خروجی مدل در نظر گرفته شد. ۲۰ گام زمانی و تعداد ۱۰۰ تکرار برای شبیه سازی تعیین گردید. مدل برای مدت زمان ۲۰۰ روز اجرا شد (شکل های ۴-۴۹ تا ۴-۵۱). پارامترهای ورودی مدل در جدول (۴-۶) آورده شده است.

مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود توسط نرم افزار PHOENICS با نتایج به دست آمده توسط سان و همکاران حاکی از انطباق خوب آن ها است (شکل های ۴-۴۹ تا ۴-۵۱). بنابراین، مدل حاضر به طور قابل اعتمادی می تواند برای مدل سازی انتقال واکنشی آلاینده های فرار در منطقه هوادار به کار رود.

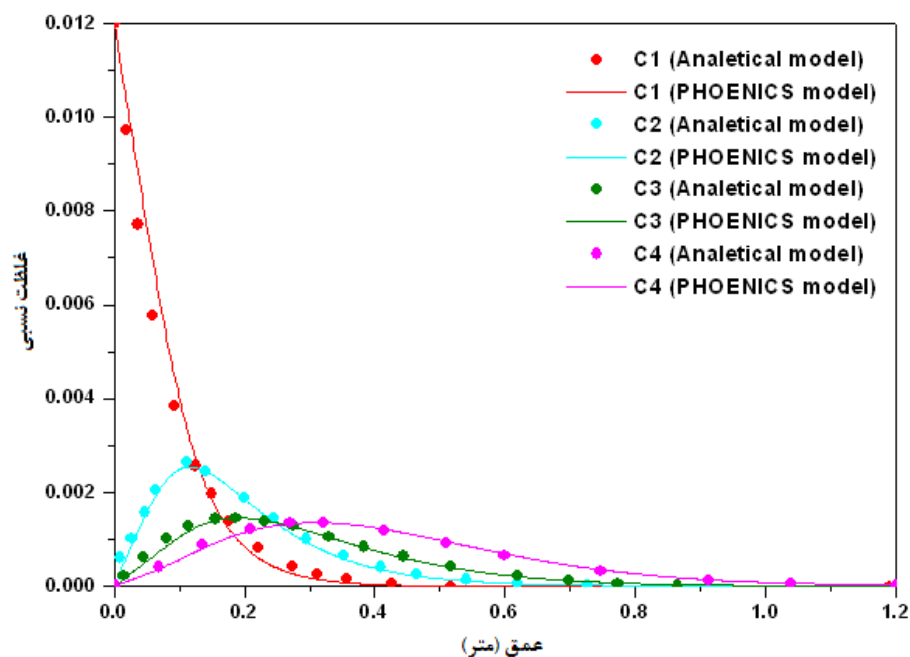
در این شبیه سازی انتقال چهار گونه واکنشی که به طور زنجیره ای به هم تبدیل می شوند در منطقه هوادار بررسی شد. شکل های (۴-۴۹) و (۴-۵۰) به ترتیب پروفیل های غلظت چهار گونه را در فازهای مایع و گاز نشان می دهد. هر دو شکل از نظر گرافیکی یکسانند اما مقادیر غلظت ها در آن ها متفاوت است. چون چهار گونه شبیه سازی شده فرار هستند، لذا مقادیر غلظت چهار گونه در فاز گاز بیشتر از غلظت های آن ها در فاز مایع است. نسبت غلظت یک گونه به غلظت گونه های دیگر در یک فاز به وسیله نرخ های واکنش مرتبه اول و عامل های بازده استوکیومتری کنترل می شود. در حالی که،

نسبت غلظت یک گونه در یک فاز به غلظت آن در فازهای دیگر توسط ضرایب جزءبندی تعیین

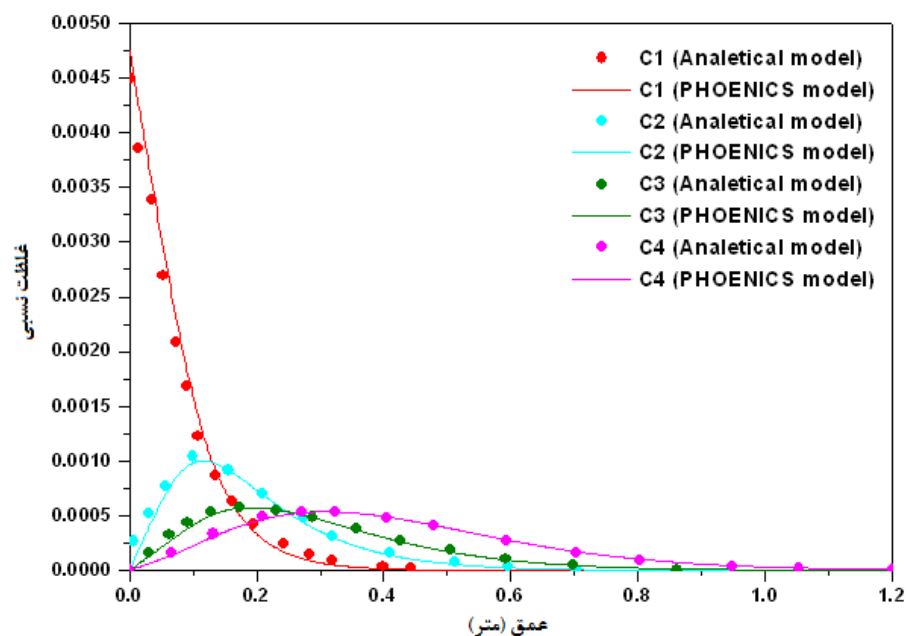
می‌شود (Sun et al., 2002).

جدول (۴-۶): پارامترهای ورودی مدل (Sun et al., 2002).

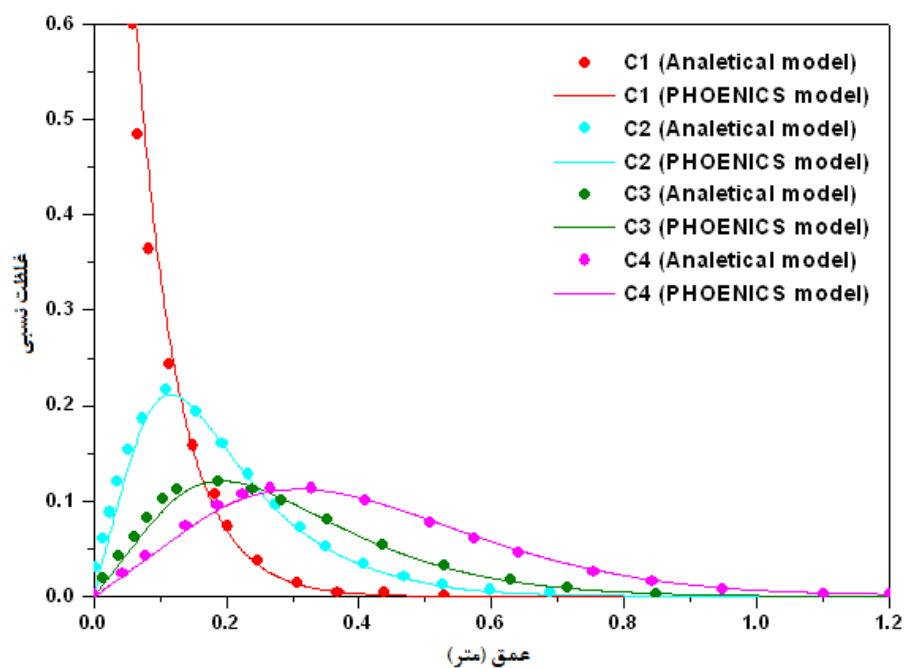
پارامتر	مقدار
تخلخل (θ)	$0.15 \text{ (cm}^3/\text{cm}^3\text{)}$
تخلخل هوادار (a)	$0.12 \text{ (cm}^3/\text{cm}^3\text{)}$
آب محتوا (θ)	$0.13 \text{ (cm}^3/\text{cm}^3\text{)}$
دانسیتة بلوک (ρ_b)	$1.35 \text{ (g/cm}^3\text{)}$
ضریب جزءبندی خاک-سیال (k_d)	$61/1 \text{ (cm}^3/\text{g}\text{)}$
ثابت قانون هنری (k_h)	0.397
نرخ واکنش مرتبه اول گونه ۱ (k_1)	0.05 (1/d)
نرخ واکنش مرتبه اول گونه ۲ (k_2)	0.03 (1/d)
نرخ واکنش مرتبه اول گونه ۳ (k_3)	0.02 (1/d)
نرخ واکنش مرتبه اول گونه ۴ (k_4)	0.0001 (1/d)
فاکتور حصول گونه ۲ از گونه ۱ (y_2)	0.79
فاکتور حصول گونه ۳ از گونه ۲ (y_3)	0.74
فاکتور حصول گونه ۴ از گونه ۳ (y_4)	0.64
ضریب نفوذ گازی (D_g)	$50.8 \text{ (cm}^2/\text{d}\text{)}$
ضریب نفوذ مایع (D_l)	$0.0155 \text{ (cm}^2/\text{d}\text{)}$
سرعت هوا (J_g)	0 (cm/d)
سرعت آب زیرزمینی (J_w)	10 (cm/d)



شکل (۴-۴۹): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) (Sun et al., 2002) برای پروفیل های غلظت چهار گونه در فاز مایع بعد از گذشت ۲۰۰ روز.



شکل (۴-۵۰): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) (Sun et al., 2002) برای پروفیل های غلظت چهار گونه در فاز گاز بعد از گذشت ۲۰۰ روز.



شکل (۴-۵۱): مقایسه نتایج مدل سازی حجم های محدود (خطوط) با نتایج به دست آمده توسط مدل تحلیلی سان و همکاران (نقاط) (Sun et al., 2002) برای پروفیل های غلظت کلی چهار گونه بعد از گذشت ۲۰۰ روز.

فصل پنجم

مطالعات صحرایی انجام شده در کل ناحیه صنعتی ری

۵-۱. مقدمه

آلودگی خاک و آب زیرزمینی به وسیله نفت در اطراف ناحیه صنعتی ری از سال ۱۳۴۹ مشخص گردید. این آلودگی زندگی جمعیت بومی را مستقیماً از سال ۱۳۵۹ متأثر ساخته است. پس از آن، اگر چه دولت ایران چندین اقدام در این زمینه انجام داد اما نتایج قابل ملاحظه‌ای مشاهده نشد و اثر آلودگی سال به سال افزایش یافت. به دلیل وسعت آلودگی و خطر جدی ناشی از آن، مطالعات بیشتری روی آلودگی آب زیرزمینی در سال ۱۳۷۶ آغاز گردید، با این حال این کار نیز بعد از مدتی متوقف شد.

از طرف دیگر، شرکت پالایش نفت تهران^۱ که در مرکز ناحیه صنعتی ری قرار گرفته در این خصوص در حد امکان مطالعاتی نظیر جمع‌آوری نمونه های آب از قنوات و چاهای آب در محدوده شرکت پالایش نفت تهران، نظارت روی نوسانات سطح آب زیرزمینی، پمپاژ آب زیرزمینی و غیره انجام داده است. با این حال، آلودگی زودتر از آن چه تصور می شد گسترش پیدا کرده و غیر از فعالیتهای بالا، به دلیل کمبود ماشین آلات و نبود برنامه مدیریت زیست محیطی مناسب، هیچ کار موثر دیگری برای کاهش و کنترل آلودگی انجام نشده بود.

^۱. Tehran Oil Refining Company (TORC)

بنابراین، آلودگی آب زیرزمینی در ناحیه صنعتی ری هر سال گسترش بیشتری یافت و این آلودگی مخصوصاً در سال های اخیر سبب شده تا زندگی مردم مقیم منطقه را با خطر جدی سلامتی همراه سازد.

لذا، تصمیم گیری برای انجام مطالعات زیست محیطی سیستماتیک با بکارگیری تکنیک های جدید و ماشین آلات به روز ضروری به نظر می رسید. بنابراین شرکت پالایش نفت تهران از مرکز تعاون نفت^۱ ژاپن برای حمایت از آماده سازی یک مطالعه امکان سنجی در سال ۱۳۸۱ تقاضا کرد. به دنبال این درخواست، مرکز تعاون نفت ژاپن مطالعه آلودگی خاک و آب زیرزمینی را در محدوده شرکت پالایش نفت تهران در فروردین ۱۳۸۲ آغاز کرد. این مرکز طرح مطالعه را بر اساس شرایط منطقه، تکنولوژی مطالعه و نمونه برداری از خاک و آب زیرزمینی آلوده به خاک تحت نظارت مرکز محیط زیست خاک^۲ طراحی کرد که معمولاً با مطالعات زیست محیطی مشابه انجام شده در ژاپن انطباق داشت. مطالعات مقدماتی در خرداد ۱۳۸۲ انجام شد. در این مطالعه برای مشخص کردن طیف و منبع آلودگی از اندازه گیری دانسیته گازهای آلی فرار، آنالیز محتوی نفت خاک، اندازه گیری ضخامت لایه نفت در چاه ها، آنالیز مولفه های نفت آلاینده و غیره استفاده شد.

علاوه بر این، شرکت پالایش نفت تهران با استفاده از روش مشابهی، بررسی کلی را در ۷ شرکت در ناحیه صنعتی ری، مجاور با سمت شرقی و در ایستگاه پمپاژ در سمت جنوبی شرکت پالایش نفت تهران در آذر ماه ۱۳۸۲ آغاز نمود. این بررسی ها در تیر ماه ۱۳۸۵ اتمام یافت و مشخص گردید که مقدار زیادی نفت (در حدود $43000 m^3$) در زمین های شرکت های مذکور وجود دارد. بعلاوه، تصور می شود که آلودگی در منطقه وسیعی گسترده شده است.

این آلودگی اثر قابل ملاحظه ای بر نواحی اطراف و محیط زیست خواهد داشت. بنابراین مطالعه و تعیین آلودگی باید در منطقه وسیع تری انجام گیرد. همچنین، یکسری اندازه گیری ها باید به منظور کاهش این آلودگی در شرکت پالایش نفت تهران و مناطق مجاور صورت گیرد.

¹. Japan Cooperation Center, Petroleum (JCCP)
Soil Environment Center Inc.²

بررسی های انجام شده در ناحیه صنعتی ری شامل دو مرحله زیر است:

- مرحله اول شامل اندازه گیری های آلودگی در داخل شرکت پالایش نفت تهران جایی که

بررسی شرایط کلی قبلا انجام شده و این بررسی شرایط آلودگی در ناحیه وسیع صنعتی ری

را نشان می دهد.

- مرحله دوم شامل اندازه گیری های آلودگی در داخل ناحیه وسیع صنعتی ری است.

روش قابل اجرای انتخاب شده جهت رفع آلودگی از آب زیرزمینی شامل پمپاژ مستقیم نفت و

آب حاوی نفت در محل تجمع آنها است.

۵-۲. مروری بر تاریخچه مطالعات انجام شده در کل ناحیه صنعتی ری

بررسی سایت شرکت پالایش نفت

تهران و ناحیه صنعتی شهر ری در سال ۱۳۸۲ شروع و در سال ۱۳۸۴ طبق برنامه ریزی های انجام

شده با شرکت پالایش نفت تهران انجام پذیرفت. در سال ۱۳۸۲ یک بررسی مقدماتی به صورت زیر در

سایت شرکت پالایش نفت تهران انجام پذیرفت:

- جمع آوری و بررسی داده ها و یادداشت های موجود در مورد آب زیرزمینی در سایت.

- گمانه زنی موقتی برای بررسی های تفصیلی.

- آنالیز نتایج بررسی ها.

در این بررسی، مواد آلاینده و منابع آلودگی از طریق پرسش از مردم، جمع آوری داده،

اندازه گیری های موقتی و مشاهده جریان آب زیرزمینی شناسایی شدند. همچنین، نمونه برداری و آنالیز

گاز خاک در صدها نقطه در سایت و اندازه گیری ضخامت نفت و محتوی نفت در داخل خاک صورت

پذیرفت. علاوه بر این، در تمام چاه ها برای تعیین کیفیت آب نمونه برداری انجام شد.

بر اساس نتایج بررسی های مقدماتی، دیاگرام شماتیک غلظت گاز خاک آلوده و نقشه جریان آب

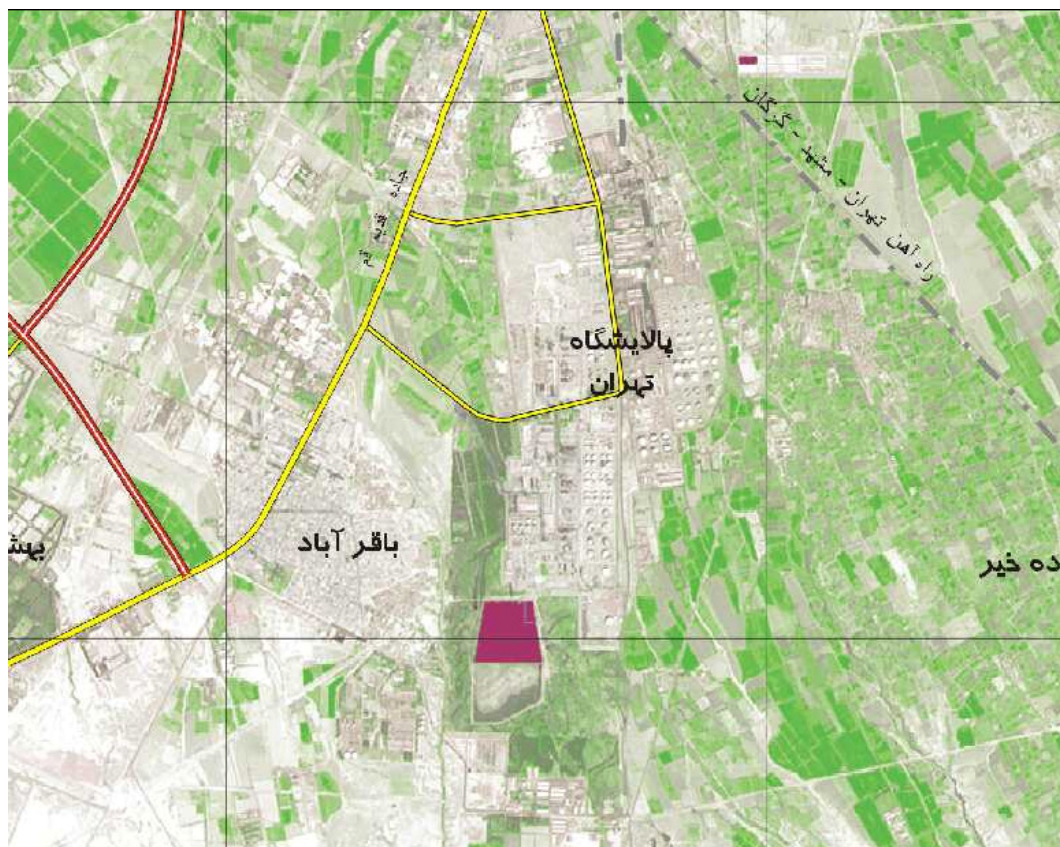
زیرزمینی برای ایجاد بانک اطلاعاتی مورد نیاز جهت بررسی تفصیلی در سال ۱۳۸۳ و بعد از آن تهیه

گردیدند. علاوه بر این، در این بررسی مقدماتی، گمانه زنی موقتی برای بررسی های تفصیلی بر اساس نتایج اندازه گیری ها و آنالیزهای اشاره شده در بالا انجام گرفت.

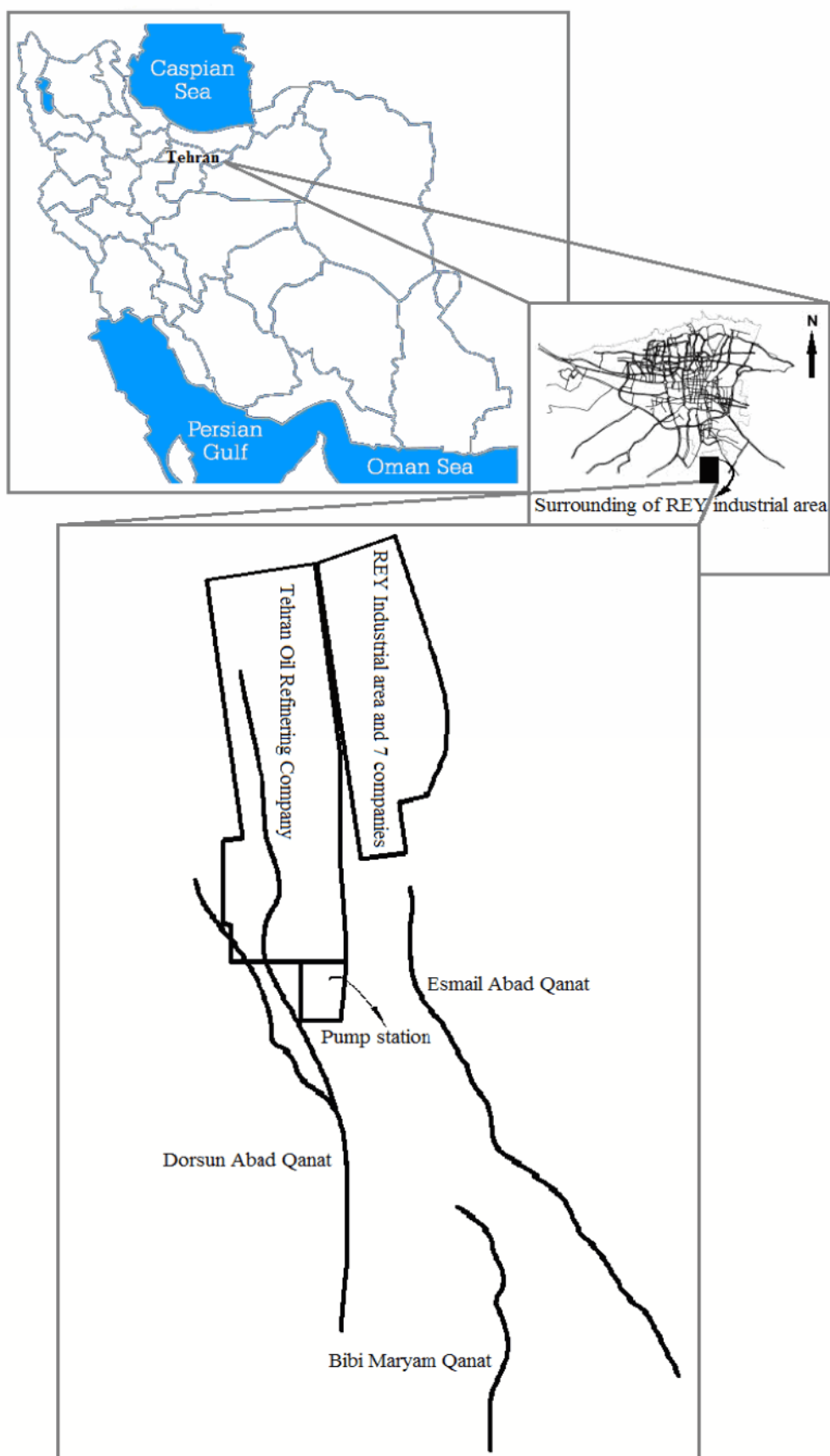
نتایج بررسی مقدماتی سایت نشان داد که آلودگی آب زیرزمینی وسیع تر از آن چه پیش بینی شده بوده و حتی در مناطق اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران نیز پخش شده است. همچنین، نتایج نشان می دهند که چندین منبع آلودگی در منطقه وجود دارد.

در سال ۱۳۸۳ و بعد از آن، بررسی های تفصیلی در چندین نقطه از سایت برای بررسی شرایط زمین شناسی در جهت عمق، شرایط آلودگی خاک و آب زیرزمینی و تهیه یک تصویر سه بعدی از ساختار زمین شناسی و آلودگی انجام گردید.

در ادامه فصل به مطالعات و بررسی های صحرایی انجام شده و نتایج حاصله از آن ها به طور خلاصه اشاره خواهد شد. ناحیه مورد مطالعه شامل سه بخش شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ است (شکل های ۱-۵ و ۲-۵).



شکل (۵-۱): نقشه اطراف ناحیه صنعتی ری (Idemitsu engineering Ltd, 2003).



شکل (۵-۲): موقعیت جغرافیایی منطقه مورد بررسی.

بر اساس نتایج بدست آمده از بررسی ها سعی می گردد به چهار گزینه زیر پاسخ داده شود:

۱. آلاینده ها از چه نوعی هستند؟

۲. منابع آلودگی کجا هستند؟

۳. آلودگی چگونه پخش و گسترده می شود؟

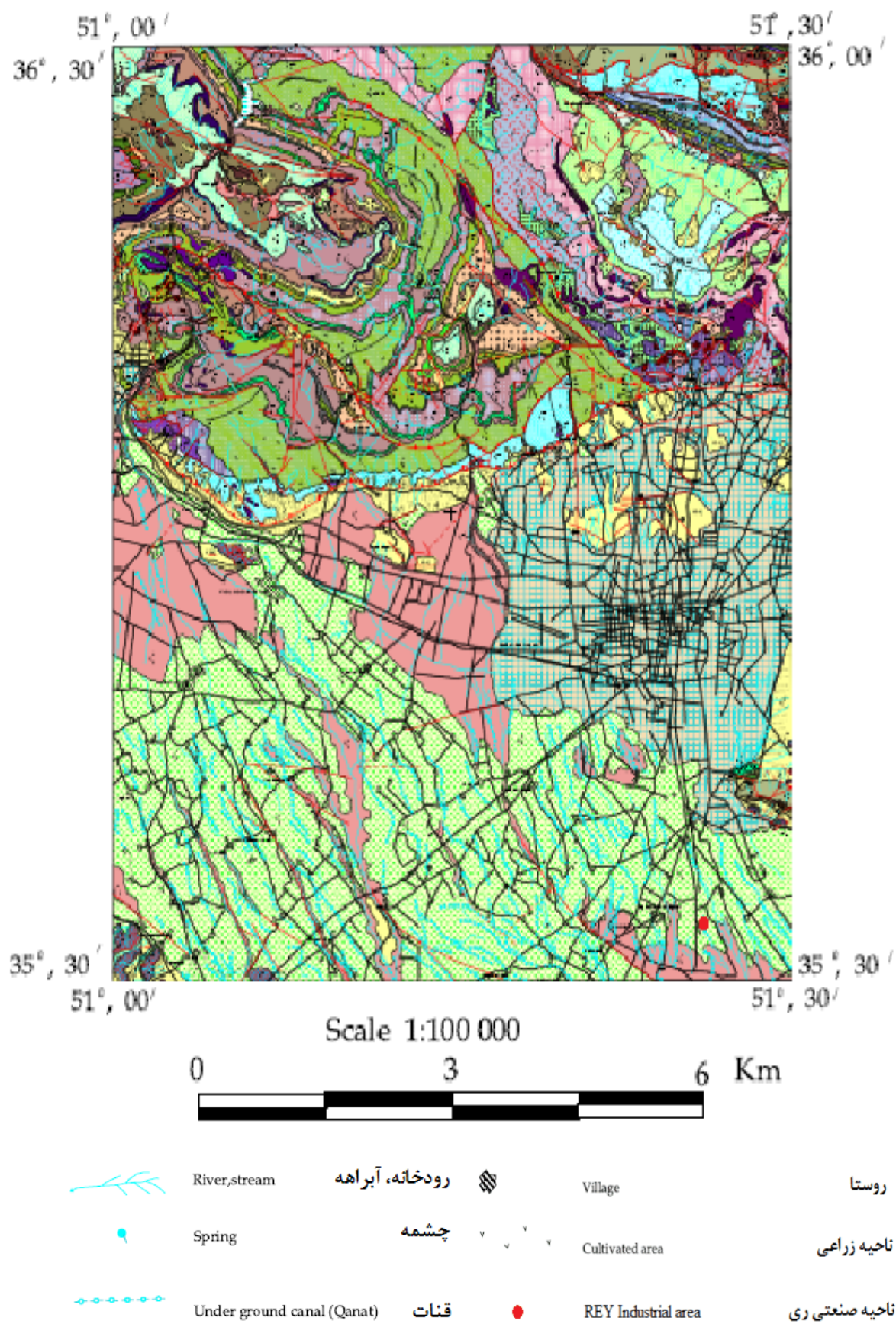
۴. مواد آلاینده چگونه حرکت می کنند؟

۵-۳. زمین شناسی و توپوگرافی

از نظر زمین شناسی، تقریباً تمام قسمت های اطراف شهر تهران شامل توف، آندزیت، آندزیت توفی شده و آگلومرا مربوط به دوره ائوسن است. قسمت شرقی شامل کنگلومرای دوره دوونین و سنگ های کربناته دوره مزوزوئیک است. قسمت جنوبی با توف و آندزیت مربوط به دوره ائوسن پوشیده شده است و نسبت به سطح دریا پایین تر است. ناحیه شهری تهران بر آبرفت های حاصل از فرسایش گسترده کوه های البرز قرار گرفته است (شکل ۵-۳).

وضعیت توپوگرافی در ناحیه شهری تهران شامل دو قسمت است: دشت و ناحیه کوهستانی. قسمت های شمالی ناحیه شهری تهران در منطقه کوهستانی قرار گرفته و به عنوان یک قسمت از رشته کوه های البرز با طولی معادل ۳۰۰ کیلومتر از شرق به غرب جایی که انواع عوارض چین خورده دیده می شود، قرار گرفته است. این ناحیه به وسیله آبرفت های قدیمی تر پوشیده شده اما آبرفت های جدید نیز به طور بخشی یافت می شوند.

توپوگرافی اطراف شرکت پالایش نفت تهران نشان می دهد که ارتفاع ناحیه به آهستگی از شمال به سمت جنوب کاهش می یابد و در جهت شرق به غرب به سختی شیب می گیرد. توپوگرافی محدوده شرکت پالایش نفت تهران در بازه کمتر از ۷ متر نوسان دارد و متوسط ارتفاع در آن تقریباً ۱۰۳۰ متر بالای سطح آب دریاها می باشد.



شکل (۵-۳): نقشه زمین‌شناسی منطقه مورد بررسی (www.gsi.ir).

در ناحیه صنعتی ری شامل شرکت پالایش نفت تهران دو گسل وجود دارد. یکی از آن‌ها در نزدیکی عظیم‌آباد قرار دارد که به سمت شاه‌ره‌آباد در غرب امتداد دارد. اما این گسل پیر است و در آن رس، لجن و رسوبات آبرفتی پر شده است.

در قسمت جنوب ناحیه ری، جنوب قلعه نو یک گسل با طول ۱۸/۵ کیلومتر از شرق به غرب امتداد دارد. این گسل نیز پیر است و فعالیتش متوقف شده است.

۴-۵. چینه‌شناسی

ساختار زمین در ارتباط با آلودگی خاک و آب زیرزمینی به وسیله نفت که در بررسی حاضر آشکار شده، در زیر لیست شده است. به علاوه، نمودارهای مقطع عرضی لایه‌بندی زمین‌شناسی در سه ناحیه شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ در شکل‌های ۵-۴ تا ۵-۱۱ نشان داده می‌شوند.

- سراسر ناحیه صنعتی ری تقریباً یک زمین یکنواخت از رس تا سیلت است.
- از نظر زمین‌شناسی، در ناحیه صنعتی ری حدود ۱۰ متر لایه رس و ۱ تا ۱۰ متر لایه سیلت وجود دارد. رسوبات دانه ریز آن‌ها منطقه وسیعی از زمین را پوشانده است.
- لایه‌های زمین‌شناسی تقریباً به شکل موازی یا کاملاً موازی با سطح زمین توزیع شده است.
- هیچ لایه‌بندی غیر قابل نفوذ که حضور آب زیرزمینی محدود را اثبات کند مشاهده نشد.
- ساختار زمین‌شناسی زمین‌های نزدیک ناحیه ایستگاه پمپاژ از نتایج مشاهدات مغزه‌ای تعیین شد (شکل ۵-۱۰ و ۵-۱۱). پیوستگی چینه‌ای به دلیل نبود داده‌های کافی از طریق گمانه‌ها مشخص نیست.
- رس و سیلت در اطراف ناحیه ایستگاه پمپاژ توزیع شده‌اند. چون اختلاف کوچکی بین رس و سیلت اطراف ایستگاه پمپاژ وجود دارد و آن‌ها مشخصات تقریباً مشابه‌ای را نشان می‌دهند، می‌توان نتیجه گرفت که تقریباً ساختار زمین‌شناسی یکسان و تقریباً همگنی وجود دارد.

- ضریب تراوایی زمین در سایت شرکت پالایش نفت تهران $2.14 \times 10^{-8} m/s$ و در ناحیه صنعتی ری $8.07 \times 10^{-8} m/s$ تعیین شده است.

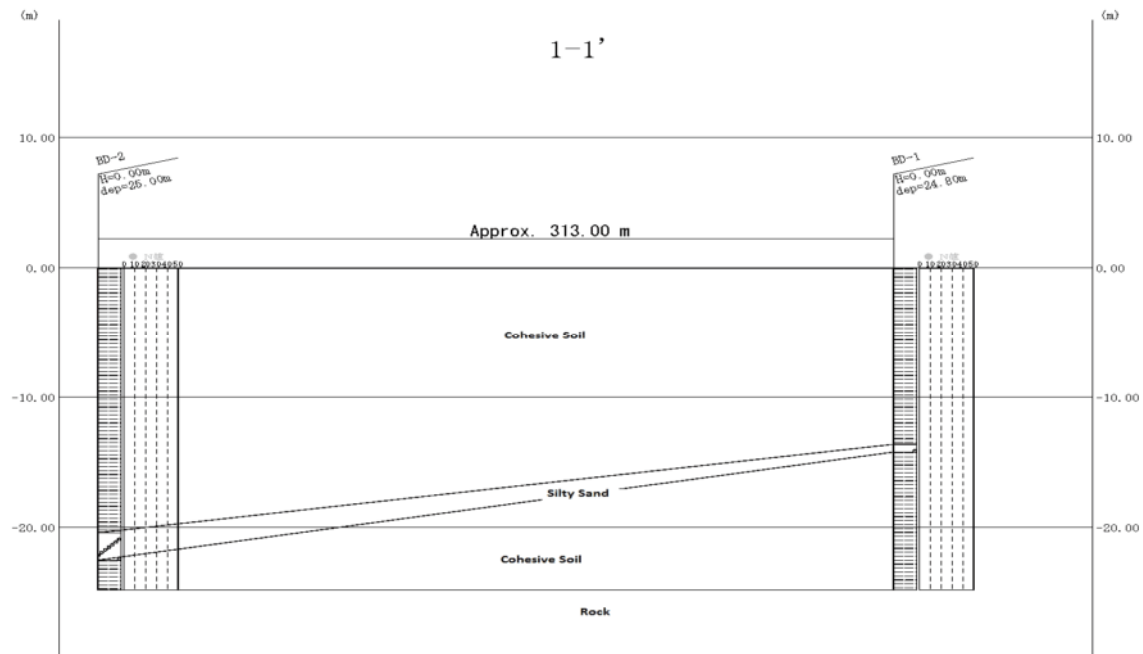
۵-۵. آب های زیرزمینی

در ناحیه ری، سفره آرتزین اندکی مشاهده شده اما سفره غیر آرتزین تقریباً در تمام قسمت های منطقه دیده می شود.

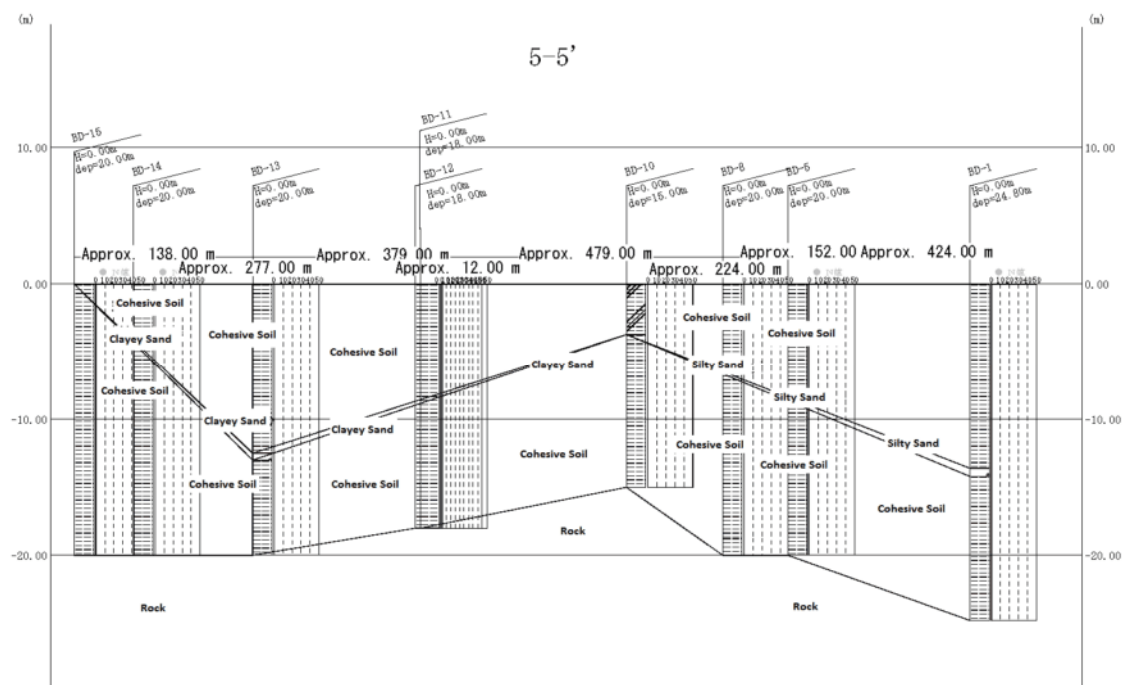
بر طبق مشاهدات و بررسی های انجام شده توسط پژوهشگاه صنعت نفت، در چاه های نظارتی مشخص گردید که مصرف آب در اوایل بهار در هر سال پایین و سطح آب زیرزمینی بالا است. این در حالی است که در اوایل پائیز به دلیل بالا رفتن مصرف آب سطح آب زیرزمینی پایین است. نتایج بررسی های گمانه زنی انجام شده توسط پژوهشگاه صنعت نفت در ناحیه تهران نشان داده اند که عمق سطح آب زیرزمینی در بخش شمالی اغلب ۱۵۰ متر اما در بخش جنوبی فقط ۳ متر است.



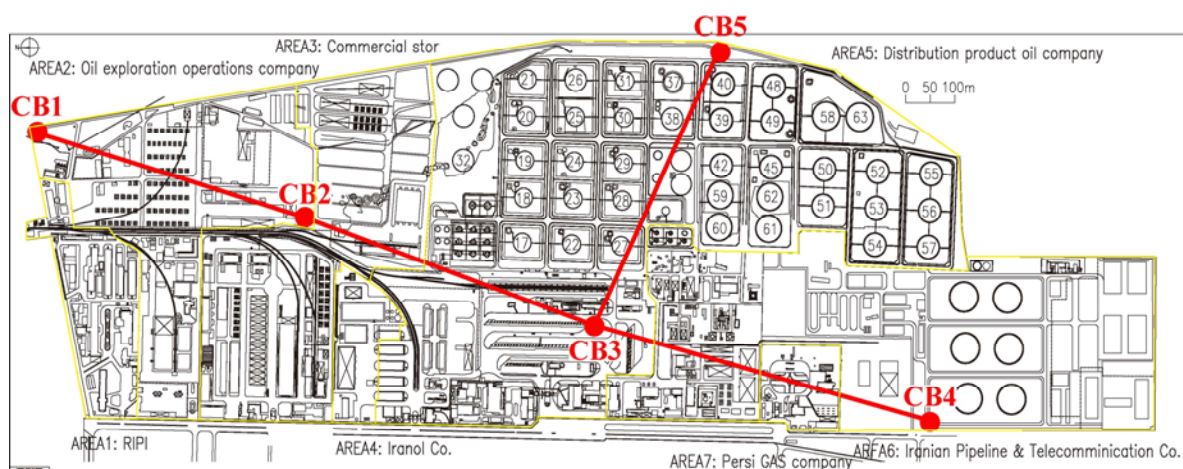
شکل (۵-۴): موقعیت پروفیل های خاک موجود برای بررسی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (Idemitsu engineering Ltd, 2003)



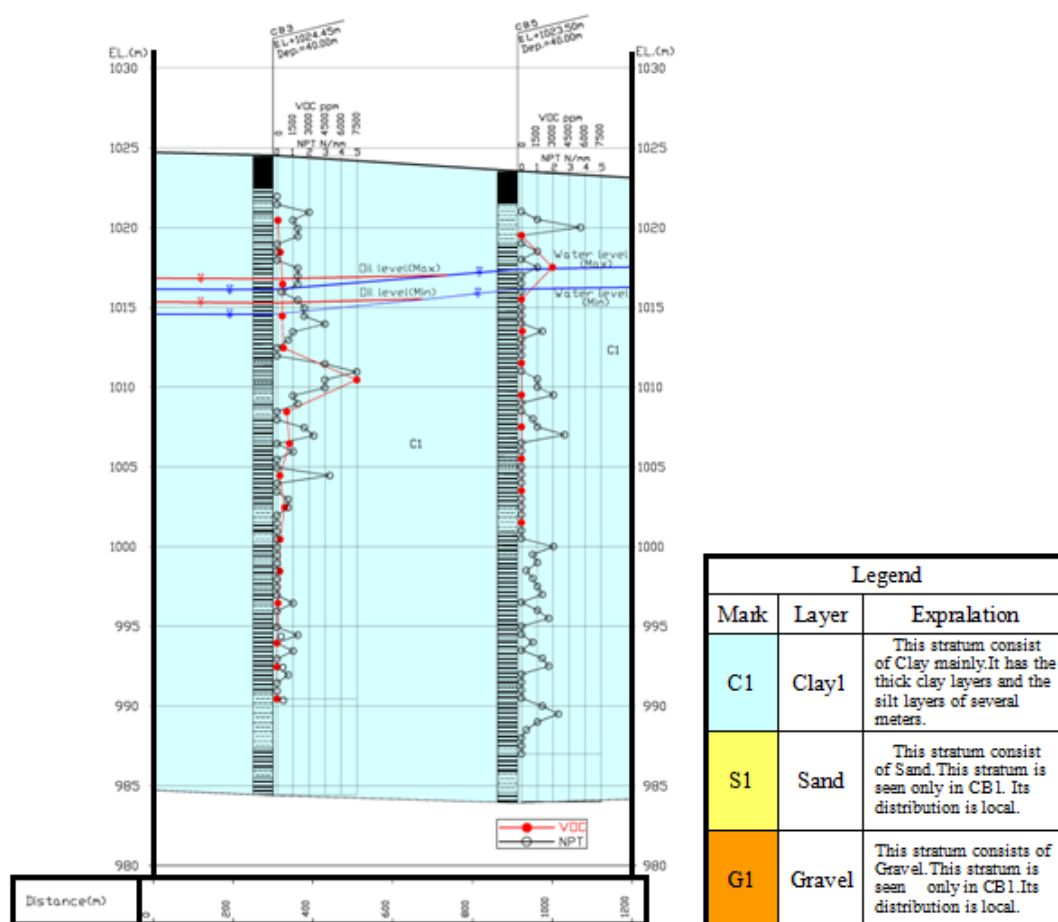
شکل (۵-۵): پروفیل خاک 1-1' (Idemitsu engineering Ltd, 2003).



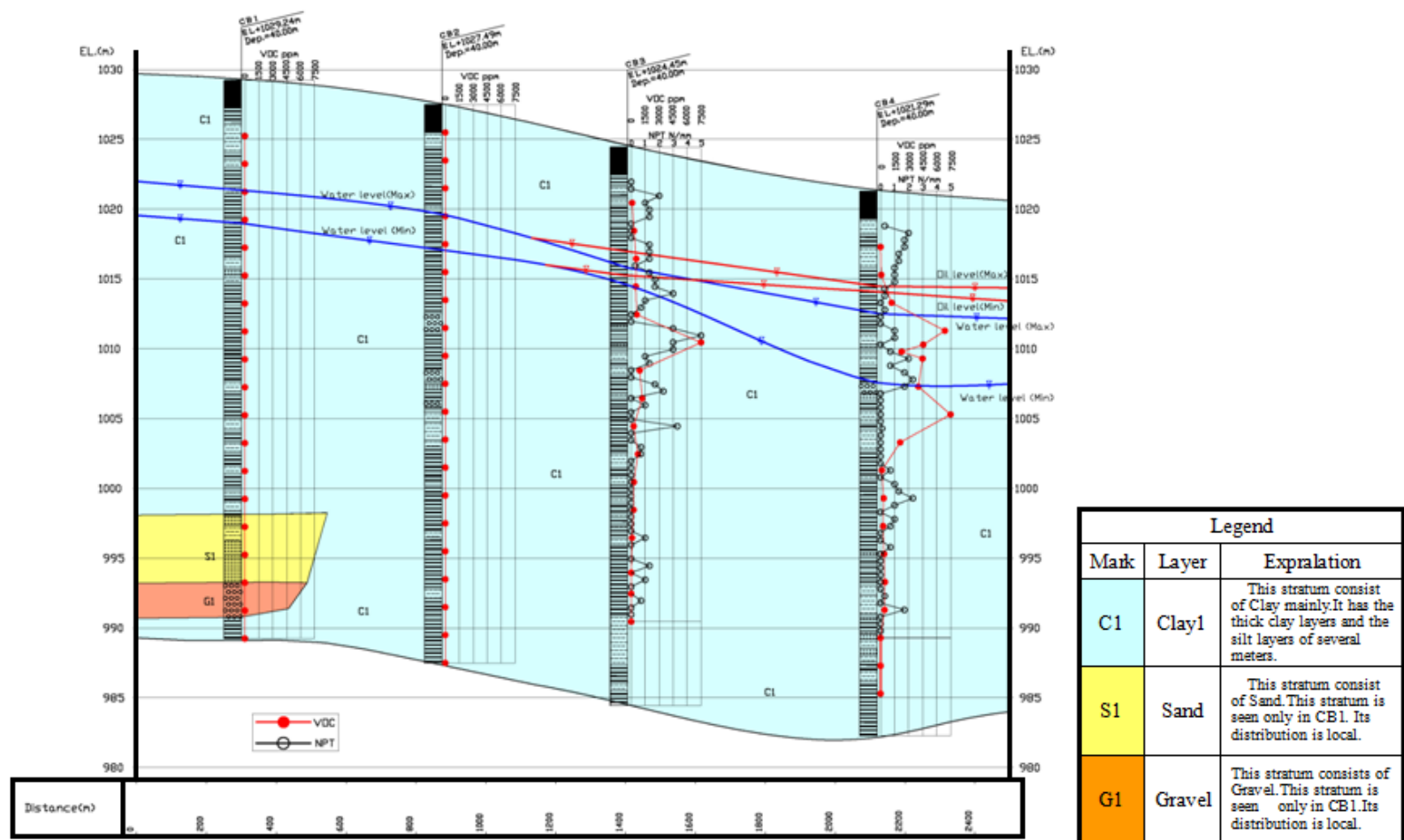
شکل (۵-۶): پروفیل خاک 5-5' (Idemitsu engineering Ltd, 2003).



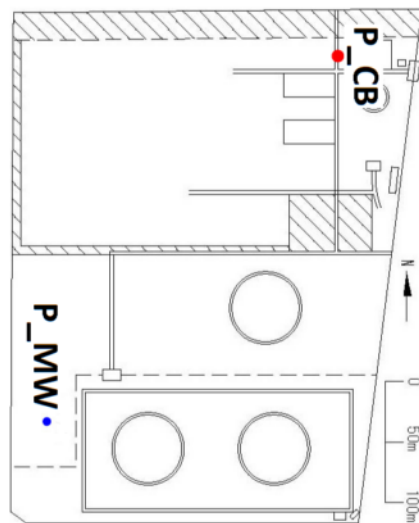
شکل (۵-۷): نقشه موقعیت پروفیل‌های زمین‌شناسی در ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



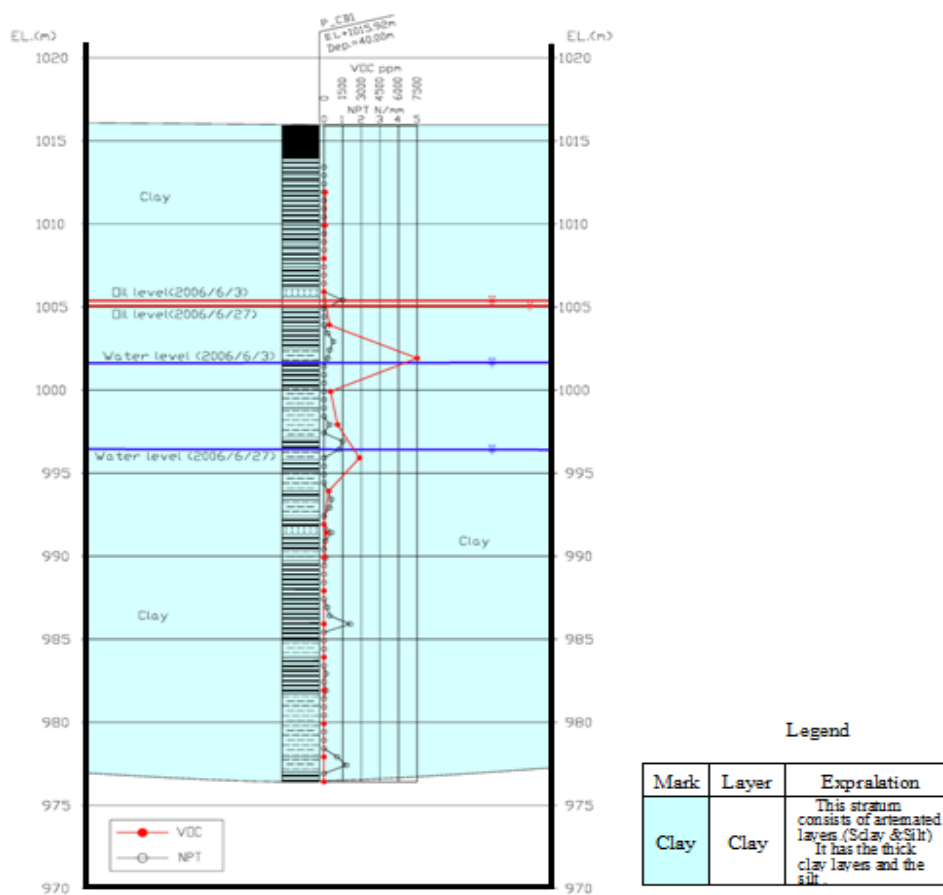
شکل (۵-۸): پروفیل زمین‌شناسی CB3 – CB5 در ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۹): پروفیل زمین‌شناسی $CB1 - CB4$ در ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

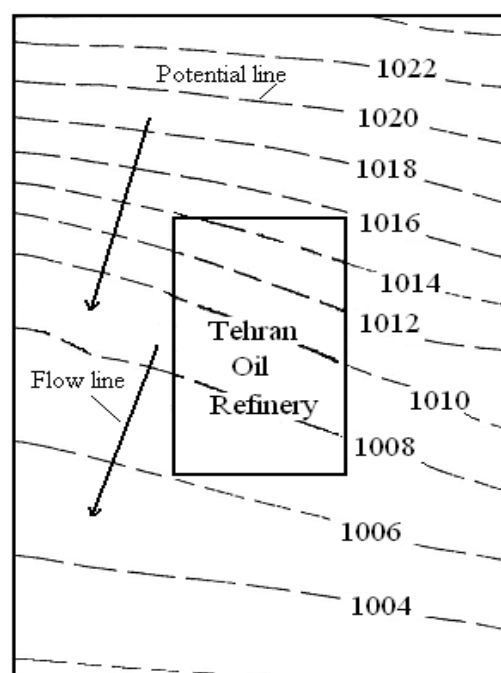


شکل (۵-۱۰): موقعیت گمانه حفاری P_CB در ناحیه ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۱۱): پروفیل زمین‌شناسی در محل گمانه حفاری P_CB ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

بررسی آب زیرزمینی انجام شده توسط پژوهشگاه صنعت نفت در اطراف شرکت پالایش نفت تهران نشان می دهد که سطح آب زیرزمینی از سمت شمال - شمال شرق به سمت جنوب - جنوب غرب شیب ملایمی پیدا کرده و توزیع آب زیرزمینی اندکی از توپوگرافی منطقه متفاوت است (شکل ۵-۱۲). این شکل نشان می دهد که سطح آب زیرزمینی در محدوده ۱۷ تا ۲۱ متر تغییر می کند.



شکل (۵-۱۲): نقشه سطح آب زیرزمینی اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران (اصلاح شده از Idemitsu engineering Ltd, 2005).

بر طبق داده های گمانه زنی در زمان ساخت و اصلاح شرکت پالایش نفت تهران ، لایه های زمین شناسی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران از سمت شرق به غرب و از شمال به جنوب تقریباً هموژن هستند و تقریباً تمام آن ها شامل خاک های رسی هموژن با اندکی محتوی سیلت ماسه ای می باشند.

۵-۶. سیستم های تأمین آب در ناحیه سایت شرکت پالایش نفت تهران و نواحی

مجاور آن

۵-۶-۱. قنات

قنوات زیادی در ناحیه صنعتی ری بویژه سایت شرکت پالایش نفت تهران وجود دارد و ۷ قنات زیر در ناحیه مجاور سایت این شرکت یافت شدند (شکل ۵-۱۳):

۱. قنات درسان آباد؛

۲. قنات مفتان؛

۳. قنات بی بی مریم؛

۴. قنوات کوچک و بزرگ قمصر؛

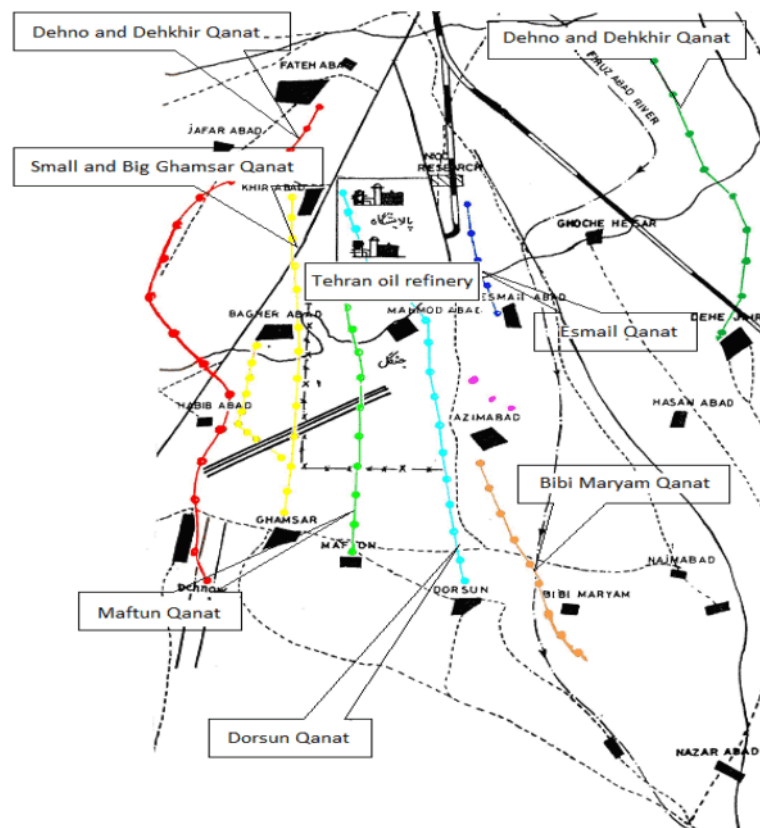
۵. قنات اسماعیل آباد؛

۶. قنات عظیم؛

۷. قنوات دهنو و ده خیر.

۵-۶-۲. چاه‌های آب

چاه‌های آب در ۷ نقطه در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران و ۳ نقطه خارج از آن وجود دارند که در گذشته به عنوان ذخیره آب استفاده می‌شدند. در حال حاضر، این چاه‌ها به دلیل آلودگی آب زیرزمینی به مواد نفتی در سال‌های اخیر فقط برای آبیاری گیاهان استفاده می‌شوند. برخی از این چاه‌ها به دلیل افزایش آلودگی دیگر مورد استفاده قرار نمی‌گیرند.



شکل (۵-۱۳): موقعیت قنات‌های اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران (Idemitsu engineering Ltd, 2005).

۵-۶-۳. چاه‌های حفاظت الکترولیتی

در سایت شرکت پالایش نفت تهران، ۵۰ چاه وجود دارد که برای حفاظت الکترولیتی تأسیسات در هر یک از آن‌ها یک قطب مثبت نصب شده است. تقریباً تمام این چاه‌ها به مواد نفتی آلوده شده‌اند.

۵-۷. بررسی آلودگی آب در خارج سایت شرکت پالایش نفت تهران

تحقیق و پرسش از ساکنین محل در مرحله بررسی مقدماتی آشکار ساخت که آلودگی خاک و آب زیرزمینی به واسطه نفت در ناحیه مورد نظر به حدود سی سال قبل بر می‌گردد. مسأله آلودگی نفت که به وسیله جریان آب آلوده به نفت از طریق قنات موجود در سایت شرکت پالایش نفت تهران به روستاهای مجاور سرایت کرده است، برای اولین بار توسط روستائیان مشخص شد.

جایی که آلودگی نفت رخ داده است هنوز دقیقاً مشخص نیست، اما نشت از طریق خطوط لوله زیرزمینی که چندین بار در آن زمان بررسی شده می‌تواند به عنوان یکی از منابع آلودگی آب زیرزمینی در نظر گرفته شود.

همان‌طور که اشاره شد، قنوات زیادی در ناحیه مورد نظر قبل از تأسیس شرکت پالایش نفت تهران ایجاد شده بود. نشت مواد نفتی به داخل آن‌ها می‌تواند یک عامل مهم انتشار آلودگی باشد. طبق بررسی‌ها و نمونه‌برداری‌های انجام شده از قنوات و چاه‌های آب مشخص گردید که آلودگی نفت در تمام چاه‌های آب روستاهای مجاور شرکت پالایش نفت تهران وجود دارد و این چاه‌ها دیگر قابل استفاده نمی‌باشند.

۵-۷-۱. آلودگی در قنات

۵-۷-۱-۱. قنات در سان آباد

نتایج اصلی تجزیه نمونه‌ها به صورت زیر بیان می‌شوند:

- چاه‌های بعد از چاه شماره ۴۰ در خارج از محدوده باتری شرکت پالایش نفت تهران قرار دارند.
- تجزیه داده‌ها در چاه شماره ۴۰ نشان می‌دهد که آب حاوی $7/5 \text{ mg/l}$ فنل، $24 \text{ } \mu\text{g/l}$ هیدروکربن‌های چند حلقه‌ای آروماتیک و $0/8 \text{ mg/l}$ هیدروکربن‌های آروماتیک است.
- غلظت اسید نیتره بالا است.
- غلظت فنل در مادر چاه و چاه شماره ۸۵ به ترتیب $0/5 \text{ } \mu\text{g/l}$ و $85 \text{ } \mu\text{g/l}$ است.
- غلظت هیدروکربن‌های چند حلقه‌ای آروماتیک در سر چاه و چاه شماره ۸۵ به ترتیب $0/05 \text{ mg/l}$ و $1/8 \text{ mg/l}$ است.

۵-۷-۱-۲. قنات کوچک و بزرگ قمصر

نتایج اصلی تجزیه نمونه های آب این قنات به صورت زیر ارائه می شوند:

- غلظت هیدروکربن کل در سر چاه $6/5 \text{ mg/l}$ است که در آن، بخش هیدروکربن چند حلقه ای آروماتیک $0/15 \text{ mg/l}$ و فنل $0/8 \text{ mg/l}$ است.
- نشت نفت در نزدیک محل تقاطع خط لوله و قنات در سال ۱۳۷۴ و قبل از آن گزارش شده است. نتایج تجزیه در آن زمان فقط حضور گازوئیل، نفت سفید^۱ و نفت سبک^۲ در آب را اثبات کرد.
- بر طبق گزارش مربوط به سال ۱۳۷۸، مقدار آلودگی در مقایسه با مقدار آن در زمان نشت نفت از خط لوله در سال ۱۳۷۴ کاهش یافته است. دلیل کاهش آلودگی را به تعمیر خط لوله نسبت داده اند. البته بطور یقین به دلیل عدم موجود بودن داده های کافی نمی توان دقیقاً کاهش آلودگی مذکور را توجیه نمود.
- در چاه های قنات منطقه فلزات سنگین در نمونه های آب کشف شدند که به نظر می رسد که از زهکشی فاضلاب های صنعتی مربوط به نیروگاه برق و کارخانه های روکش کاری فلزات در ناحیه ری ناشی شده اند.

۵-۷-۱-۵. قنات بی بی مریم

نتایج اصلی تجزیه این قنات به قرار زیر است:

- در این قنات در مقایسه با سایر قنات، مقدار آلودگی با نفت بسیار پائین می باشد.
- آلودگی آب این قنات را به خرابی در سیستم استخراج تبخیر شماره ۴ نسبت می دهند.

¹ Kerosene.

² Light oil.

۵-۷-۱-۴. قنات دهنو

نتایج اصلی تجزیه آب این قنات به صورت زیر است:

- در مقایسه با نتایج بررسی انجام شده در سال ۱۳۷۴ ، سطح آلودگی آب این قنات کاهش یافته است که تصور می شود نتیجه تعمیر خط لوله باشد.
- مقدار اندکی فنل در آب این قنات کشف شد.

۵-۷-۱-۵. قنات ده خیر

نتایج تجزیه آب این قنات نشان داد که با افزایش فاصله از یک تأسیسات حمل نفت در نزدیک قنات، غلظت نفت کاهش یافت. اما هیچ منبع آلودگی کشف نشد.

۵-۷-۱-۶. قنات مفتان

با تجزیه آب این قنات نتایجی به شرح ذیل به دست آمد:

- این قنات در چندین محل خسارت دیده است.
- آلودگی ی آب در این قنات را به یک استخر تبخیر در قسمت جنوبی سایت شرکت پالایش نفت تهران یا کارخانه های مجاور نسبت داده اند.

۵-۷-۱-۷. قنات عظیم آباد

این قنات در بین سال های ۱۳۷۶ و ۱۳۷۷ بررسی شده است. در این بررسی نتایج زیر به دست آمد:

- مقدار آلودگی آب در آن زمان نسبتا افزایش یافته بود.
- فنل و هیدروکربن های چندحلقه ای آروماتیک در آب این قنات کشف شدند.

۵-۷-۲. چاه‌های آب

تعدادی چاه آب برای آبیاری در اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران وجود دارند که تقریباً تمام آن‌ها با نفت آلوده شده‌اند.

۵-۸. بررسی آلودگی آب در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران

تأسیسات زیرزمینی موجود در سایت شرکت پالایش نفت تهران عبارتند از قنات درسان آباد، چاه‌های پمپاژ آب برای آبیاری و چاه‌های حفاظت الکترولیتی. تمام این تأسیسات از لحاظ آلودگی آب مورد بررسی قرار گرفتند (Idemitsu engineering Ltd, 2003).

۵-۸-۱. قنات درسان آباد

این قنات از شمال به جنوب در منطقه میانی سایت می‌گذرد و مادر چاه آن نزدیک واحد مشعل^۱ شمالی شرکت پالایش نفت تهران قرار دارد. چاه‌های شماره ۱ تا ۳۹ آن در محدوده باتری شرکت پالایش نفت تهران قرار گرفته‌اند. گزارش شد ه است که در چاه شماره ۲۴ تقریباً ۱۸ میلیون کیلو لیتر نفت در فاصله زمانی فروردین ۱۳۷۴ تا شهریور ۱۳۷۶ انتقال یافته شده است.

نتایج تجزیه نمونه‌های آب آلوده و مواد آلاینده در چاه‌های این قنات به صورت زیر بیان می‌گردد:

- مقدار آلودگی در شرکت پالایش نفت تهران جنوبی بیشتر از شرکت پالایش نفت تهران شمالی است.
- در چاه شماره ۲۴ این قنات، گازوئیل، نفت سفید و گاز - نفت کشف شد.
- مقدار آلودگی آب در مادر چاه و چاه شماره ۶ نسبتاً پایین است.

¹ Flare.

- نتایج تجزیه آب زیرزمینی در این قنات، غلظت نفت را در محدوده mg/l ۰/۰۵ تا mg/l ۱۳۴۰ نشان دادند.
- چاه‌های شماره ۸، ۹، ۲۲، ۲۴، ۲۵، ۲۸ و ۳۶ این قنات آلوده شده‌اند. چاه شماره ۲۴ آن بالاترین سطح آلودگی آب را نشان داده است.

۵-۸-۲. چاه‌های آب برای آبیاری

چاه های آب مربوط به آبیاری درختان در ۱۰ نقطه سایت قرار گرفته‌اند. در میان این چاه‌ها، چاه‌های شماره ۱، ۲، ۳، ۶، ۷، ۸، ۹ و ۱۰ برای نمونه برداری و تجزیه انتخاب شدند. در این بررسی نتایج زیر به دست آمد:

- آلودگی در چاه‌های شماره ۱ و ۲ جدی است. در چاه شماره ۱، مقدار گازوئیل، نفت سفید و نفت سبک به ترتیب $\% ۵۹$ ، $\% ۲۵/۵$ و $\% ۷/۷$ و در چاه شماره ۲، به ترتیب $\% ۳۵/۸۷$ ، $\% ۳۱/۸۶$ و $\% ۲۸/۲۷$ گزارش شده است.
- سایر چاه‌ها نیز تا حدودی آلوده شده‌اند.
- نتایج تجزیه آب چاه شماره ۱ مشابه محصولات هیدروکربنی (سوخت جت و نفت سفید) در مخازنی بود که در نزدیکی چاه قرار گرفته بود.

۵-۸-۳. چاه‌های حفاظت الکتrolیتی

- در سایت شرکت پالایش نفت تهران، ۱۰ چاه وجود دارد که در هر یک از آن ها یک قطب مثبت برای حفاظت الکتrolیتی نصب شده است. بررسی این چاه‌ها نشان داد که:
- آلودگی با مواد نفتی در چاه‌های حفاظت الکتrolیتی هر ساله افزایش می‌یابد.

- در سال ۱۳۶۷، چاه‌های شماره ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۱۲، ۱۳، ۱۵، ۲۶، ۲۷، ۲۸ و ۲۹ هنوز آلوده نشده بودند. اما حضور آلودگی در تمام این چاه‌ها از سال ۱۳۷۷ به بعد اثبات شد.
- گاز وئیل، نفت سفید و نفت سبک تقریباً در تمام این چاه‌ها مشاهده شده‌اند اما درصدهای آن‌ها در هر چاه متفاوت هستند. گازوئیل و نفت سفید سهم بیشتری از آلودگی را دارند.

۵-۸-۴. نشت نفت در واحدهای شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه

پمپاژ

شرکت پالایش نفت تهران بیش از ۳۰ سال پیش تأسیس شده و تأسیسات آن دچار فرسودگی و پوسیدگی شده‌اند. هر واحد چندین بار تعمیر و مستحکم شده است اما، به نظر می‌رسد که به‌سازی بنیادی انجام نشده است.

همان‌طور که در شکل‌های (۵-۱۴) تا (۵-۱۶) مشاهده می‌شود، اثر نشت نفت در جاهای مختلف سایت شرکت پالایش نفت تهران دیده شده است. این مورد را می‌توان به عنوان یکی از منابع آلودگی در نظر گرفت.



شکل (۵-۱۴): نشت نفت از جریان‌سنج‌ها^۱ و شیرهای کنترل (Idemitsu engineering Ltd, 2003).

^۱. Flow meters



شکل (۵-۱۵): نشت نفت نزدیک کف تانک (Idemitsu engineering Ltd, 2003).



شکل (۵-۱۶): نشت نفت از خط لوله جاسازی شده (Idemitsu engineering Ltd, 2003).

با بررسی در داخل محوطه نا حیه صنعتی ری، این موضوع تأیید شد که محل‌های نشت نفت مهم‌ترین منابع آلودگی می‌باشند. محل‌های مورد نظر که مورد تأیید قرار گرفته‌اند در شکل (۵-۱۷) نشان داده شده است. شرایط فعلی این نقاط در شکل‌های (۵-۱۸) تا (۵-۲۲) نشان داده شده‌اند.

موارد خیلی کمی از آلودگی مربوط به زیر سطح از روی سطح زمین تأیید شد. ولی مواردی مبنی بر خرابی و کهنه شدن لوله‌ها که تعمیر شده بودند (نقطه ۱، شکل ۵-۱۷)، گزارش گردید. هنوز نشت نفت از این لوله مدفون تعمیر شده وجود داشت. نفت نشت کرده به خاک زیرین نفوذ کرده است. تغییر رنگ خاک به سبز تیره این واقعیت را تأیید می‌کند.

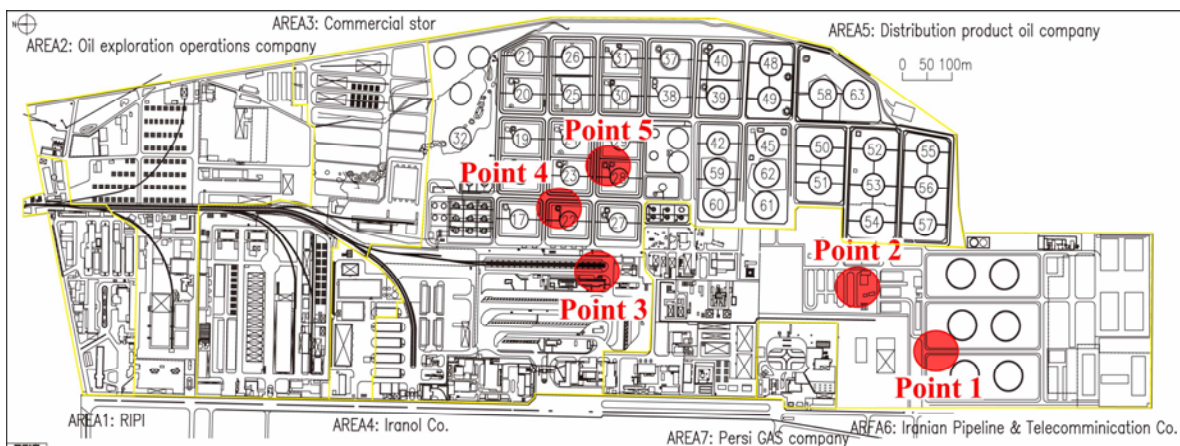
چندین نشت نفت در نقاط مختلف خطوط لوله سطحی شرکت خط لوله و ارتباط ایران (نقطه ۲،

شکل ۵-۱۷) تأیید شد. بازیابی نفت نیز در این نقاط انجام می‌شود.

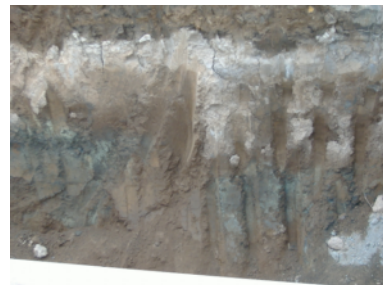
آلودگی مشخص نفت بر روی زمین در داخل سایت شرکت توزیع محصول نفت نیز دیده شده است. در میان این نقاط، یک نشت آشکار نفت در خروجی خط لوله که نفت را به تانکرهای نفت منتقل می‌کنند (نقطه ۳) مشخص شد. بعلاوه، اطراف پیت‌های زهکشی لجن تخلیه شده از تانکرهای نفت منابعی از آلودگی مشاهده شدند (نقاط ۴ و ۵). پیت‌های زهکشی لزوماً برای هر تانک ایجاد شده و هیچ روش یا تأسیسات جلوگیری برای متوقف ساختن نفوذ نفت جمع‌آوری شده در این پیت‌ها وجود ندارد. بررسی‌ها نشان می‌دهد که پیت‌های زهکشی مذکور می‌توانند یکی از منابع آلودگی نفت باشند.

باطله نفت منتقل شده و تخلیه شده به کامیون‌های تانکر دار و غیره به وسیله خط لوله جمع‌آوری

و بازیابی می‌شود.



شکل (۵-۱۷): شرایط فعلی نقاط آلودگی در ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۱۸): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۱) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۱۹): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۲) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



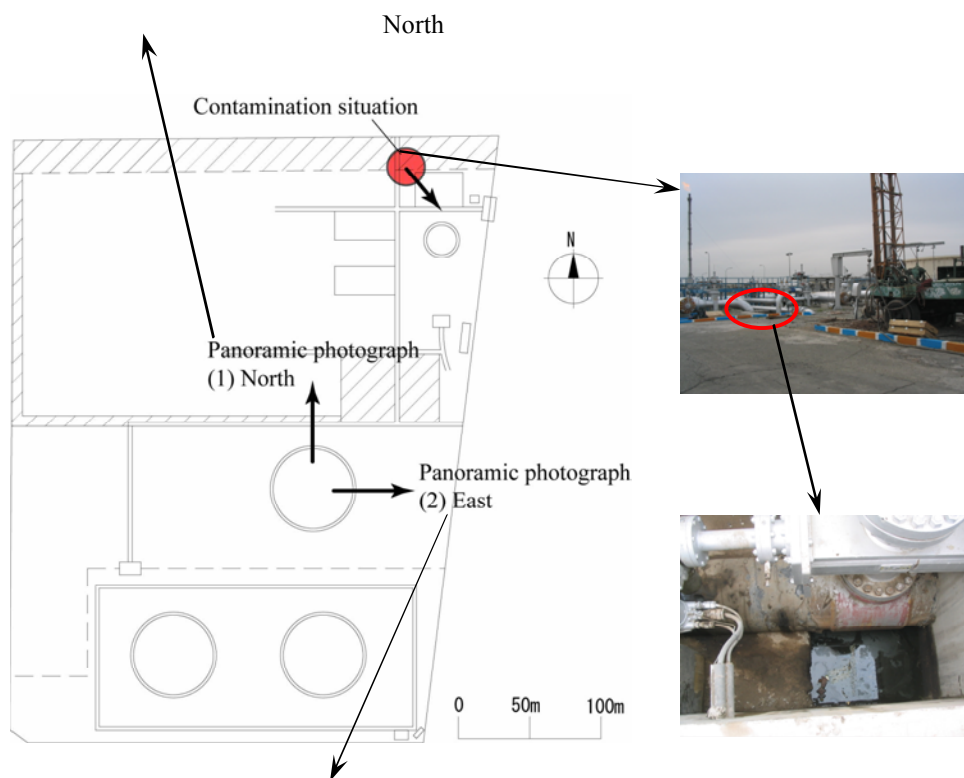
شکل (۵-۲۰): موقعیت‌های نشت نفت (نقطه ۳) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۲۲): پیت زهکشی (نقطه ۵)
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

شکل (۵-۲۱): پیت زهکشی (نقطه ۴)
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

مشاهدات و اندازه‌گیری‌ها در ناحیه ایستگاه پمپاژ که در تاریخ ۷ تیر ماه ۱۳۸۵ انجام پذیرفت، لایه نفتی با ضخامت ۸/۵ متر در گمانه حفاری را آشکار ساخت. در این بررسی‌ها تجمع نفت باطله در اطراف یک خط لوله زیرزمینی نزدیک گمانه حفاری مذکور (شکل ۵-۲۳) مشاهده شد. با این حال، این موضوع دقیقاً مشخص نشده که کل آلودگی نفت رسیده به گمانه مورد نظر از این خط لوله زیرزمینی باشد.



شکل (۵-۲۳): موقعیت نشت نفت در اطراف یک خط لوله زیرزمینی در ایستگاه پمپاژ
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۹. بررسی عمق نفت در تأسیسات موجود

۵-۹-۱. اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های قنات

عمق نفت روی سطح آب زیرزمینی در چاه های قنات موجود در سایت شرکت پالایش نفت تهران (چاه‌های شماره ۱ تا شماره ۴۰ قنات درسان آباد) اندازه‌گیری شد. نتایج اندازه‌گیری ها به صورت توزیع سطحی در شکل‌های (۵-۲۴) و (۵-۲۵) نشان داده شده‌اند. اگر چه دقت اندازه‌گیری‌های انجام شده با این روش مناسب نیست ولی امکان تشخیص تمایل عمق نفت آلاینده را فقط برای توصیف روش جهت مرجع فراهم می‌سازد.

بررسی‌ها نشان می‌دهد که عمق نفت در سال ۱۳۸۲ بطور آشکارا از سال ۱۳۷۴ بیشتر شده است. عمدتاً در قسمت شمالی شرکت پالایش نفت تهران عمق نفت در سال ۱۳۷۴ به طور متوسط ۳/۵ متر مشخص شده است (شکل ۵-۲۴) اما این مقدار تقریباً به ۸/۵ متر در بهار ۱۳۸۲ افزایش یافته است (شکل ۵-۲۵).

افزایش عمق نفت این واقعیت را آشکار می‌سازد که نفت به سوی قسمت شمالی شرکت پالایش نفت تهران در سمت بالا دست بالا می‌آید. اما ساختار قنات سبب جریان آب از سمت شمال به جنوب می‌گردد که بیانگر این واقعیت است که ضخامت باقی مانده نفت در سمت جنوب تنها مربوط به منبع آلودگی موجود در سمت جنوب نیست. ضخامت نفت احتمالاً تغییرات فصلی دارد.

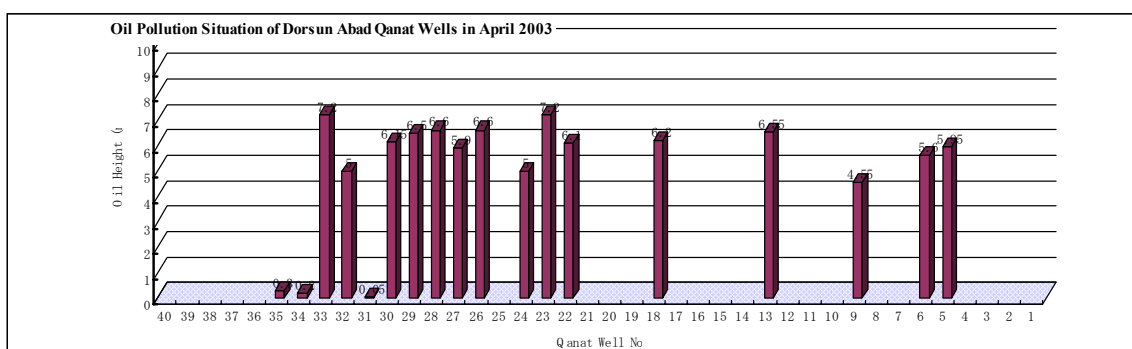
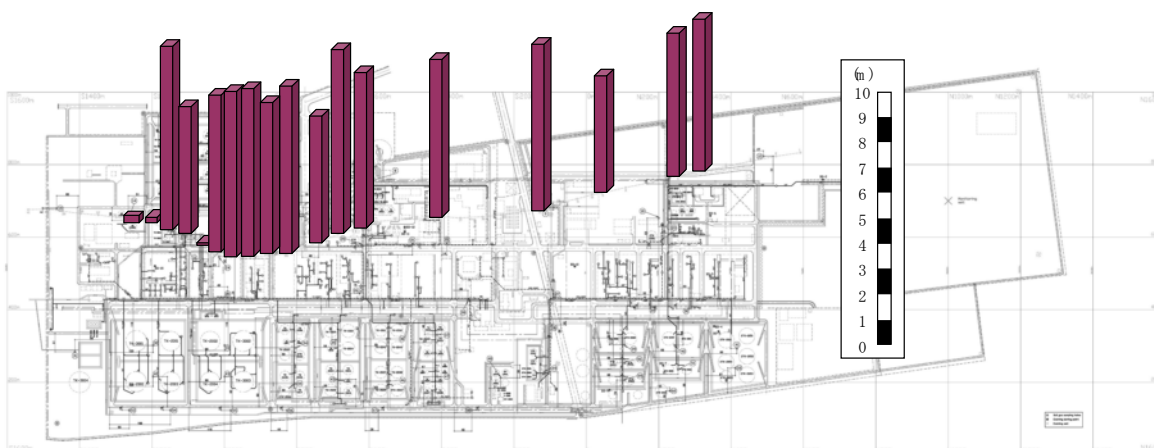
به طو رکلی، سرعت جریان آب زیرزمینی پایین می‌باشد اما در داخل قنات سرعت جریان آب معمولاً بالاتر است. این موضوع ممکن است سبب افزایش وسعت آلودگی گردد که از طریق نقاط نشت مواد آلاینده به قنات راه یافته‌اند. وجود قنات تعیین این واقعیت را که آیا منبع اصلی آلودگی در درون سایت شرکت پالایش نفت تهران وجود دارد یا در خارج آن را مشکل می‌سازد. وجود مادر چاه قنات در منطقه صنعتی احتمالاً شامل منابع آلودگی همچنین موجب نگرانی ساکنین ناحیه می‌شود. بعد از همه

این مطالب ، شاید بتوان گفت که قنات یک موضوع مهم در اندیشیدن چگونگی حل مشکل آلودگی آب زیرزمینی برای آینده است.

در نتیجه بررسی و اندازه‌گیری ضخامت لایه نفت در چاه‌های نظارتی نصب شده، حضور لایه نفت در قسمت جنوبی کل ناحیه صنعتی ری تأیید شد. ضخامت لایه نفت در طی مدت این بررسی در حاشیه جنوب غربی ناحیه مورد بررسی حداکثر ۷/۵ متر بود. علاوه بر این وجود لایه نفت در چاه‌های موجود در شرکت توزیع محصولات نفتی در ناحیه صنعتی ری تأیید شد.



شکل (۵-۲۴): نتایج اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های قنات در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (اردیبهشت ۱۳۷۴) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۲۵): نتایج اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های قنات در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (فروردین ۱۳۸۲) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

در ایستگاه پمپاژ، در دو زمان متفاوت عمق نفت در چاه نظارتی و گمانه حفاری موجود در منطقه اندازه‌گیری شد. در هر دو دفعه در چاه نظارتی لایه نفتی مشاهده نشد. اما ضخامت لایه نفت در ۱۳ شهریور ۱۳۸۵ حدود ۳/۷۷ متر و در ۶ مهر همان سال ۸/۵ متر تخمین زده شد.

۵-۹-۲. اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های حفاظت الکترولیتی

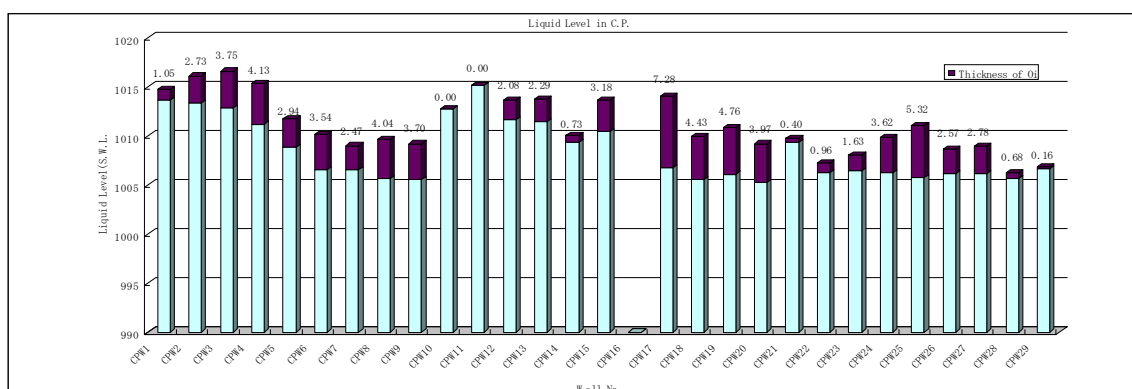
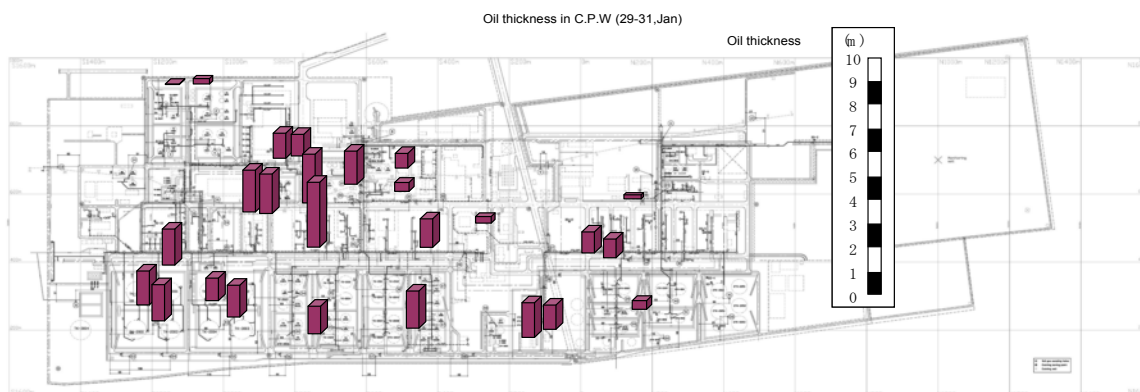
عمق نفت در چاه‌های حفاظت الکترولیتی در ۲۹ نقطه سایت شرکت پالایش نفت تهران اندازه‌گیری شد. چاه‌های حفاظت الکترولیتی متمایز از چاه‌های قنات به طور مستقل در سایت وجود دارند به طوری که موقعیت آن‌ها برای آشکارسازی توزیع مواد آلاینده مفید هستند.

نتایج این اندازه‌گیری‌ها در شکل (۵-۲۶) نشان داده شده است. همان‌طور که این شکل‌ها نشان می‌دهند، هیدروکربن‌های نفتی در اطراف قسمت جنوبی شرکت پالایش نفت تهران توزیع می‌شوند و بیشترین عمق نفت (۵ تا ۷ متر) در چاه شماره ۱۸ در فاصله کمی از قنات درسان آباد دیده می‌شود. همچنین عمق نفت بیشتر یا کمتر از ۳ متر در محوطه مخزن در امتداد مرز شرقی جدا شده از قنات درسان آباد یافت می‌شود. حضور لایه نفت در چاه‌های شماره ۱ تا ۳ که در قسمت شمال شرق قرار گرفته، در بالا دست جریان آب زیرزمینی تأیید می‌شود. به احتمال زیاد، منبع آلاینده در سمت بالا دست جریان آب زیرزمینی وجود دارد، یا عمق نفت افزایش یافته یک افت (هد) هیدرولیکی بزرگتری را ایجاد می‌کند که منجر به جریان آب در جهت مخالف جریان طبیعی آب زیرزمینی می‌گردد. در غیر این صورت منبع آلاینده باید در خارج از مرز شرقی سایت شرکت پالایش نفت تهران یافت شود.

همان‌طور که در بالا اشاره شد، نتایج بررسی برای آشکار سازی توزیع سطحی مواد نفتی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران می‌تواند مفید باشد، اما سیالات اطراف چاه‌های حفاظت الکترولیتی (آب زیرزمینی و نفت) فقط می‌توانند از طریق عبور از فیلتر یا صافی وارد آن‌ها شوند زیرا هر چاه با یک لوله جداری فلزی پوشیده می‌شود. از آنجایی که ساختار چاه‌ها در آن زمان روشن نبود، بنابراین نتایج بررسی‌ها مستقیماً توزیع مواد آلاینده را مشخص نکرده است.

۵-۹-۳. اندازه‌گیری تجمع گاز خاک در عمق ۴ متر

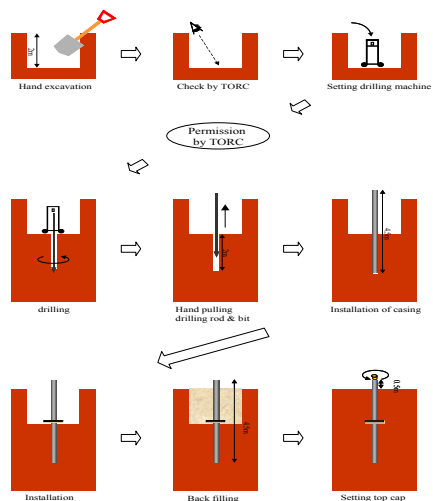
یکی از آثار حضور آلودگی نفتی در منطقه، وجود گازهای فرار حاصل از این مواد در زیر زمین است. لذا بررسی توزیع غلظت گازهای فرار موجود در زیر زمین روشی برای بررسی وضعیت آلودگی در ناحیه است. غلظت گاز خاک در چاه‌های نمونه‌برداری که با عمق ۴ متر (از سطح زمین) در سایت پالایش نفت تهران ایجاد شده بود، جهت تعیین منبع آلودگی و توزیع سطحی آن اندازه‌گیری گردید.



شکل (۵-۲۶): نتایج اندازه‌گیری عمق نفت در چاه‌های حفاظت الکترولیتی داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران (۱۰ و ۱۱ بهمن ۱۳۸۳) (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

این بررسی‌ها نشان داد که سایت شرکت پالایش نفت تهران از لایه‌های ضخیم رس با مقادیر بالای نیتروژن تشکیل شده است. چال‌های نمونه‌برداری گاز خاک در ۶۰ نقطه تا عمق ۴ متر از سطح زمین به وسیله ماشین گمانه‌زنی نوع بی‌آب حفر شدند (شکل ۵-۲۷).

مطابق مقررات شرکت پالایش نفت تهران، به منظور تأیید تأسیسات زیرزمینی در هر مکان حفاری، چال‌های نمونه‌گیری گاز خاک تا عمق ۲ متر با دست حفاری شدند. شکل (۵-۲۸) روند حفاری این چال‌ها را نشان می‌دهد. در شکل‌های (۵-۲۹) تا (۵-۳۲) نیز شرایط کار تشریح شده است.



شکل (۵-۲۸): روند گمانه‌زنی برای نمونه‌برداری گاز خاک
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)



شکل (۵-۲۷): ماشین گمانه‌زنی وارد شده از ژاپن
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)



شکل (۵-۳۰): نصب ماشین گمانه‌زنی
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)



شکل (۵-۲۹): گمانه‌زنی آزمایشی به وسیله دست
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)



شکل (۵-۳۲): جاسازی یک لوله جدار
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)



شکل (۵-۳۱): گمانه‌زنی به وسیله ماشین
(Fusione Techno Solutions Co., 2006)

از این اندازه گیری‌ها نتایج زیر حاصل شد:

منطقه با غلظت گاز بالا در قسمت جنوب غربی ناحیه مورد بررسی در سایت شرکت پالایش نفت تهران دیده می‌شود. نقاطی وجود دارند که در آن‌ها مقادیر گاز بالاتر از بازه حاصل از هر دو لوله آشکار ساز و حس گر مواد آلی فرار است. این نکته تصور می‌شود که میزان آلودگی در مقایسه با مقادیر استاندارد سازمان حفاظت محیط زیست ($0.1 \geq$ بنزن میلی گرم بر لیتر) بیشتر است.

با بررسی داده‌های هر عمق، تجمع بالای گاز در سمت جنوبی ناحیه صنعتی ری و در داخل سایت سه شرکت توزیع محصولات نفتی، شرکت ارتباطات و خطوط لوله ایران و شرکت پرسی گاز مشاهده شد.

با مقایسه میزان گاز مواد آلی فرار مشاهده شده در سه شرکت سمت جنوبی با میزان گاز مواد آلی مشخص شده در دیگر نواحی شامل چهار شرکت قسمت شمالی (ناحیه ۱: مؤسسه تحقیق صنعت نفت، ناحیه ۲: شرکت عملیات اکتشاف نفت، ناحیه ۳: ذخیره سازی تجاری و ناحیه ۴: شرکت ایرانول)، می‌توان دریافت که مقدار گاز در شرکت‌های شمالی به طور قابل ملاحظه‌ای پایین است.

علاوه بر این، تجمع بالای گاز مواد آلی فرار در اطراف مکان‌هایی که نشت نفت طی بررسی‌های انجام شده در سایت تأیید شده است، مشاهده گردید. در این مکان‌ها، نقاطی همچون محل‌های تجمع لجن تخلیه شده از تانکرهای نفت یا خروجی خطوط لوله که نفت را به تانکرهای نفت انتقال می‌دهند و غیره وجود دارند که در آن‌جاها نفت نشت می‌کند. این نشت نفت به داخل زمین نفوذ می‌کند و به واسطه تبخیرش، یک ناحیه با تجمع بالایی از مواد آلی فرار تشکیل می‌گردد.

وقتی تجمع گاز مواد آلی فرار در اطراف مخازن ذخیره اندازه‌گیری می‌شد، در گام نخست انتظار می‌رفت تجمع گاز بالا باشد. چون تعداد زیادی گودال‌های زهکشی در اطراف آن وجود داشت. اما، نتایج آزمایش واقعی نشان داد که تفاوت تجمع گاز در اعماق مختلف بسیار قابل ملاحظه است. این نتایج نشان می‌دهد که نقاطی که در آن‌جا گاز مواد آلی فرار تجمع کرده اندکی محدود است. به نظر می‌رسد که نفت باطله در پیت‌های زهکشی به صورت عمودی به داخل زمین نفوذ کرده باشد.

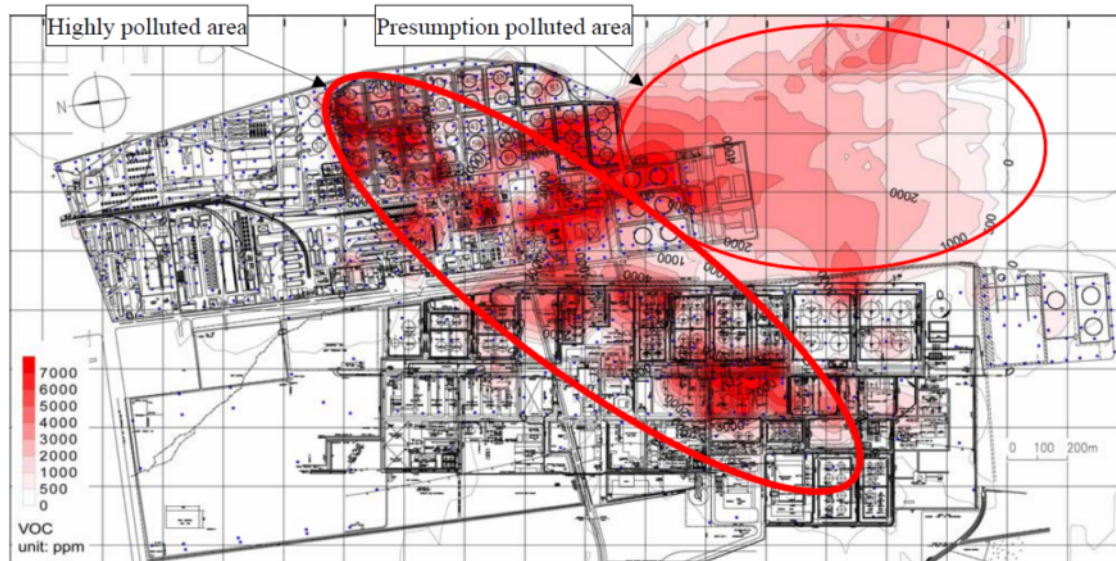
گذشته از این، همان طور که محتوی نفت در خاک آلوده می‌تواند به وسیله افزایش دما تبخیر شود، این تصور می‌شد که تجمع گاز اندازه‌گیری شده باید در دماهای بالاتر، بالا باشد. با این حال، با در نظر گرفتن نتایج به دست آمده از ۳ دوره اندازه‌گیری، به طور واضح افزایش تجمع گاز مواد آلی فرار با افزایش دما را نشان نداد. دو مورد زیر می‌تواند در این خصوص نقش داشته باشند:

- به هنگام عملیات اندازه گیری گاز خاک بخشی از گاز تبخیر شده در دماهای بالا با باز شدن سرپوش لوله‌هایی که به داخل خاک وارد شده‌اند، از آن خارج می‌گردند.
- با توجه به اینکه زمان عملیات اندازه‌گیری گاز به اندازه کافی طولانی نبوده، داده‌های مشخصی که بیانگر تغییرات فصلی باشد نمی‌توانست در چنین مدت کوتاهی از اندازه‌گیری تولید شود (۴ ماه از اواسط بهمن تا اواسط خرداد).

در ناحیه ایستگاه پمپاژ، تجمع گاز مواد آلی فرار در چال‌های نمونه‌گیری گاز در ۴۰ نقطه از سایت برای ۳ دوره زمانی اندازه‌گیری شد. شکل (۵-۳۳) نتایج حاصل از اندازه‌گیری تجمع گاز خاک را در سه ناحیه مورد نظر نشان می‌دهد.

غلظت‌های بالایی از آلودگی می‌تواند در قسمت جنوب ناحیه صنعتی ری و همچنین در قسمت جنوبی شرکت پالایش نفت تهران دیده شود. گسترش قابل ملاحظه آلودگی در بخش‌های وسیعی از ناحیه صنعتی ری شامل شرکت پالایش نفت تهران تأیید شد. این طیف آلودگی به نظر می‌رسد به سمت جنوب غربی ادامه یابد. از طرف دیگر، جریان عمومی آب‌های زیرزمینی نیز به سمت جنوب غربی است.

اگر نفت در داخل چاه روی سطح آب زیرزمینی باشد، تصور می‌شود که طیف آلودگی به وسیله جریان آب زیرزمینی گسترده می‌شود. اما اگر آلودگی در مجاور سطح زمین باشد، به نظر می‌رسد که ارتباطی با جریان آب زیرزمینی نداشته باشد. با این حال، ارتباط بین آلودگی در مجاور سطح زمین و جریان آب زیرزمینی در زمان بررسی دقیقاً مشخص نبود.



شکل (۵-۳۳): توزیع تجمع گازی مواد آلی فرار در عمق ۴ متری در ناحیه شرکت پالایش نفت تهران، ۷ شرکت در ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

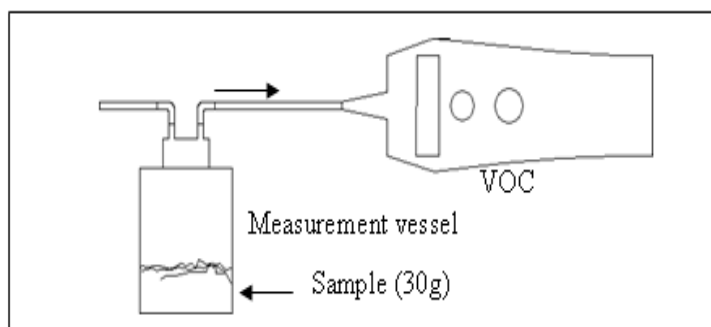
۵-۹-۴. اندازه‌گیری تجمع گاز خاک با روش Headspace

اندازه‌گیری تجمع گاز مواد آلی فرار با روش Headspace نیز انجام می‌شود.

دستگاه اندازه‌گیری در شکل‌های (۵-۳۴) و (۵-۳۵) نشان داده شده است. دستگاه دارای بخش‌های زیر است:

- حس‌گر مواد آلی فرار

- ظرف روش Headspace، لوله توسعه

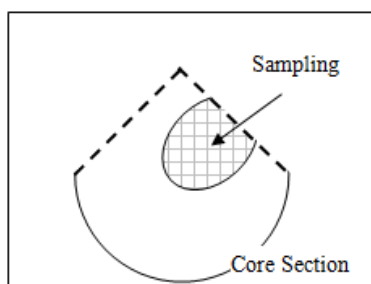


شکل (۵-۳۵): طرح شماتیک اندازه‌گیری روش Headspace
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۳۴): روش Headspace
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

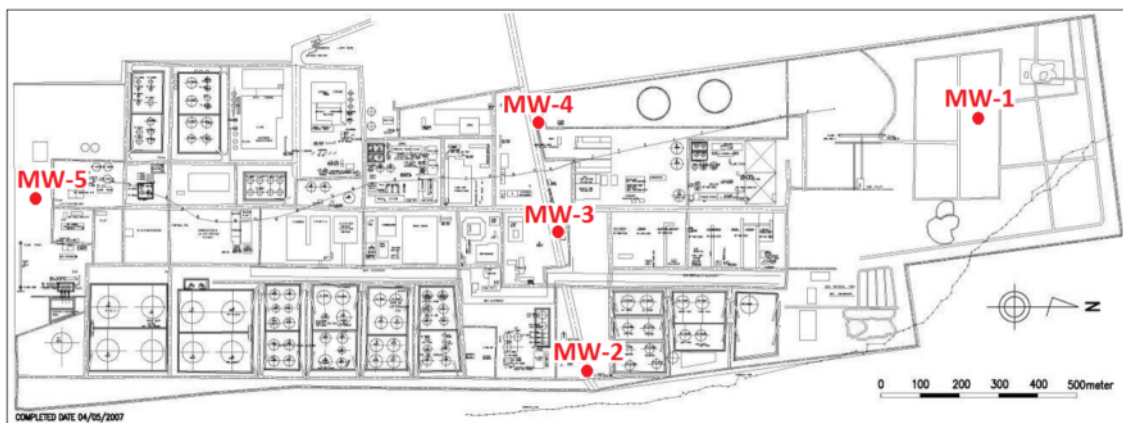
در ابتدا، ۳۰ گرم از نمونه خاک گرفته شده از چال در مخزن Headspace قرار داده می‌شود (شکل ۵-۳۶). بعد از بستن سرپوش مخزن آن، کل مخزن باید به شدت دو دفعه به منظور تبخیر گاز خاک در مخزن تکان داده شود. سپس، مخزن به تیوپ متصل کننده حسگر مواد آلی فرار متصل می‌شود و تجمع گاز مواد آلی فرار بالنتیجه اندازه‌گیری می‌شود.



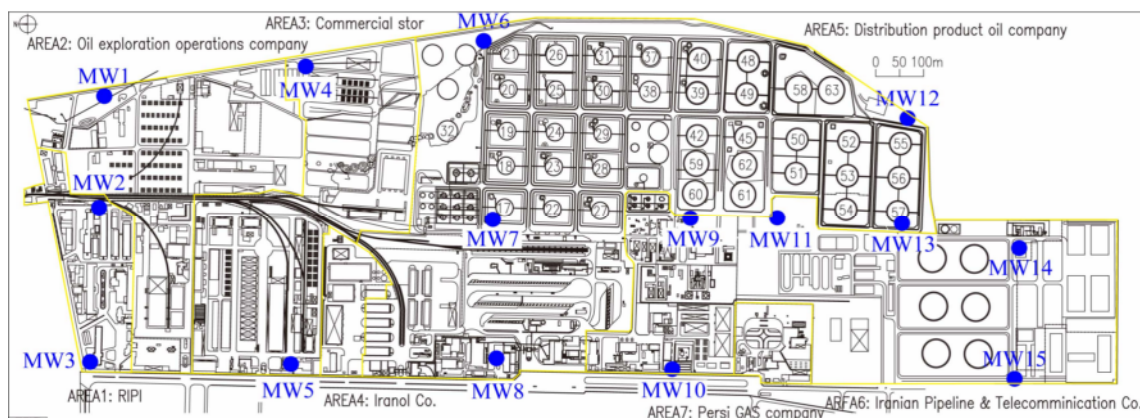
شکل (۵-۳۶): شرایط نمونه‌گیری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۹-۵. نصب چاه‌های نظارتی سطح آب زیرزمینی

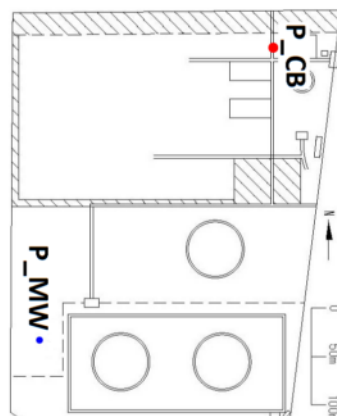
در بررسی مقدماتی، چاه‌های نظارتی برای اندازه‌گیری تغییرات سطح آب زیرزمینی حفر شدند. چاه نظارتی ۷ اینچ قطر و ۳۰ متر عمق دارد. برای لوله گذاری چاه از یک لوله PVC استفاده شد. زمین بایر در شمال سایت شرکت پالایش نفت تهران جایی که آلودگی آب زیرزمینی در آنجا نسبتاً پایین است و هیچ چاهی برای آبیاری در آنجا وجود ندارد به عنوان محل حفر چاه‌های نظارتی انتخاب گردید. همچنین تعدادی چاه نظارتی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ حفر شدند. موقعیت چاه‌های نظارتی در داخل سایت شرکت پالایش نفت تهران، ناحیه صنعتی ری و ایستگاه پمپاژ به ترتیب در شکل‌های (۵-۳۷) تا (۵-۳۹) نشان داده شده‌اند.



شکل (۵-۳۷): موقعیت چاه‌های نظارتی در سایت شرکت پالایش نفت تهران (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۳۸): موقعیت چاه‌های نظارتی در ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

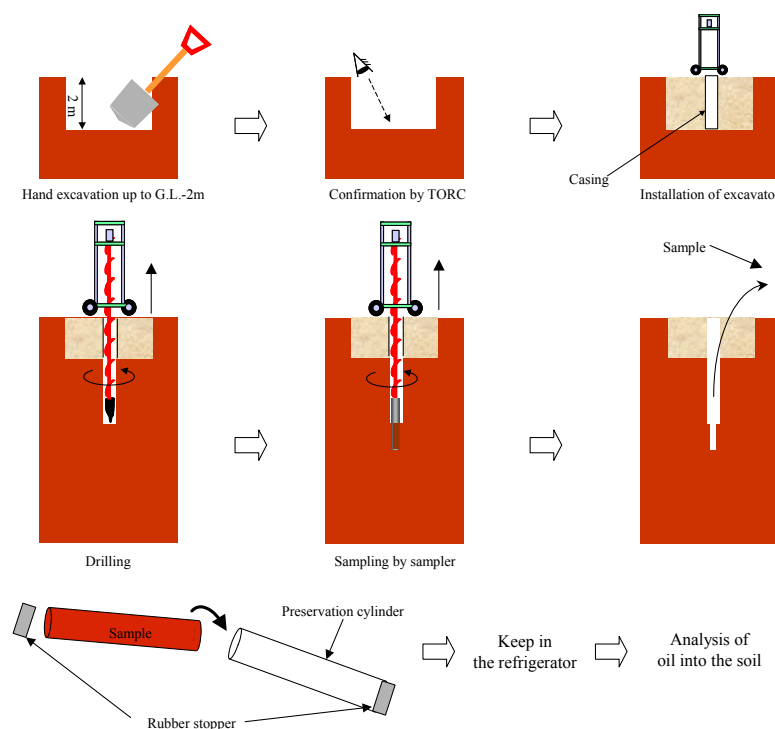


شکل (۵-۳۹): موقعیت چاه نظارتی P_MW در ناحیه ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۱۰. تخمین مقدار آلودگی نفت در خاک

برای تعیین درجه آلودگی نفت خاک آنالیز کمی انجام می‌شود. درجه آلودگی نفت خاک به صورت جرم هیدروکربن نفتی (کل هیدروکربن نفتی) موجود در خاک بر واحد جرم خاک تعیین می‌شود.

کلید فرضی منبع آلودگی و انتخاب پاک‌سازی می‌تواند از این تجزیه بدست آورده شود. شکل (۴۰-۵) روش نمونه‌گیری از چال نمونه برداری خاک و ذخیره نمونه را نشان می‌دهد. نمونه‌های خاک با غشاهای پوششی بلافاصله بعد از جمع‌آوری، برای جلوگیری از تبخیر محتوی نفت پوشانده می‌شود و بعد از قرار دادن آن‌ها در جعبه‌های استرین فوم در یخچال نگه داشته می‌شوند.



شکل (۴۰-۵): روش نمونه‌گیری از چال نمونه‌برداری خاک و ذخیره نمونه (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

تخمین مقدار آلاینده نفتی در ناحیه مورد بررسی بر اساس دو روش ساده انجام می‌شود. در سایت شرکت پالایش نفت تهران مقدار کل آلاینده نفتی با استفاده از یافته‌های بررسی محتوی نفت خاک تخمین زده می‌شود. اما، مقدار کل آلاینده نفتی در ناحیه صنعتی ری با استفاده از دو روش محاسبه شده است:

- روش استفاده از محتوی نفت خاک با دو آنالیز ^{113}HEM و $^{114}\text{CFC-EM}$ (روش ۱).

¹¹³. N- Hexane Extractable Materials

¹¹⁴. Chlorofluorocarbon Extractable Materials (Solvent extraction-infrared absorption spectrophotometry)

- روش تقریب مقدار آلاینده نفتی با استفاده از ضخامت متوسط لایه نفت (روش ۲)

(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

نتایج آنالیز در زیر آورده شده است. به علاوه، برای محاسبه حجم نفت، دانسیته تر (مرطوب) از تست خاک ($\rho_t = 1.923 \text{ t/m}^3$) و دانسیته نفت بدست آمده از آنالیز مولفه نفت نمونه‌های گرفته شده از چاه‌ها ($\rho = 0.8183 \text{ t/m}^3$) استفاده شدند.

ضمناً، نسبت محتوی نفت در فضای خالی خاک بر اساس آنالیز HEM و CFC-EM تخمین زده می‌شود (جدول ۵-۱).

جدول (۵-۱): نسبت محتوی نفت در فضای خالی خاک (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

آنالیز	حداکثر مقدار (mg/kg)	نسبت محتوی نفت در فضای خالی خاک
HEM	۱۵۲۲۷۳	۰/۸۵
CFC-EM	۶۸۸۷۰	۰/۳۵

مقایسه نتایج به دست آمده در مورد محتوی نفت خاک در ناحیه شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری با استفاده از دو روش در جداول (۵-۲) و (۵-۳) آورده شده است.

حوزه‌های آلودگی در ناحیه صنعتی ری و شرکت پالایش نفت تهران، جایی که لایه نفت در آن‌جاها تأیید شد، با دو رنگ متفاوت نشان داده شده است. این مطلب آشکار می‌شود که هر دو ناحیه صنعتی ری و شرکت پالایش نفت تهران غلظت بالایی از آلودگی را در بخش‌های جنوبی خود دارند. به منظور محاسبه دقیق‌تر مقدار نفت در واحد حجم، حوزه‌های نشان داده شده در شکل (۵-۴۱) به عنوان حوزه آلودگی مشخص شدند.

جدول (۵-۲): مقایسه نتایج بدست آمده در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری با استفاده از روش ۱ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

شرکت پالایش نفت تهران	ناحیه صنعتی ری (CFC-EM)	ناحیه صنعتی ری (HEM)	
۱۴۴۰۰۰۰	۴۶۲۲۷۸	۵۶۰۴۰۷	مقادیر تخمینی نفت (m^3)
۰/۸۰۵	۰/۸۱۸۳	۰/۸۱۸۳	دانسیته نفت (t/m^3)

۱۱۱۶۹۰۰	۹۰۳۸۴۰	۹۰۳۸۴۰	وسعت آلودگی (m^2)
۱۳/۰۵	۱۳/۰۵	۱۳/۰۵	عمق (G.L.-m)
۱۴۵۷۵۵۴۵	۱۱۷۹۵۱۱۲	۱۱۷۹۵۱۱۲	حوزه آلودگی (m^3)
۰/۰۷۹۵	۰/۰۳۲۱	۰/۰۳۸۹	مقدار آلودگی نفت (t/m^3)

جدول (۳-۵): مقایسه نتایج بدست آمده در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری با استفاده از روش ۲
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

شرکت پالایش نفت تهران	ناحیه صنعتی ری	
۱۱۰۲۱۶۸	۳۲۰۱۵۳	ناحیه (m^2)
۱۴۳۸۵۵۱	۴۲۶۵۸۰	مقادیر تخمینی نفت (m^3)
۱/۳۱	۱/۳۳	ضخامت لایه نفت بر واحد سطح (m)

در ناحیه ایستگاه پمپاژ نیز آلودگی خاک به وسیله نفت مشاهده شد. به منظور تخمین مقدار آلاینده نفتی در ناحیه ایستگاه پمپاژ از آنالیزهای HEM و CFC-EM استفاده گردید (روش ۱).
بعلاوه، چون فقط یک گمانه حفاری و یک چاه نظارتی در منطقه وجود دارد، محاسبه نفت به وسیله روش ۲ یعنی بر اساس ضخامت لایه نفت به دلیل تعداد کم گمانه های حفاری و چاه های نظارتی ممکن نیست. مقادیر محاسبه شده حجم آلودگی توسط روش های HEM و CFC-EM متفاوت است (جدول ۴-۵). اختلاف در محتوی نفت اندازه گیری شده با این روش ها به واسطه تبخیر نفت از نمونه های خاک می باشد.

مقادیر نفت در ناحیه ایستگاه پمپاژ بر اساس واحد حجم محاسبه شده است. در مورد حوزه آلودگی در این ناحیه، کل منطقه مطابق شکل (۴۲-۵) آلوده است.



شکل (۵-۴۱): وسعت آلودگی در سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

جدول (۵-۴): مقدار آلودگی نفت در ناحیه ایستگاه پمپاژ بر واحد حجم (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

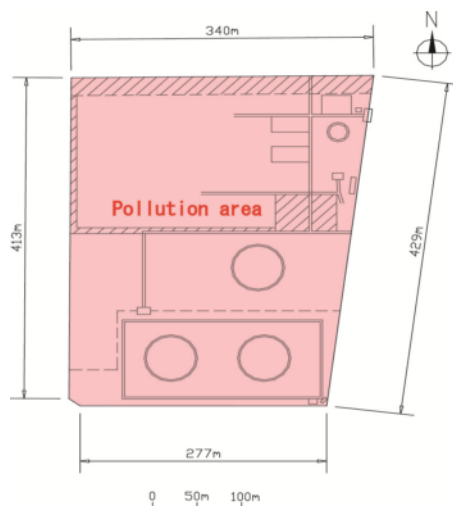
(CFC-EM)	(HEM)	
۶۹۳	۲۰۳۷	مقادیر تخمینی نفت (m^3)
۰/۸۱۸۳	۰/۸۱۸۳	دانسیته نفت (t/m^3)
۱۳۳۴۱۰	۱۳۳۴۱۰	وسعت آلودگی (m^2)
۱۳/۰۵	۱۳/۰۵	عمق (G.L.-m)
۱۷۴۱۰۰۱	۱۷۴۱۰۰۱	حوزه آلودگی (m^3)
۰/۰۰۰۳	۰/۰۰۱۰	مقدار آلودگی نفت بر واحد حجم (t/m^3)

اگرچه مقدار نفت بر واحد حجم در مناطق مختلف ناحیه آلوده متفاوت است اما مقدار آلودگی

(t/m^3 ۰/۰۰۱-۰/۰۰۳) مطابق با نتایج بررسی‌های انجام شده بدست آورده شد. در مقایسه با نتایج

بدست آمده در ناحیه صنعتی ری (t/m^3 ۰/۰۸-۰/۰۶) و پالایشگاه (t/m^3 ۰/۰۹)، مقیاس آلودگی

در ناحیه ایستگاه پمپاژ کمتر پیش‌بینی می‌شود.



شکل (۵-۴۲): وسعت آلودگی در ناحیه ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۱۱. فرض منبع آلودگی

منابع آلودگی ممکن در ناحیه مورد بررسی عبارتند از: نشت از سطح کف مخازن، نشت از لوله-های زیرزمینی مانند خطوط لوله، نشت از مخازن زیرزمینی و نفوذ نفت از پیت‌های زهکشی.

۵-۱۱-۱. آلاینده‌های نفتی

آلاینده‌های تأیید شده در ناحیه مورد بررسی عبارتند از:

- نفت سبک (گازوئیل - نفت گاز)
- نفت سبک - نفت سنگین (نفتا سنگین - نفت گاز - نفت سنگین)
- نفت سبک - نفت سنگین (در این مورد نفت سبک و سنگین مخلوط می‌شوند)
- گازوئیل حاوی سرب (نشت قبل از ۱۳۸۰)
- الف- منبع آلودگی نفت سبک (گازوئیل - نفت گاز)

در حال حاضر، منبع این آلودگی به درستی مشخص نشده است. ولی به احتمال زیاد نشت از مخازن، پیت زهکشی، لوله‌های زیرزمینی انتقال نفت، منابع این آلودگی می‌باشند.

- ب- نفت سبک - نفت سنگین (نفتا سنگین - نفت گاز، نفت سنگین)

در حال حاضر، منبع این آلودگی بطور دقیق مشخص نیست. نشت از مخازن، پیت زهکشی، لوله-های زیرزمینی انتقال نفت، منابع احتمالی این آلودگی می‌باشند.

پ- آلودگی نفت سبک- نفت سنگین

در این مورد، خطوط لوله انتقال نفت خام ممکن است منبع این آلودگی باشد.

ت- گازوئیل حاوی سرب (نشت قبل از ۱۳۸۰)

در حال حاضر محصول گازوئیل حاوی سرب وجود ندارد. به این دلیل، گازوئیل کشف شده باید گازوئیل نشت کرده مربوط به قبل از این تاریخ باشد. بنابراین منبع این آلودگی مجهول است.

۵-۱۱-۲. یافتن منبع آلودگی

۵-۱۱-۲-۱. یافتن منبع آلودگی در ناحیه صنعتی ری

اطراف مخازن مکان‌های حفر شده‌ای (پیت‌های زهکشی) وجود دارند که برای جمع‌آوری مایعات باطله طی مدت نگهداری استفاده می‌شوند. نفت باطله جمع‌آوری شده در این پیت‌های زهکشی، تدریجا به وسیله تبخیر یا نفوذ آن در زمین کاهش می‌یابد. از جنبه آلودگی خاک و آب زیرزمینی به وسیله نفت، این پیت‌های زهکشی قطعا منبع آلودگی هستند. برای مثال، اگر تجمع گاز مواد آلی فرار در مجاور مخازن بررسی شود، وسعت تجمع گاز در کل ناحیه محوطه مخزن می‌تواند اندازه‌گیری شود، زیرا پیت‌های زهکشی در مجاورت آن‌ها از قبل موجود بودند. با این حال، بر اساس نتایج اندازه‌گیری تجمع گاز مواد آلی فرار در عمق ۴ متری، مکان‌هایی با تجمع گاز بالا و تجمع گاز پایین در نزدیک چال‌های نمونه‌برداری گاز وجود دارند. بنابراین، تصور می‌شود که آلاینده نفتی از پیت‌های زهکشی، به طور محلی در زمین نفوذ می‌کند. از روی توزیع تجمع گاز مواد آلی فرار در عمق ۴ متری، یک ناحیه آلوده وسیعی در قسمت جنوبی ناحیه مورد بررسی مشخص می‌شود. تصور می‌شود که تجمع گاز مواد آلی فرار در عمق ۴ متری خاک، موقعیت آلودگی مجاورت سطح زمین را

آشکار می‌سازد. نفتی که از یک پیت زهکشی نشت کرده، تصور می‌شود در داخل زمین به صورت عمودی حرکت کرده است. بنابراین، پیت زهکشی منبع آلودگی برای سطح زمین خارج ناحیه مخازن نیست. به علاوه نفت با مولفه‌های مختلف در چاه‌های نظارتی ۱۰ تا ۱۵ وجود داشت. بررسی‌ها نشان داد که نفوذ از پیت‌های زهکشی یک منبع آلودگی آشکار بود. اما بررسی بیشتر جهت مطالعه احتمال این که گزینه‌های زیر منبع آلودگی باشند ضروری است: نشت از سطح کف مخازن، خطوط لوله و دیگر لوله‌های زیرزمینی، نشت از مخازن زیرزمینی و غیره.

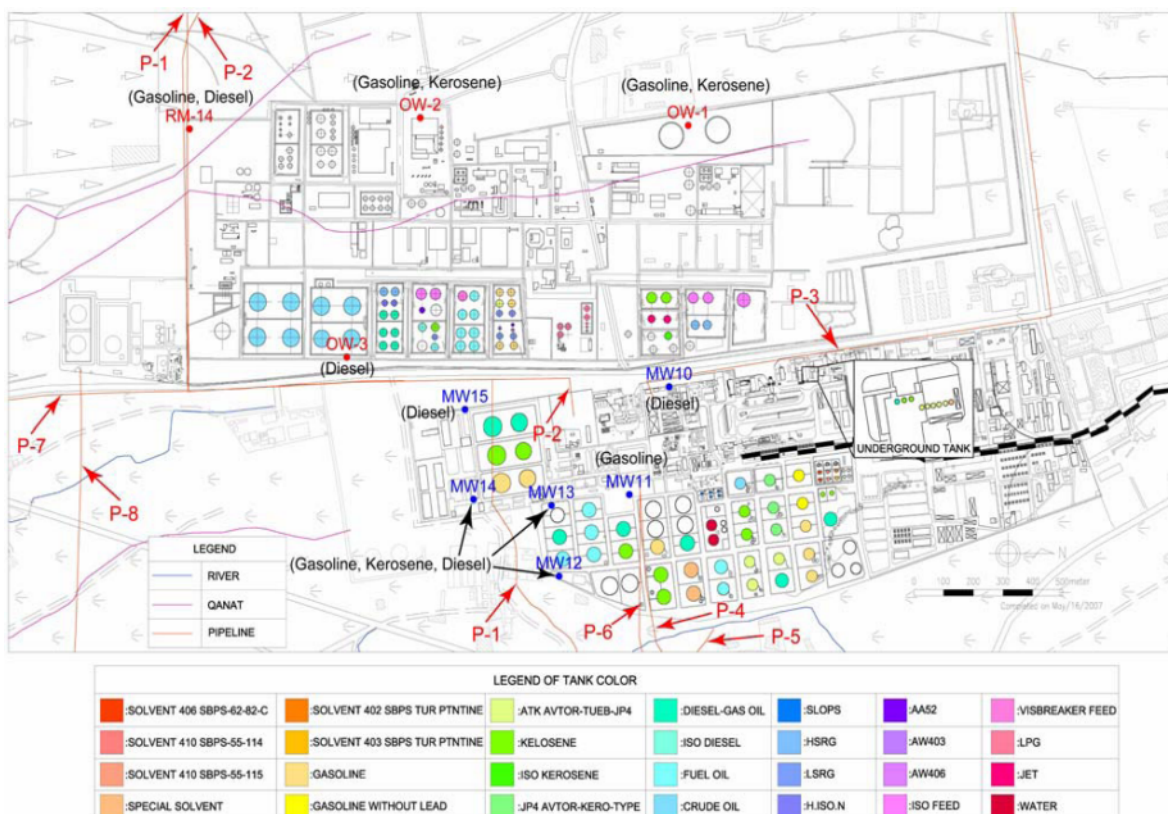
۵-۱۱-۲. یافتن منبع آلودگی در ناحیه صنعتی ری و شرکت پالایش نفت تهران

با در نظر گرفتن جریان آب زیرزمینی، چون شرکت پالایش نفت تهران پایین دست ناحیه صنعتی ری قرار گرفته، یک احتمال وجود دارد که آلودگی شرکت پالایش نفت تهران به دلیل نفت دریافت شده از ناحیه صنعتی ری باشد. با این حال فرض می‌شود که جریان آلاینده نفتی به دلیل ضریب تراوایی کوچک آبخوان به آهستگی صورت گیرد. در مورد آلودگی نزدیک سطح آب زیرزمینی و آلودگی‌های سطحی در شرکت پالایش نفت تهران، چون حرکت آلاینده نفتی آهسته است، تصور این که منشأ آلودگی در ناحیه صنعتی ری است، مشکل خواهد بود. با این حال، در هر دو مکان شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری، تعدادی منبع آلودگی انتظار می‌رود. بنابراین، انجام یک بررسی تفصیلی روی منابع آلودگی و مشخص کردن آن‌ها ضروری است.

۵-۱۳. جمع بندی نتایج مطالعات صحرائی

۵-۱۳-۱. ویژگی‌های آلاینده

موقعیت تجمع محصولات آزاد، نوع آلاینده نفتی احتمالی از نتایج آنالیزها، موقعیت خط لوله و محتوی مخازن در شکل (۵-۴۳) نشان داده شده‌اند.



شکل (۵-۴۳): نوع نفت محصول آزاد، شامل عناصر و ترکیبات اصلی مخازن (Fusione Techno Solutions Co.,) (2006).

یک محصول آزاد چندین نوع نفت مخلوط شده است. تشخیص نوع آلاینده مشکل است. با این حال، ترکیب اصلی یک محصول آزاد از نتایج تجزیه آن حدس زده شد. در نتیجه، ترکیب اصلی آلاینده گازوئیل، نفت سفید و نفت گاز فرض می‌شود.

۵-۱۲-۲. فرض محدوده آلودگی

۵-۱۲-۲-۱. محدوده آلودگی تخمین زده شده از تجزیه آب زیرزمینی

نتایج تجزیه محتوی نفت در آب زیرزمینی در شکل (۵-۴۴) نشان داده شده است. محدوده محتوی بالای آلودگی در اطراف ناحیه صنعتی ری فرض می‌شود.

بر طبق نتایج تجزیه نمونه‌های آب جمع‌آوری شده از چاه‌های نظارتی و قنات‌ها، در کل ناحیه، جامدات معلق بالاتر از حد استاندارد آب کشاورزی (100 mg/L) بود. همچنین این نکته مشخص شد که ناحیه آلودگی از سمت جنوبی ناحیه صنعتی ری گسترش می‌یابد.

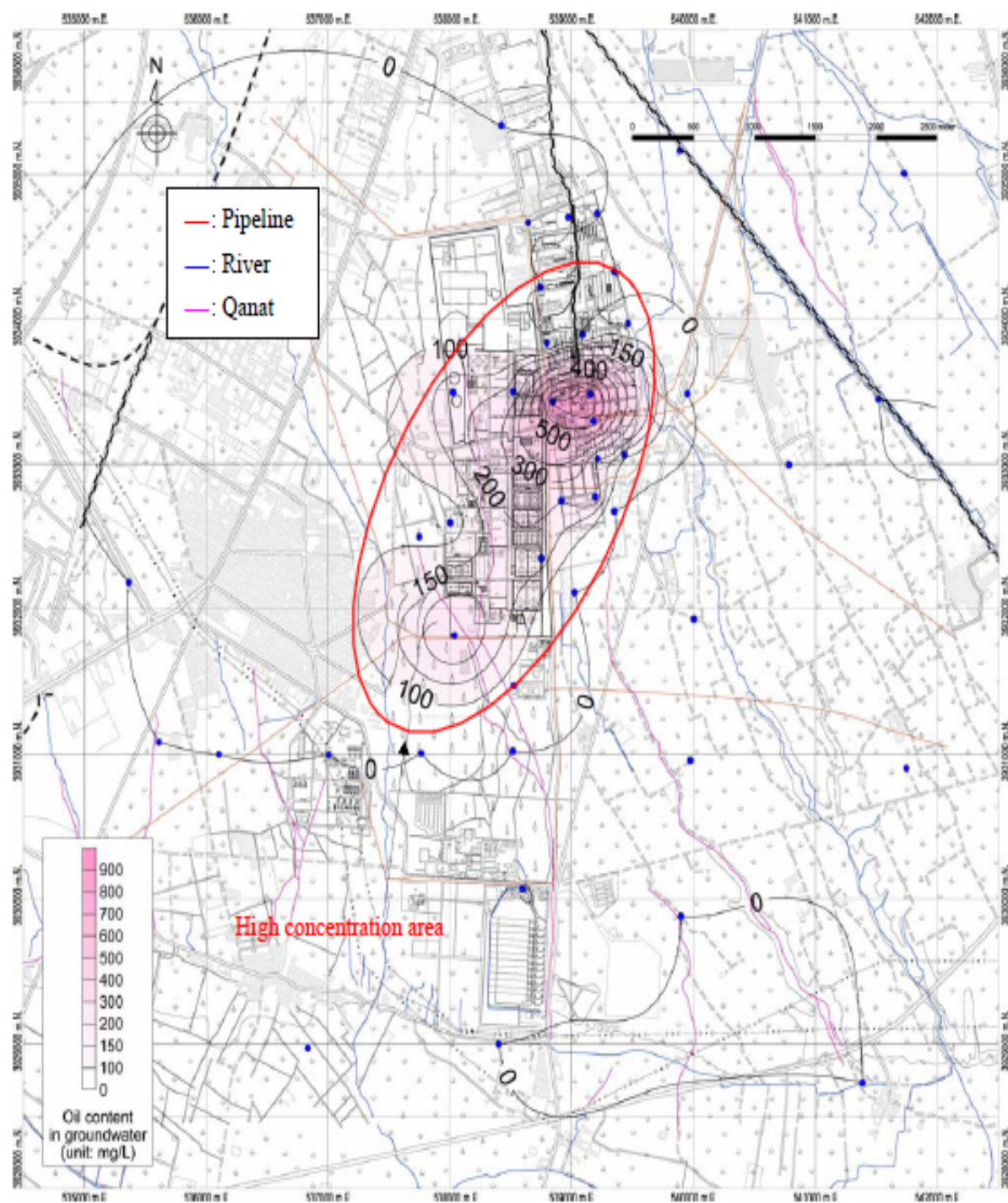
۵-۱۲-۲. محدوده آلودگی تخمین زده شده از اندازه‌گیری گاز خاک

حداکثر مقدار توزیع تجمع گاز خاک اندازه‌گیری شده در شکل (۵-۴۵) نشان داده شده است. محدوده تجمع بالای آلودگی در اطراف ناحیه صنعتی ری فرض می‌شود.

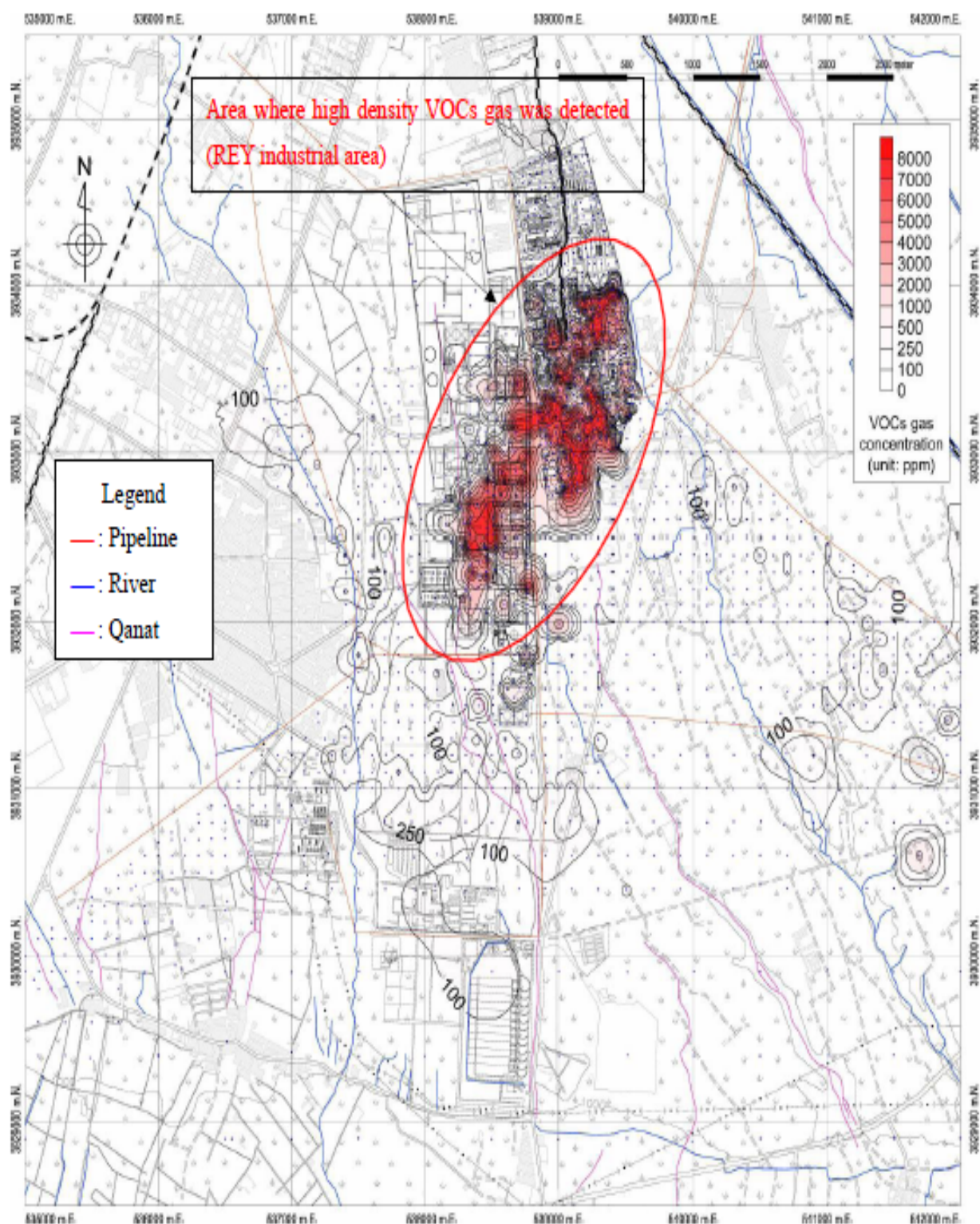
۵-۱۲-۳. محدوده آلودگی تخمین زده شده از آنالیز محتوی نفت خاک

محدوده آلودگی در کل ناحیه ری در مرکز ناحیه صنعتی ری قرار گرفته است (شکل ۵-۴۶). این نکته فرض می‌شود که آلودگی در سمت جنوب شرقی، جنوب غربی و جنوب توزیع می‌گردد. به علاوه، در ناحیه صنعتی ری، طیف آلودگی با افزایش عمق گسترش می‌یابد. در مناطق دیگر محتوی نفت با افزایش عمق کمتر می‌شود.

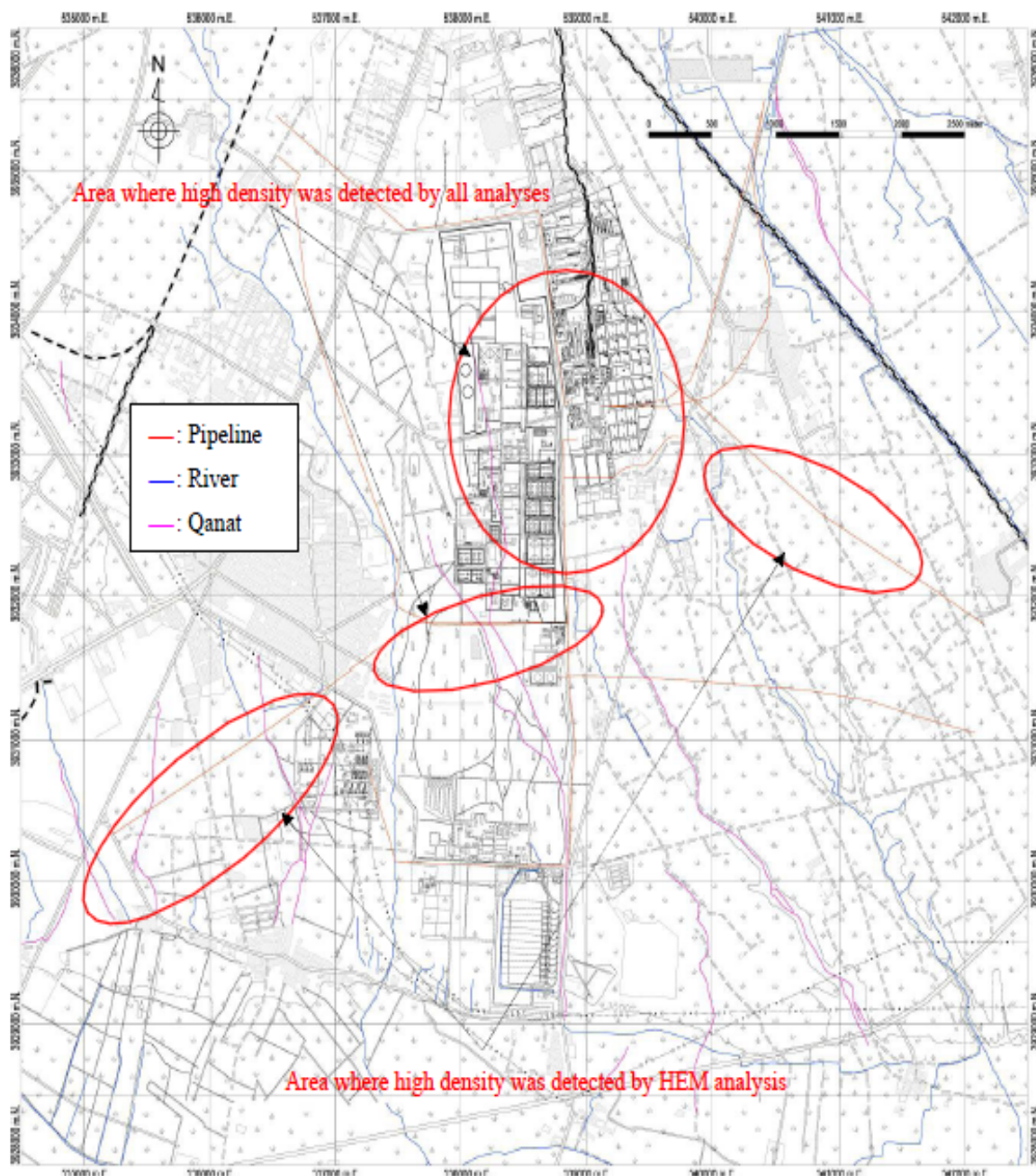
محدوده آلودگی شامل نفت غلظت پایین به طور وسیع در کل ناحیه ری گسترده شده است. آلودگی نفتی غلظت پایین از فاضلابی ناشی می‌شود که به سمت شرق و غرب پالایشگاه جریان دارد و همچنین از آب کشاورزی شامل نفت که از جنوب پالایشگاه جریان دارد. به علاوه، بر اساس نتایج آنالیز محتوی نفت خاک در اطراف کانال‌های قنات، هیچ نشانه‌ای وجود ندارد که آلودگی به وسیله یک کانال در مسیر قنات گسترده شده باشد.



شکل (۴۴-۵): توزیع محتوی نفت در آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co.,) (۲۰۰۶).



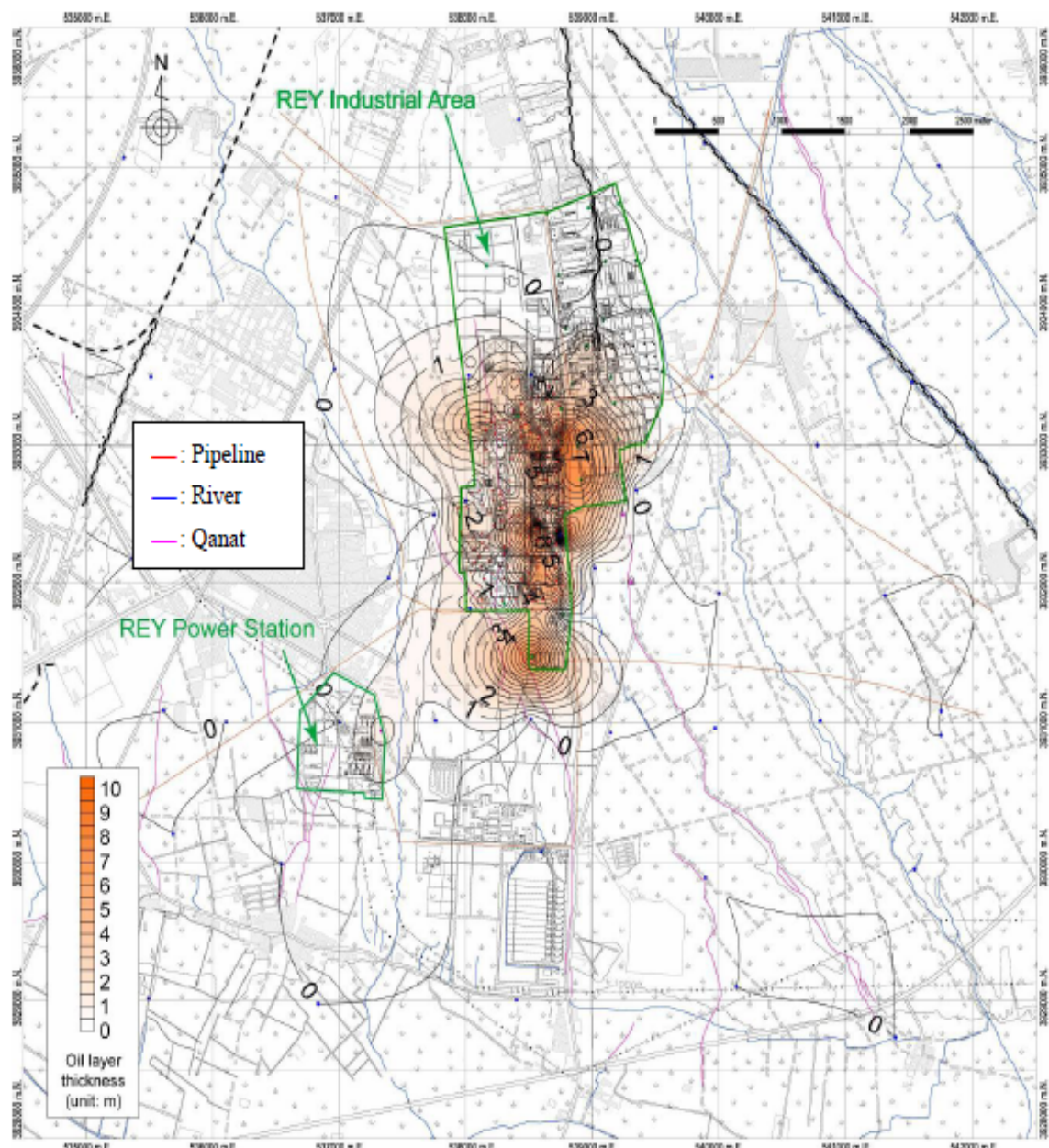
شکل (۵-۴۵): توزیع حداکثر مقدار تجمع مواد آلی فرار در کل ناحیه صنعتی ری
 (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۵-۴۶): نواحی با شدت بالای آلودگی مشخص شده از نتایج اندازه‌گیری محتوی نفت خاک
(Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۱۲-۲-۴. محدوده تخمین زده شده آلودگی با اندازه‌گیری ضخامت لایه نفت

حداکثر مقدار ضخامت لایه نفت در ناحیه صنعتی ری توزیع می‌شود (شکل ۵-۴۷).

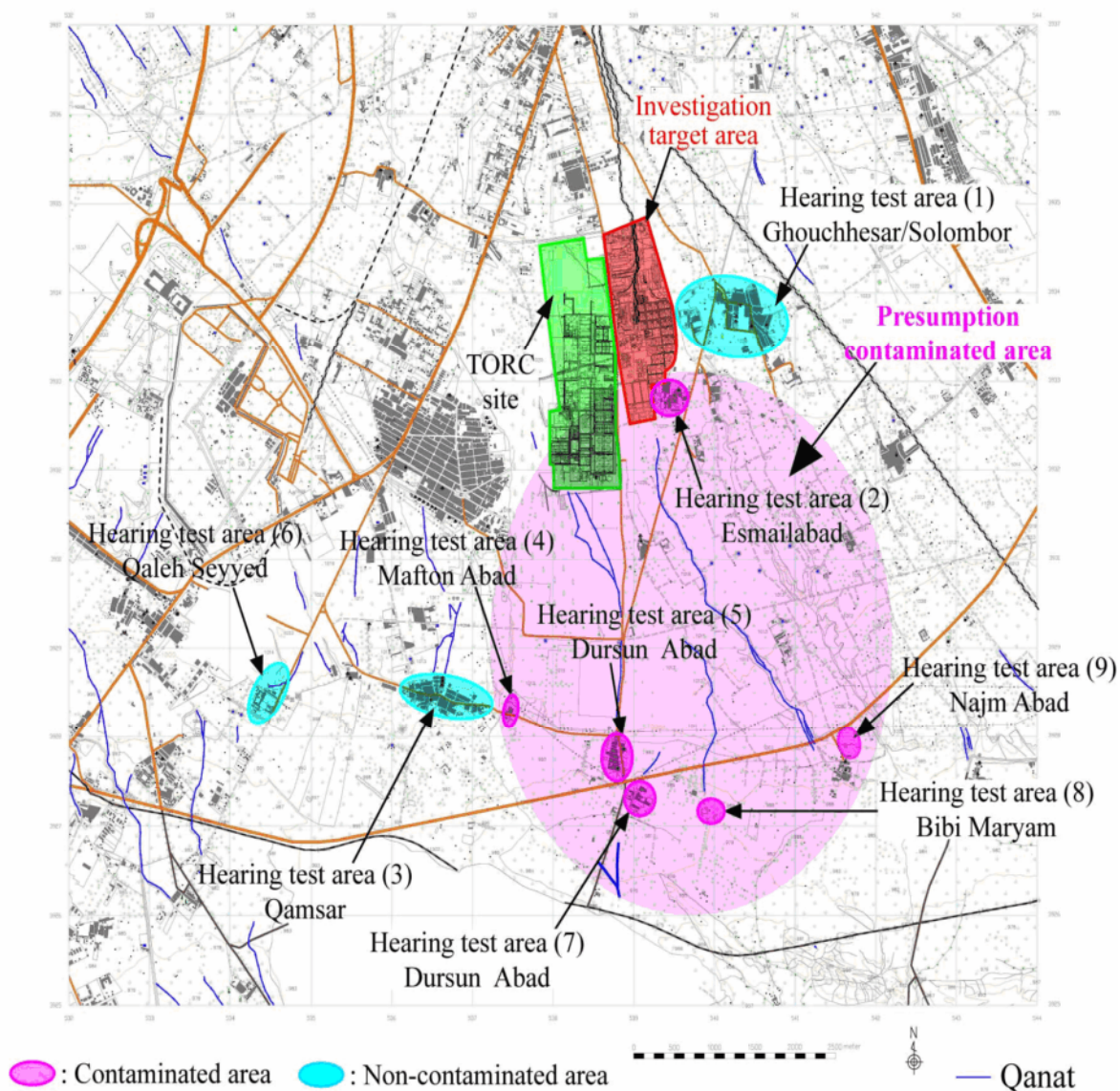


شکل (۵-۴۷): توزیع حداکثر ضخامت لایه نفت در کل ناحیه صنعتی ری (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

۵-۱۲-۵. محدوده حدس زده شده آلودگی از طریق پرسش از ساکنین محلی

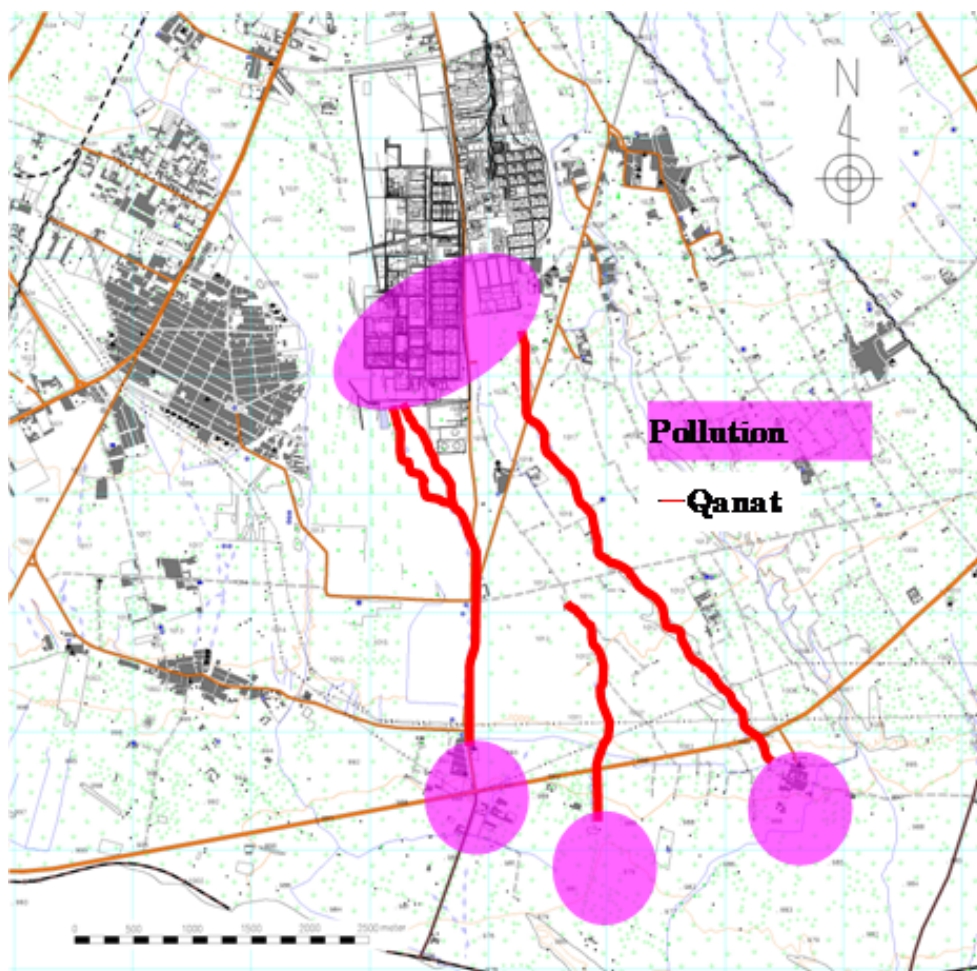
در ناحیه صنعتی ری در اطراف مخازن زیرزمینی آلودگی در چاه‌ها تأیید می‌شود. در دیگر

نواحی ری آلودگی عمدتاً در قنات‌ها تأیید می‌شود (شکل‌های ۵-۴۸ و ۵-۴۹).



شکل (۵-۴۸): ناحیه آلوده وسیع خاک و آب زیرزمینی به نفت (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

در کل ناحیه ری، پالایشگاه و ۷ شرکت صنعتی ری، نواحی به شدت آلوده با لایه نفت در چاه‌ها وجود دارند. آلودگی بالا به طور محلی در منطقه مجاور پالایشگاه و ۷ شرکت ری و مجاور ایستگاه پمپاژ یافت می‌گردد. مناطقی دیگر با آلودگی نفت پایین‌تر گزارش شده‌اند.



شکل (۵-۴۹): طرح شماتیک از گسترش آلودگی به وسیله قنات‌ها (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

فصل ششم

مدل سازی عددی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در آبخوان

تهران در کل ناحیه صنعتی ری

۱-۶. مقدمه

در زمان حاضر، در شرکت پالایش نفت تهران و مجاور آن، نفت به صورت لایه ای بر روی سطح آب زیرزمینی موجود است. بررسی های صحرایی نشان داده است که آلودگی ناحیه وسیعی را شامل می گردد و لایه نفت در بیشتر چاه های ناحیه مشاهده شده است. بر طبق این بررسی ها، بیش از ۱۴۴۰۰۰۰ متر مکعب نفت در سراسر محدوده شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی ری وجود دارد.

برای حل این مشکل زیست محیطی، در اولین مرحله باید منابع آلودگی را مشخص و از نشت نفت جلوگیری کرد. سپس باید یک طرح پاک سازی مناسب برای رفع آلودگی های نفتی موجود در ناحیه ارائه داد. اما قبل از این کار، درک فرآیندهای درگیر در انتقال واکنشی این آلاینده در محیط آبخانه ای و عوامل تأثیرگذار بر آن ها ضروری است. برای مدل سازی واقعی تر و جامع تر به هدف طراحی یک روش مناسب در پاک سازی سفره آب زیرزمینی از آلاینده های نفتی، در نظر گرفتن تمامی این فرآیندها ضروری خواهد بود.

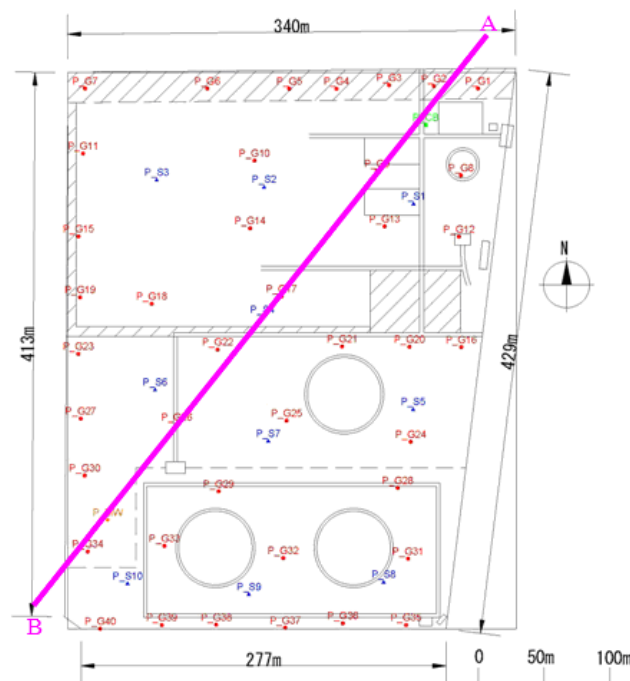
در این فصل سعی می شود، با توجه به شرایط ناحیه و داده های حاصل از اندازه گیری های صحرایی و داده های موجود در متون منتشر شده، مدل های جامع و کاملی برای هر منطقه ارائه شود تا از نتایج حاصل از آن ها بتوان برای طراحی یک روش مناسب پاک سازی استفاده نمود.

۲-۶. مدل سازی انتقال واکنشی گازوئیل در منطقه ایستگاه پمپاژ شرکت پالایش

نفت تهران

۱-۲-۶. تنظیم مدل و داده های ورودی

برای شبیه سازی انتقال واکنشی گازوئیل در منطقه ایستگاه پمپاژ شرکت پالایش نفت تهران یک مدل دو بعدی طراحی شد. چون اطلاعات مورد نیاز برای شبیه سازی انتقال واکنشی گازوئیل فقط در مورد مولفه های بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و زایلین موجود بود، مدل سازی فقط روی این مولفه ها انجام شد. شکل (۱-۶) منطقه ایستگاه پمپاژ را نشان می دهد. شکل (۲-۶) حوزه مدل دو بعدی استفاده شده در این شبیه سازی را نشان می دهد.

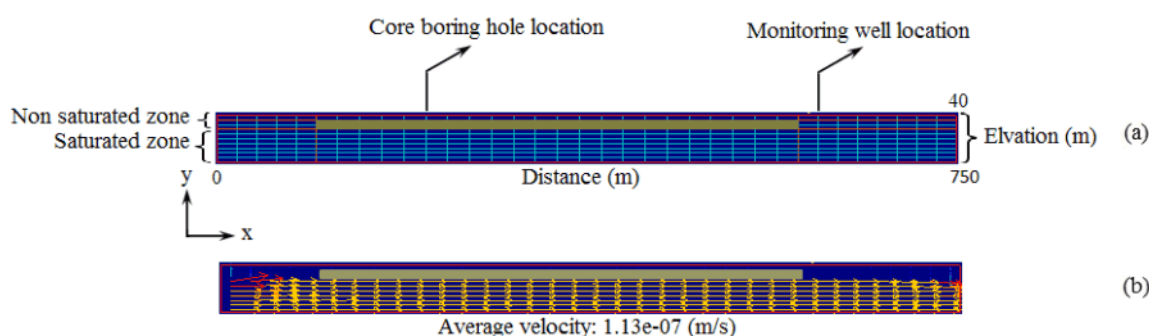


شکل (۱-۶): منطقه ایستگاه پمپاژ (Fusione Techno Solutions Co., 2006).



شکل (۶-۲): حوزه دوبعدی مدل استفاده شده برای شبیه‌سازی (مقطع عرضی A-B در شکل ۶-۱).

ابعاد مقطع عرضی مدل دو بعدی مذکور ۷۵۰ متر در امتداد افقی و ۴۰ متر در امتداد عمودی است که شامل ۳۵۰ حجم کنترلی می‌باشد (شکل ۶-۳).



شکل (۶-۳): مقطع عرضی دو بعدی: (a) شبکه حجم محدود، (b) بردارهای سرعت.

شرایط اولیه و مرزی زیر برای مدل فوق تعیین گردید:

- غلظت اولیه صفر در کلیه حجم های کنترلی در نظر گرفته شد. این مقدار توزیع آلاینده

محلول را در حوزه جریان در شروع مدل‌سازی توصیف می‌کند ($C(x, 0) = 0, \quad x \geq 0$).

- غلظت ثابت برابر با غلظت آلاینده در مرز ورودی مدل در نظر گرفته شد

$$(C(0, t) = C_0, \quad t > 0)$$

- غلظت ثابت برابر با صفر در مرز خروجی مدل تعیین شد ($C(\infty, t) = 0, \quad t \geq 0$).

سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض شد. اختلاف هد هیدرولیکی بین مرزهای

چپ و راست مدل ۳/۱ متر در نظر گرفته شد. مقدار متوسط بارش (تغذیه) ۰/۲۵ متر در سال برای

مرز بالایی منظور شد.

۱۲ متر در بالا ی مقطع به عنوان منطقه اشباع نشده و قسمت زیرین مقطع، ناحیه اشباع شده با تخلخل ثابت ۰/۴۱ فرض شد. برای سادگی از مولفه افقی سرعت در منطقه اشباع نشده چشم پوشی شد و جریان فقط در جهت عمودی در این منطقه فرض شد. مقادیر غلظت تمام گونه ها بر حسب میلی گرم بر لیتر ارائه شده اند. داده های ورودی مدل در جداول (۶-۱) تا (۶-۳) آورده شده اند.

جدول (۶-۱): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه سازی دو بعدی.

مرجع	مقدار	گسسته سازی فضایی و زمانی
	۷۵۰ متر	طول مدل در امتداد X
	۴۰ متر	عرض مدل در امتداد Y
	۳۵۰	تعداد المان های حجمی
	۵۰ سال	مدت زمان شبیه سازی
	۵۰	تعداد گام های زمانی
	۱۰۰۰	تعداد تکرار
مرجع	مقدار	پارامترهای جریان و انتقال
	$8/07 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	هدایت هیدرولیکی در امتداد X
	$8/07 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	هدایت هیدرولیکی در امتداد Y
	$1/7 \text{ gr/cm}^3$	چگالی خشک خاک
	۰/۴۱	تخلخل
(Park and Juan, 2000)	$79/4 \text{ L/kg}$	ضریب توزیع بنزن (K_{oc})
(Park and Juan, 2000)	251 L/kg	ضریب توزیع تلوئن (K_{oc})
(Park and Juan, 2000)	537 L/kg	ضریب توزیع اتیل بنزن (K_{oc})
(Park and Juan, 2000)	586 L/kg	ضریب توزیع زایلن (K_{oc})
	۰/۰۰۱	مقدار کربن آلی خاک (f_{oc})
	۳۴/۵ متر	هد ثابت در مرز سمت چپ مدل
	۳۱/۴ متر	هد ثابت در مرز سمت راست مدل
	۱۵ متر	ضریب پراکندگی طولی (α_L)
	۱ متر	ضریب پراکندگی عرضی (α_T)
(Essaid et al., 2003)	$4/86 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	ثابت سرعت انحلال بنزن
(Schafer et al., 2005)	$1/16 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	ثابت سرعت انحلال تلوئن
(Essaid et al., 2003)	$6/36 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	ثابت سرعت انحلال اتیل بنزن

(Essaid et al., 2003)	$5/67 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	ثابت سرعت انحلال زایلن
(Park and Juan, 2000)	1780 mg/L	ماکزیمم قابلیت انحلال بنزن
(Park and Juan, 2000)	520 mg/L	ماکزیمم قابلیت انحلال تلوئن
(Park and Juan, 2000)	152 mg/L	ماکزیمم قابلیت انحلال اتیل بنزن
(Park and Juan, 2000)	198 mg/L	ماکزیمم قابلیت انحلال زایلن
(Goudar and Strevett, 1998)	$2/690 \text{ mg/L}$	ثابت نیمه اشباع بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$3/253 \text{ mg/L}$	ثابت نیمه اشباع تلوئن
(Goudar and Strevett, 1998)	$1/288 \text{ mg/L}$	ثابت نیمه اشباع اتیل بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$4/681 \text{ mg/L}$	ثابت نیمه اشباع زایلن
(Goudar and Strevett, 1998)	$5/69 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	حداکثر نرخ رشد ویژه برای بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$1/02 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	حداکثر نرخ رشد ویژه برای تلوئن
(Goudar and Strevett, 1998)	$5/86 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	حداکثر نرخ رشد ویژه برای اتیل بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$6/69 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	حداکثر نرخ رشد ویژه برای زایلن
(Goudar and Strevett, 1998)	$0/477 \text{ mg/mg}$	بازده ویژه واکنش برای بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$0/427 \text{ mg/mg}$	بازده ویژه واکنش برای تلوئن
(Goudar and Strevett, 1998)	$0/272 \text{ mg/mg}$	بازده ویژه واکنش برای اتیل بنزن
(Goudar and Strevett, 1998)	$0/331 \text{ mg/mg}$	بازده ویژه واکنش برای زایلن
	۱	ضریب استوکیومتری بنزن
	۱	ضریب استوکیومتری تلوئن
	۱	ضریب استوکیومتری اتیل بنزن
	۱	ضریب استوکیومتری زایلن
	0/41	ضریب استوکیومتری اکسیژن در واکنش با بنزن
	0/35	ضریب استوکیومتری اکسیژن در واکنش با تلوئن
	0/3	ضریب استوکیومتری اکسیژن در واکنش با اتیل بنزن
	0/3	ضریب استوکیومتری اکسیژن در واکنش با زایلن

عامل تاخیر بنزن	۱/۳۴	
عامل تاخیر تلوئن	۲/۰۶	
عامل تاخیر اتیل بنزن	۳/۳۱	
عامل تاخیر زایلن	۳/۵۱	
نرخ تخریب بیومس	$1/175 \times 10^{-5} s^{-1}$	
شرایط مرزی برای انتقال		
بنزن	ورودی: غلظت ثابت	خروجی: گرادیان غلظت مساوی با صفر
تلوئن	• mg/L	–
اتیل بنزن	• mg/L	–
زایلن	• mg/L	–
اکسیژن	• mg/L	–
بیومس	• mg/L	–
شرایط اولیه		
بنزن	• mg/L	
تلوئن	• mg/L	
اتیل بنزن	• mg/L	
زایلن	• mg/L	
اکسیژن	• mg/L	
بیومس	• mg/L	

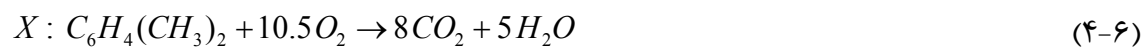
جدول (۲-۶): کسر وزنی گازوئیل هوازده (Park and Juan, 2000).

آروماتیک			
بنزن	تلوئن	اتیل بنزن	زایلن
۰/۰۰۸۰	۰/۰۹۸۰	۰/۰۳۰۰	۰/۱۳۰۰

جدول (۳-۶): نتایج تجزیه کیفیت آب (Fusione Techno Solutions Co., 2006).

پارامترهای اندازه گیری شده			
ضخامت لایه نفت	محتوی نفت (mg/L)	pH	
۰	۷۵	۷/۱۹	چاه نظارتی P_MW
۸/۵	۸۲	–	گمانه حفاری P_CB

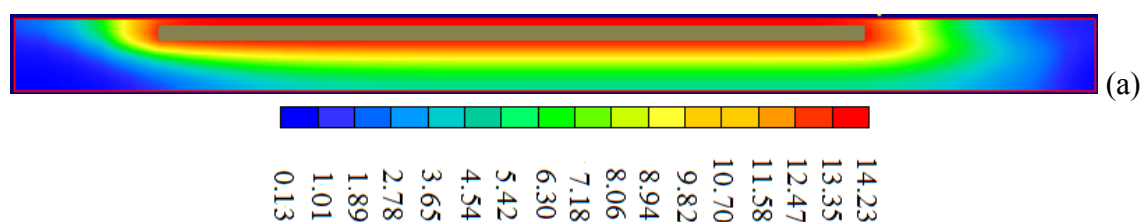
در این شبیه سازی فرض می شود که مولفه های گازوئیل تحت شرایط هوازی به صورت بیولوژیکی تجزیه می شوند. واکنش های اکسیداسیون ترکیبات بنزن، تلوئن، اتیل بنزن و زایلن (BTEX) به ترتیب به صورت زیر بیان می شوند (modified from Anid et al. 1993, Agah et al., 2011):

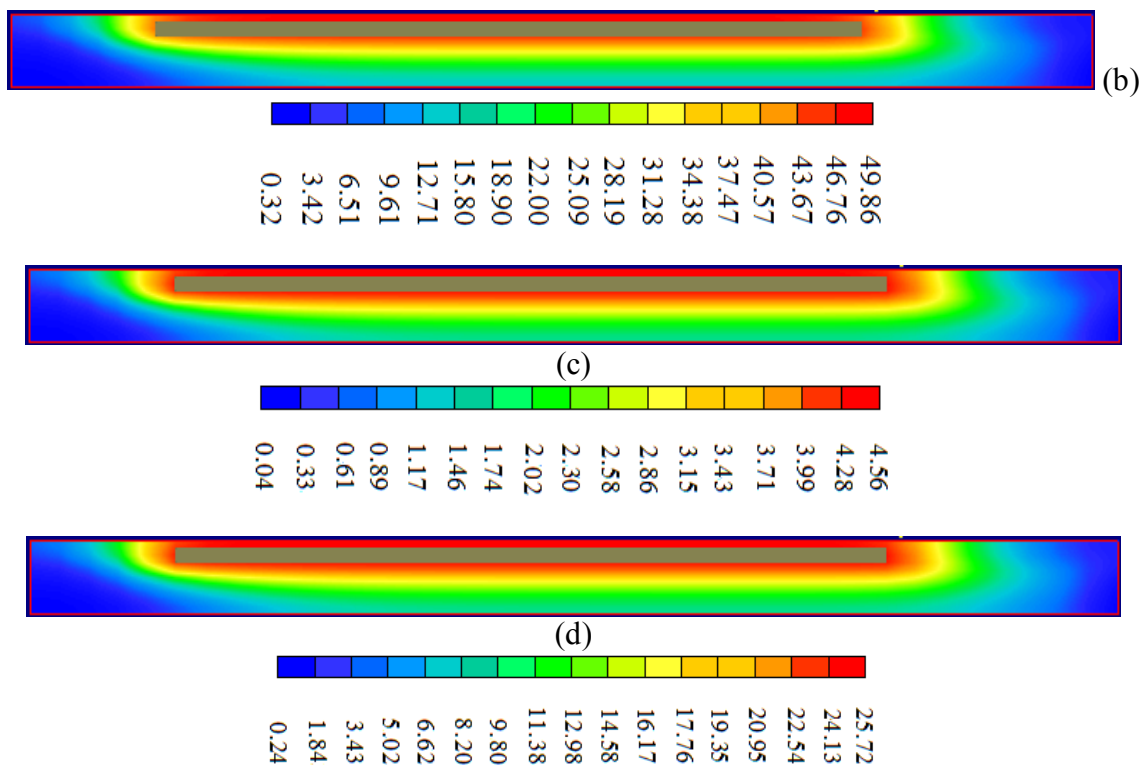


۲-۲-۶. نتایج شبیه سازی دو بعدی

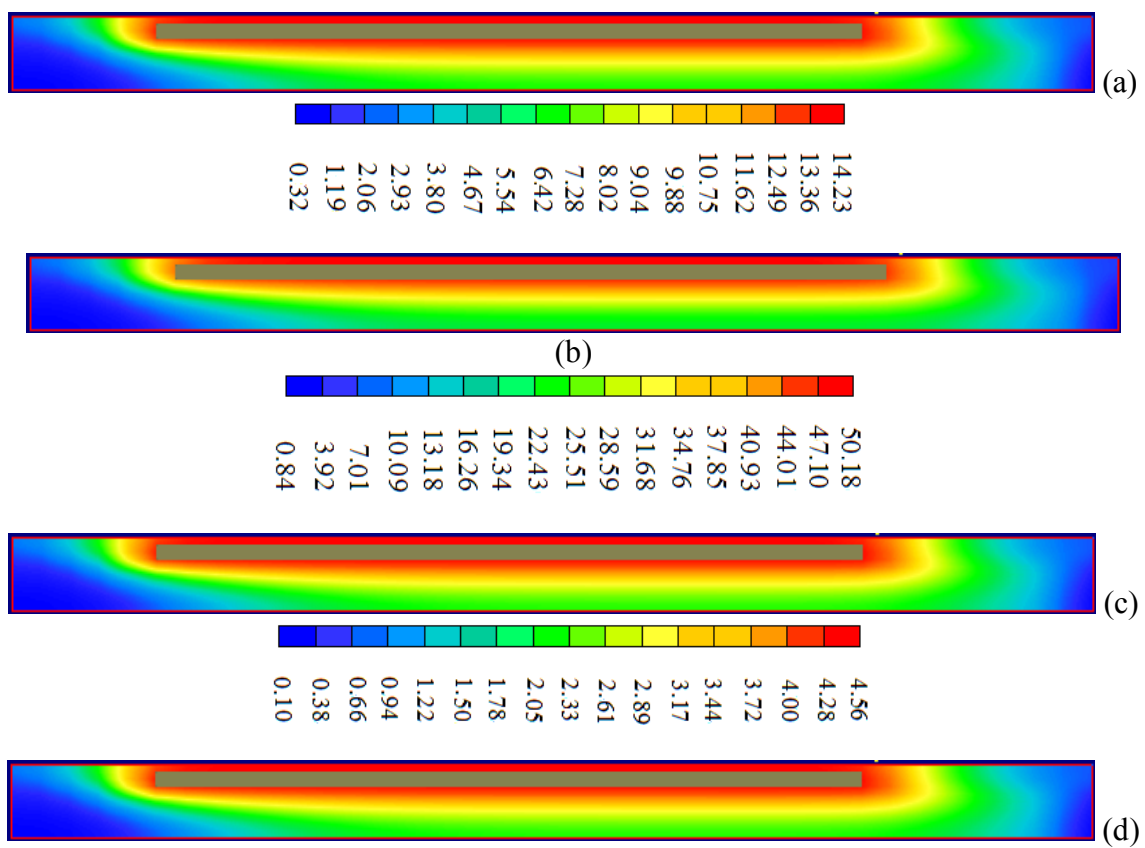
۲-۲-۶-۱. سناریو اول: مدل دوبعدی غیر واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی و پهنرفت

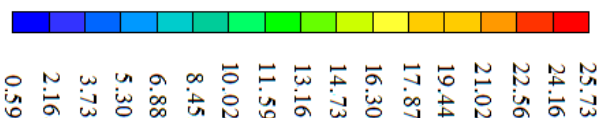
در مرحله اول، مدل در حالت غیر واکنشی اجرا گردید. در این مرحله از مدل سازی فقط دو فرآیند پراکندگی و پهنرفت در مکانیزم انتقال در نظر گرفته شد. بدین صورت مشخص گردید که اگر هیچ واکنشی ضمن انتقال آلاینده صورت نگیرد، پلوم آلاینده تا چه مسافتی می تواند در محیط گسترده شود. نتایج مدل سازی در دو گام زمانی ۳۶ سال (که داده های صحرایی در این زمان موجود است) و ۵۰ سال برای پیش بینی رفتار پلوم آلاینده در آینده در شکل های (۴-۶) و (۵-۶) نشان داده شده است.





شکل (۶-۴): مقطع دو بعدی شبیه‌سازی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تولوئن، اتیل‌بنزن و زایلن تحت شرایط غیر واکنشی بعد از گذشت ۳۶ سال.



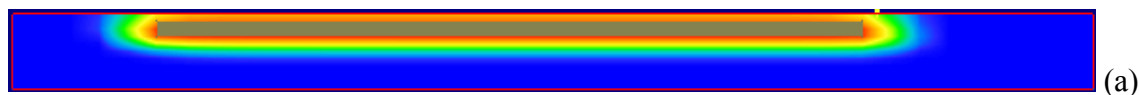


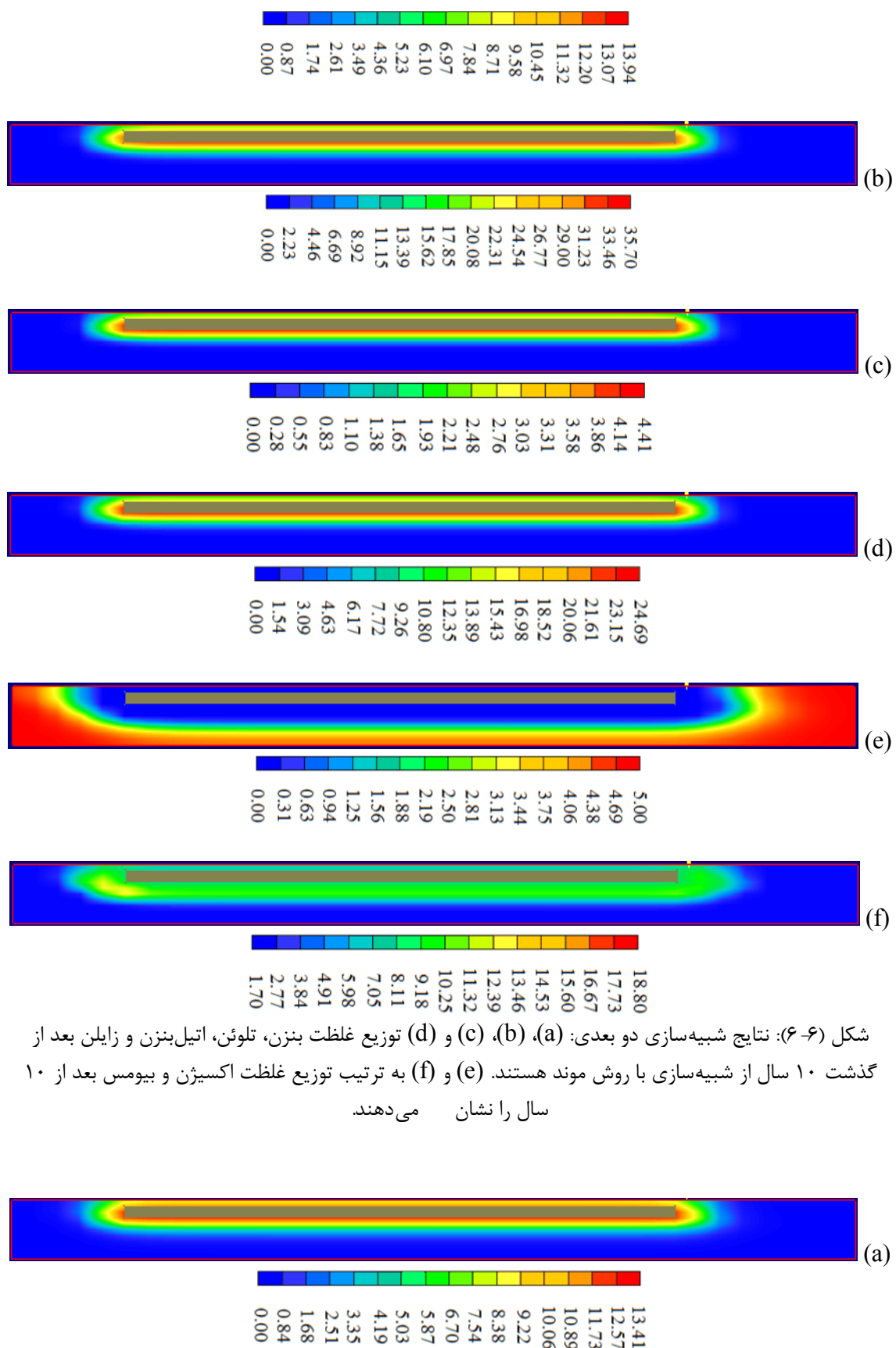
شکل (۶-۵): مقطع دو بعدی شبیه‌سازی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل‌بنزن و زایلن تحت شرایط غیر واکنشی بعد از گذشت ۵۰ سال.

۶-۲-۲. سناریو دوم: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت،

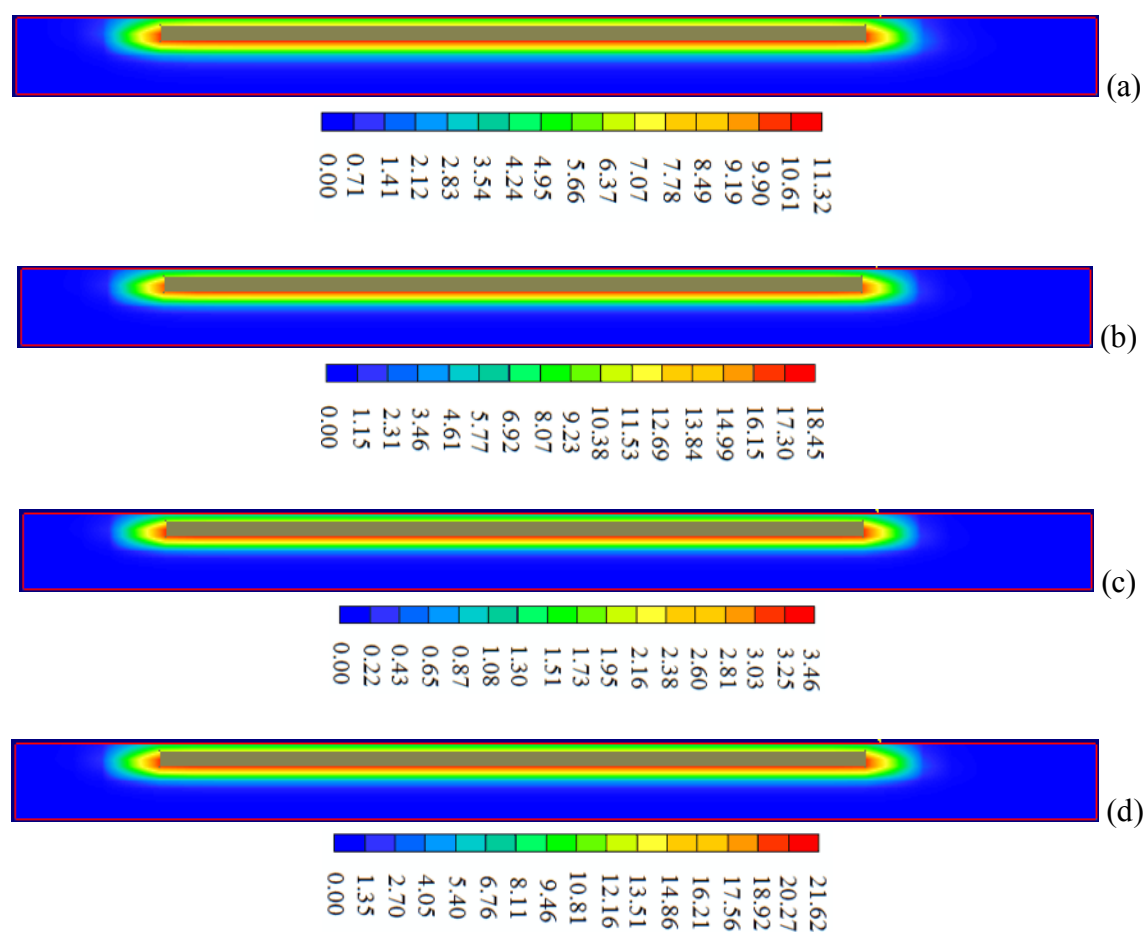
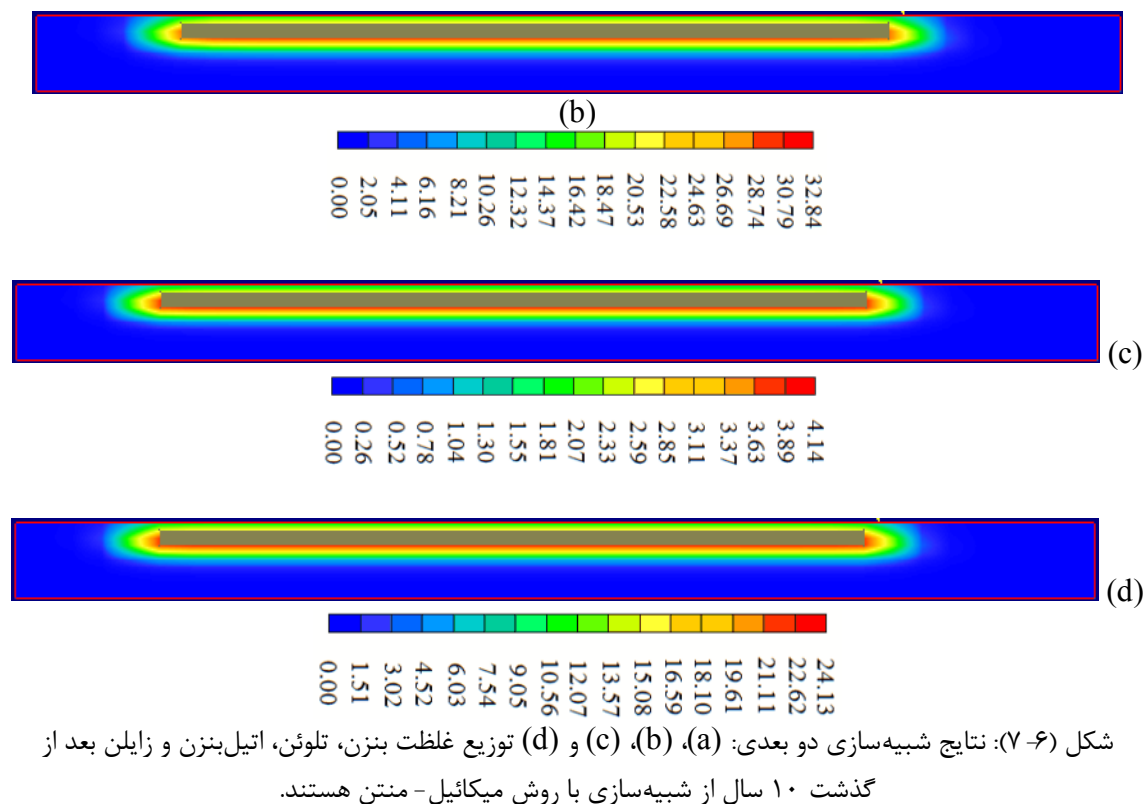
جذب و تجزیه بیولوژیکی

در این شبیه‌سازی، برای توصیف فرآیند تجزیه بیولوژیکی شامل رشد میکروبی از سینتیک موند استفاده شد. برای بکارگیری این سینتیک، یک گروه از میکروب‌های غیر متحرک هوازی اکسید کننده ترکیبات BTEX با غلظت پایین در محیط در نظر گرفته شد. به طور شاخص، تعداد سلول‌های میکروبی با مرتبه 10^6 بر گرم مواد سفره فرض شد. با فرض یک دانسیته بلوک $1/7 \text{ gr/cm}^3$ برای مواد سفره، غلظت میکروبی تقریباً $1/7 \text{ mg/L}$ تخمین زده شد. در مدل حاضر، فرآیند جذب به صورت خطی شبیه‌سازی گردید. در این مرحله از مدل سازی، علاوه بر سینتیک موند از سایر مدل‌های سینتیکی از قبیل سینتیک میکائیل-منتن، سینتیک مرتبه اول و سینتیک مرتبه صفر نیز استفاده شد و نتایج آن‌ها با نتایج حاصله از روش موند مقایسه گردید. روش‌های دیگر به یک سری پارامترهای سینتیکی نیاز دارند که نمی‌توانند از روی پارامترهای موند تخمین زده شوند. بدین منظور، پارامترهای مجهول این روش‌ها طوری انتخاب می‌شوند که طول پلوم حاصل از آن‌ها بعد از گذشت ۱۰ سال معادل طول پلوم شبیه سازی شده با روش موند در مدت زمان مشابه باشد (شکل‌های (۶-۶) تا (۶-۹)). توانایی پیش‌بینی روش‌های مختلف به وسیله مقایسه پلوم‌های شبیه سازی شده ارزیابی می‌گردد.

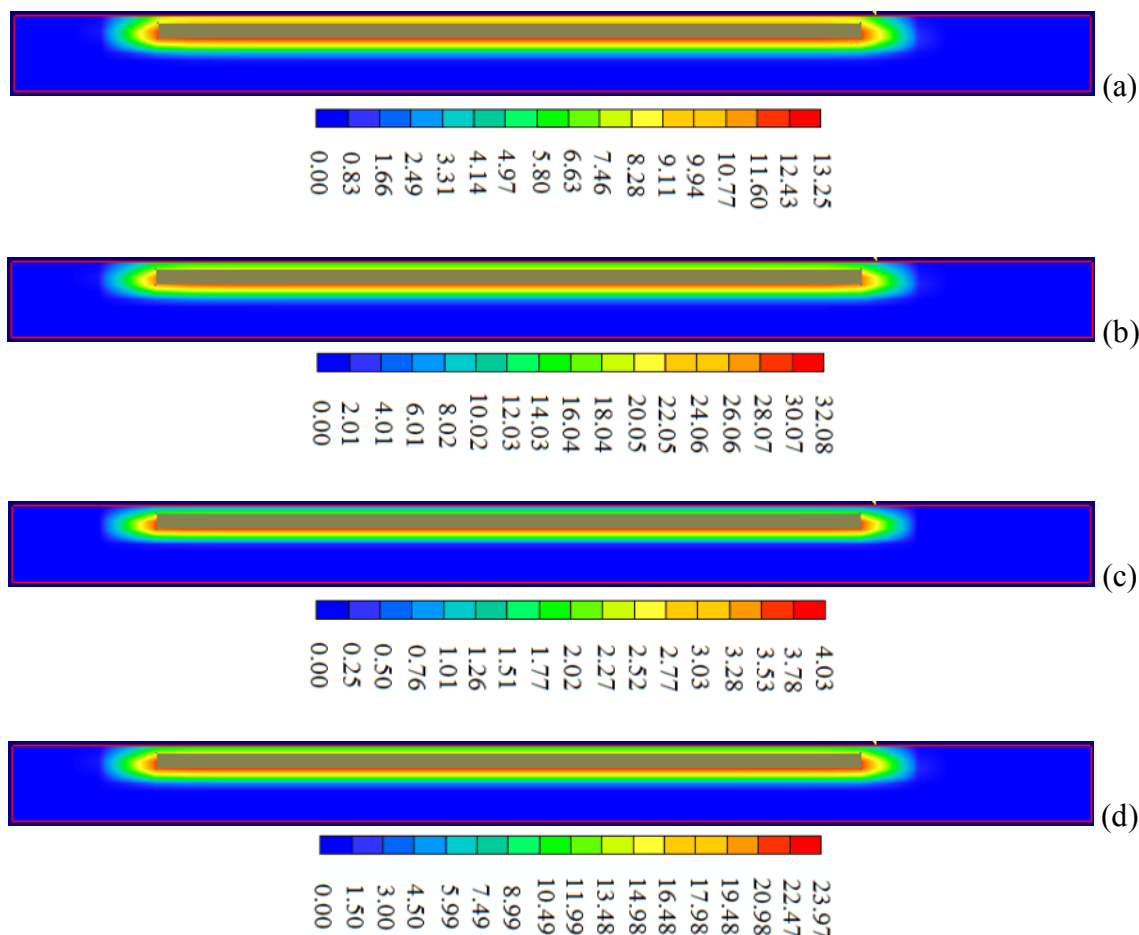




شکل (۶-۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه‌سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۱۰ سال را نشان می‌دهند.

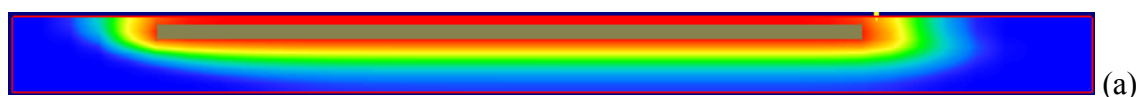


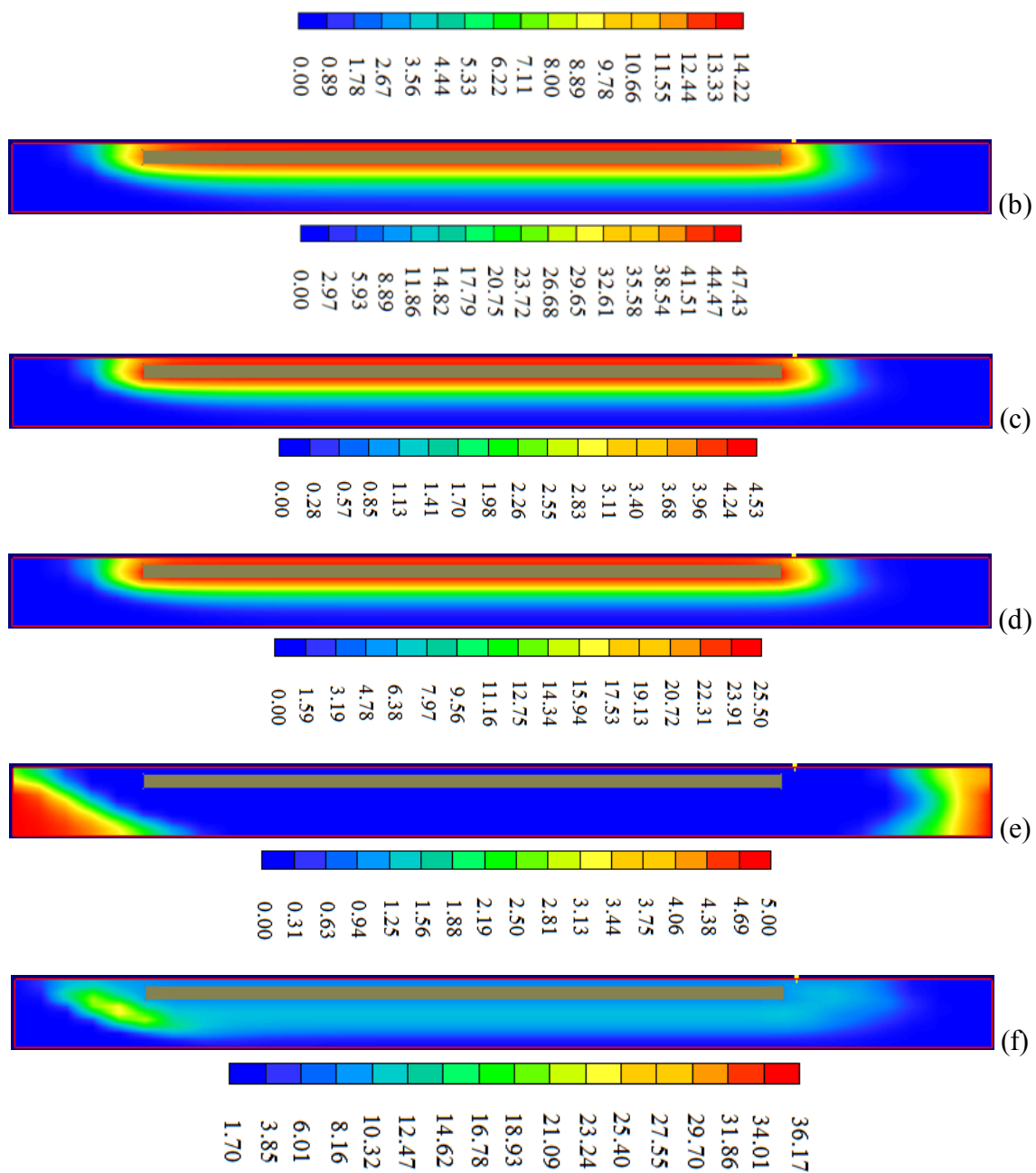
شکل (۶-۸): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه‌سازی با روش مرتبه اول هستند.



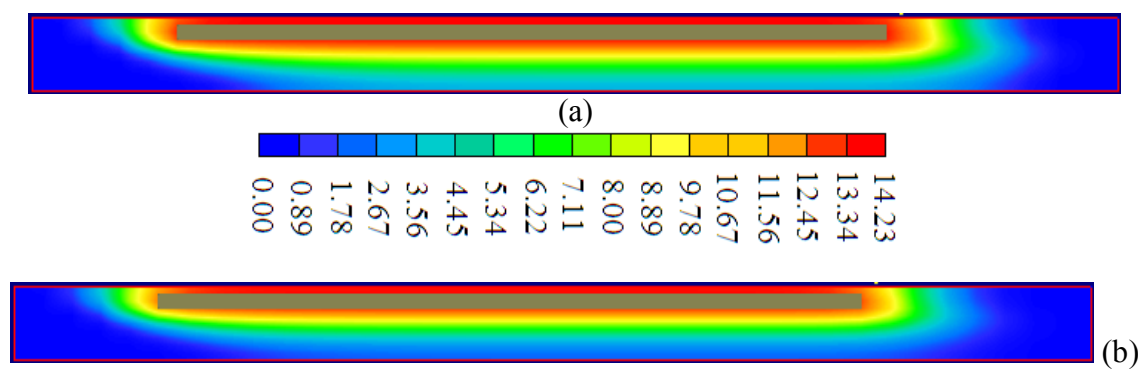
شکل (۶-۹): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۱۰ سال از شبیه‌سازی با روش مرتبه صفر هستند.

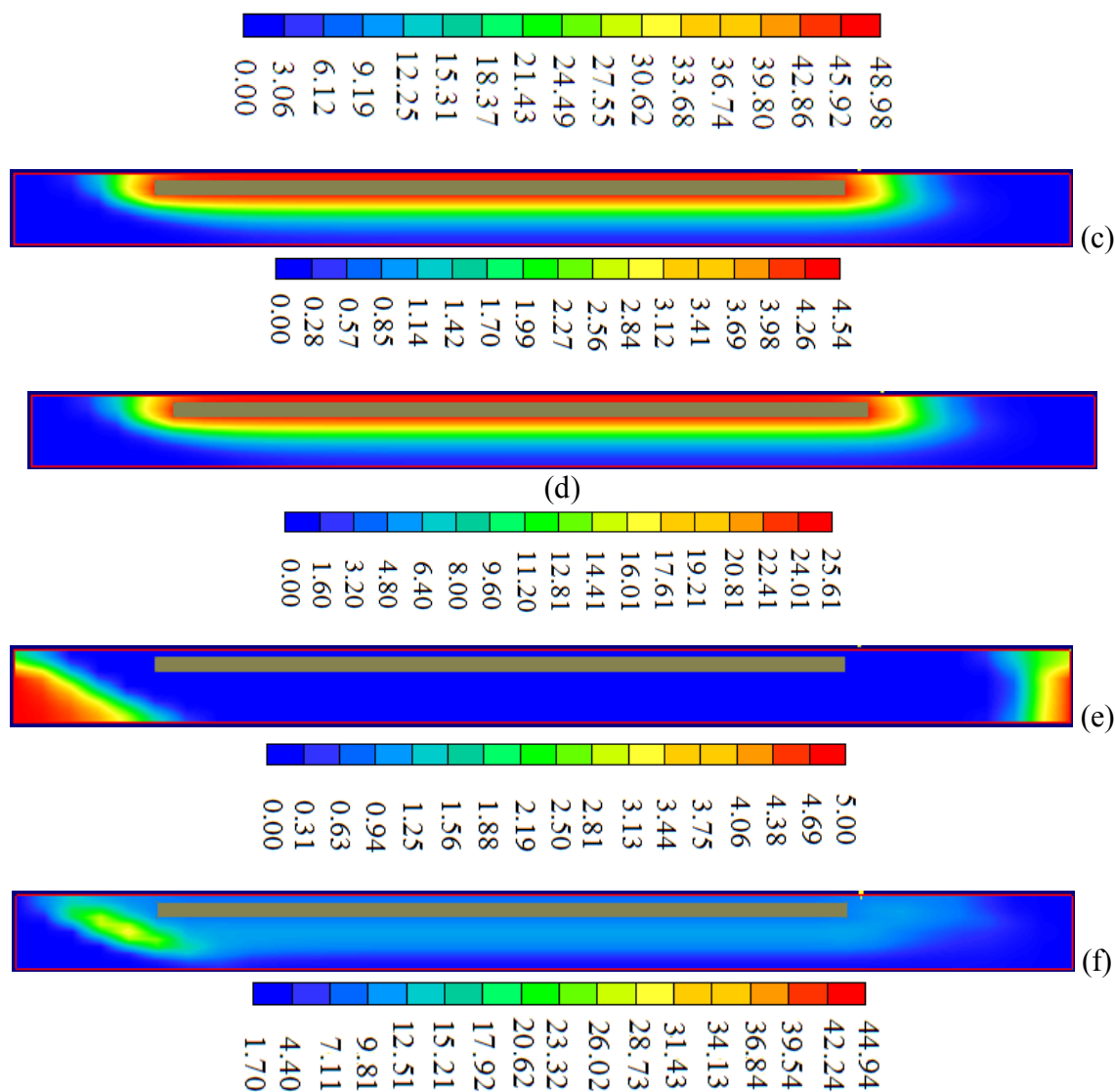
با در نظر گرفتن سینتیک موند، بیشترین جمعیت میکروبی و در نتیجه پتانسیل اصلی تجزیه بیولوژیکی در مرز بالایی آلودگی جایی که آلاینده ها با اکسیژن توسط فرآیند پهنرفت مخلوط می شوند، توسعه می یابد (شکل های ۶-۱۰ و ۶-۱۱). در پایین دست منبع آلودگی، تجزیه فقط در منطقه اختلاط توسط فرآیند پراکندگی در حاشیه پلوم رخ می دهد. در خارج ناحیه پلوم، به واسطه نبود آلاینده ها هیچ تجزیه ای اتفاق نمی افتد. اکسیژن در منطقه داخلی پلوم تخلیه می شود (قسمت (e) در شکل های ۶-۱۰ و ۶-۱۱).





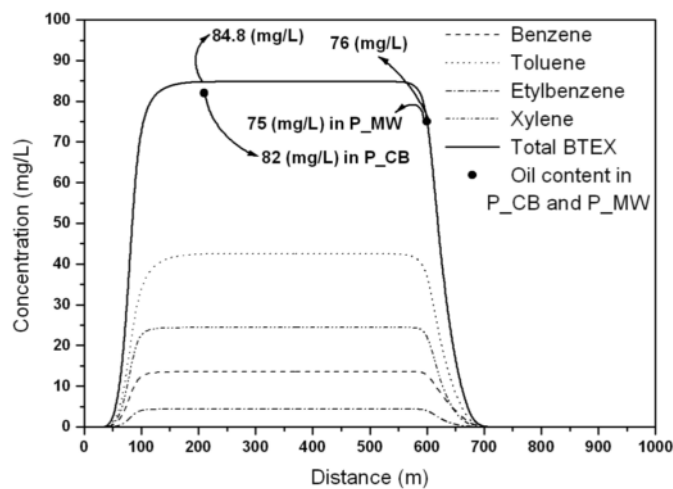
شکل (۶-۱۰): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه‌سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۳۶ سال را نشان می‌دهند.





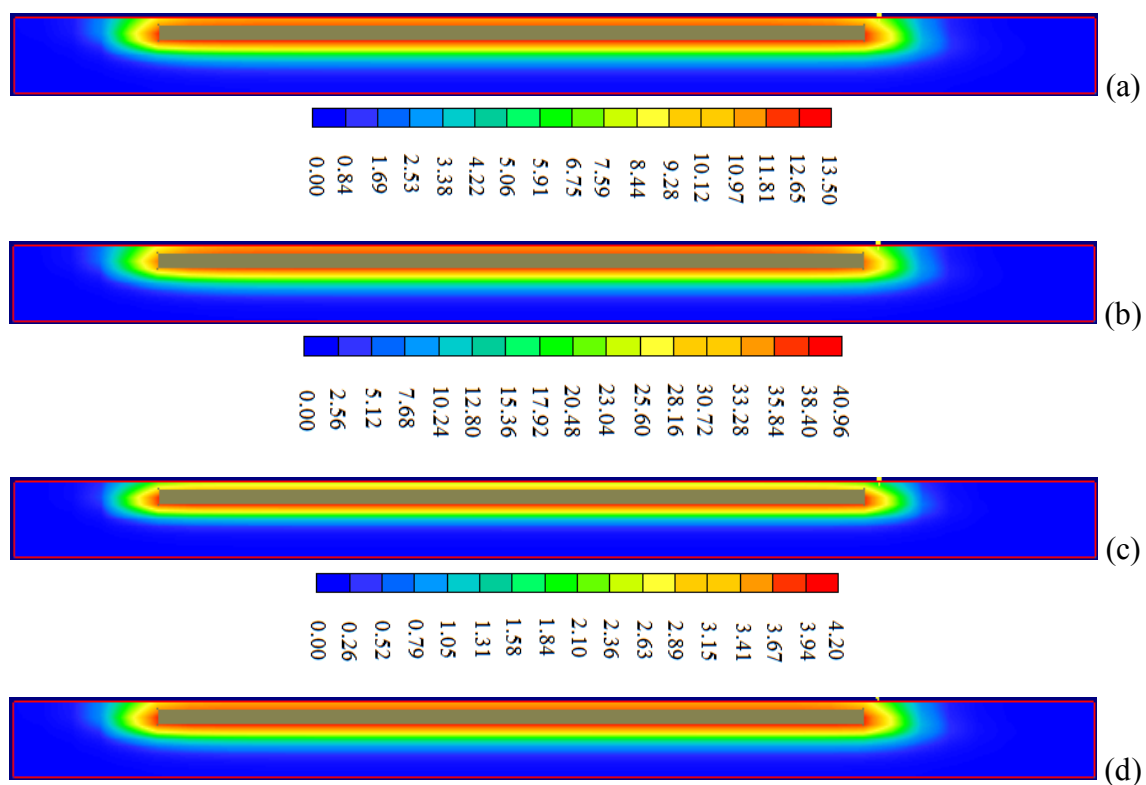
شکل (۶-۱۱): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با روش موند هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می‌دهند.

در شکل (۶-۱۲) نتایج بدست آمده از مدل عددی با لحاظ سینتیک موند با داده‌های صحرایی در محل‌های گمانه حفاری و چاه نظارتی بعد از گذشت ۳۶ سال مقایسه گردید. مقایسه نشان می‌دهد که سینتیک موند به خوبی قادر به شبیه‌سازی رفتار پلوم BTEX است. اختلاف کوچک بین نتایج مدل و داده‌های صحرایی به این دلیل است که فقط ترکیبات BTEX در شبیه‌سازی در نظر گرفته شده و از دیگر ترکیبات موجود در گازوئیل چشم‌پوشی شده است.



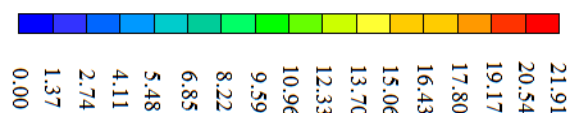
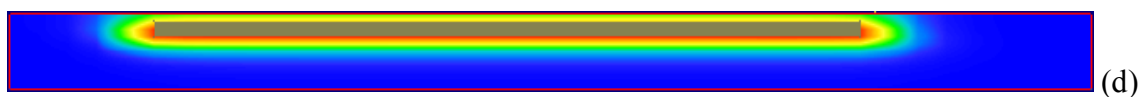
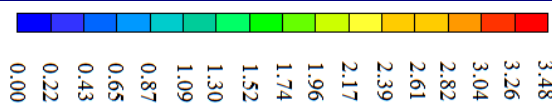
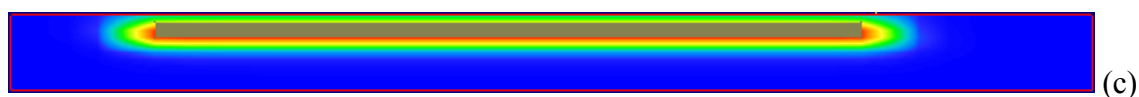
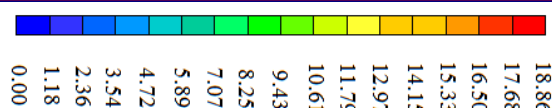
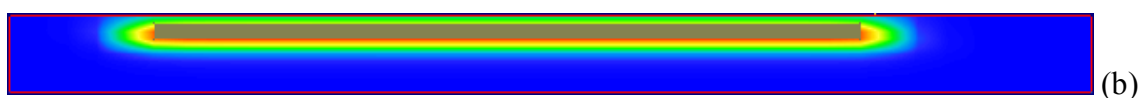
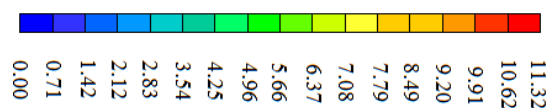
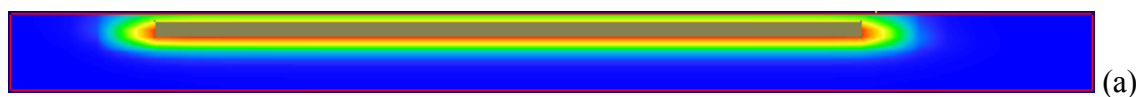
شکل (۶-۱۲): مقایسه نتایج بدست آمده از سینتیک موند و داده‌های صحرایی در گمانه حفاری و چاه نظارتی بعد از ۳۶ سال.

روش های سینتیکی میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر در مقایسه با سینتیک موند، غلظت آلاینده ها را کمتر تخمین می‌زنند. دلیل اصلی این موضوع، آن است که تمامی این روش‌ها جمعیت می کروبی و قابلیت دسترسی اکسیژن را در مدل در نظر نمی گیرند (شکل های ۶-۱۳ تا ۶-۱۵).

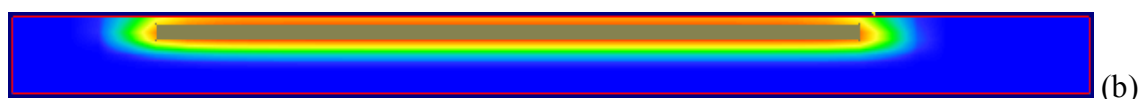
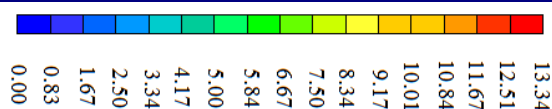
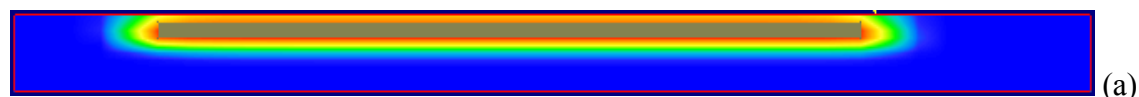


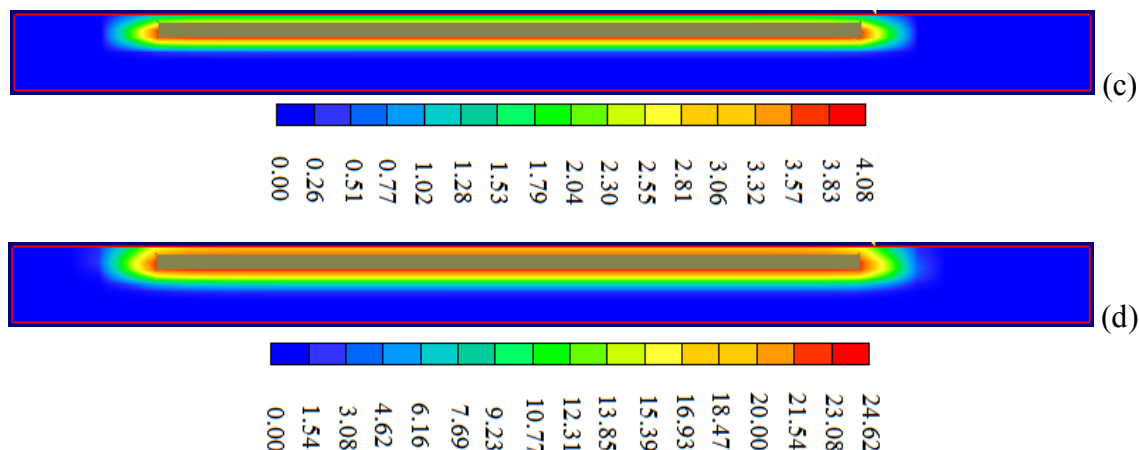


شکل (۶-۱۳): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه‌سازی با سینتیک میکائیل- منتن.



شکل (۶-۱۴): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه‌سازی با سینتیک مرتبه اول.





شکل (۶-۱۵): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلون، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۳۶ سال از شبیه‌سازی با سینتیک مرتبه صفر.

پیش‌بینی همه‌روش‌های سینتیکی به وسیله طول و غلظت پلوم‌های شبیه‌سازی شده ارزیابی گردید. پلوم‌های پیش‌بینی شده با استفاده از روش‌های میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر کوتاه‌تر و کم‌عرض‌تر از پلوم‌های شبیه‌سازی شده با سینتیک موند هستند. در مقایسه با روش موند، سایر روش‌ها معمولاً طول پلوم را کمتر تخمین می‌زنند. روش سینتیک مرتبه اول، فرآیند تجزیه بیولوژیکی را بیشتر تخمین می‌زند، در نتیجه پلوم با گذشت زمان بدون تغییر می‌ماند.

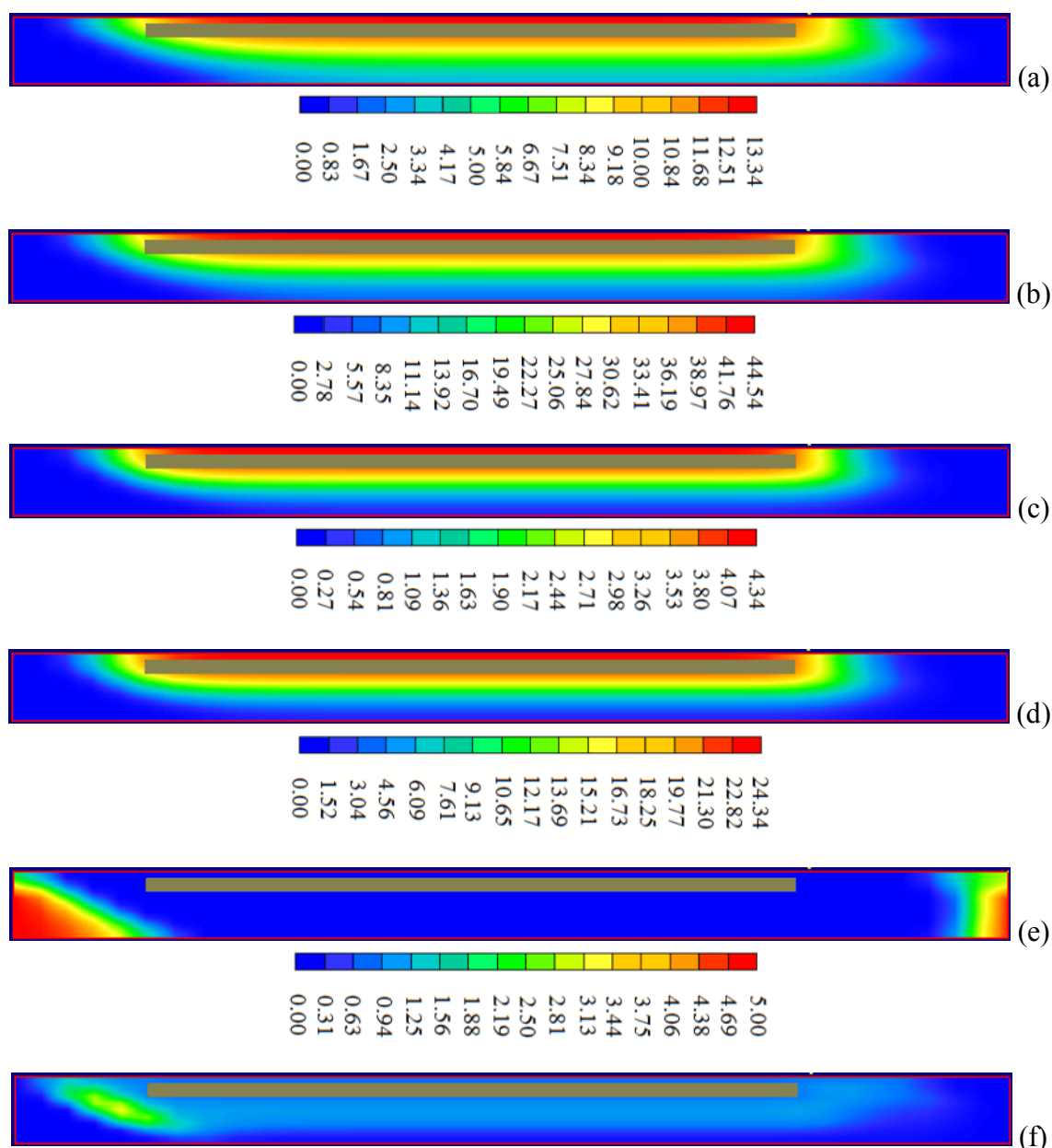
روش‌های سینتیکی میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر برای شبیه‌سازی سفره‌های آب زیرزمینی که در آن‌ها فرآیندهای بیولوژیکی نقش مهم بر تحول و انتقال آلاینده‌ها دارند، مناسب نخواهند بود.

علاوه بر این، مدل‌های سینتیکی مرتبه اول و مرتبه صفر فقط بر روی بخشی از طیف غلظت آلاینده‌های موجود در سفره معتبر هستند. لذا، در چنین مواردی روش سینتیک موند ممکن است نتایج دقیق‌تری به واسطه در نظر گرفتن جمعیت میکروبی و اکسیژن به عنوان الکترون‌گیرنده فراهم سازد.

۶-۲-۳. سناریو سوم: مدل دو بعدی واکنشی با فرض این که بعد از ۳۶ سال منابع

آلودگی از سطح زمین رفع می‌گردد

در سناریو سوم، مدل با این فرض اجرا گردید که منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین رفع می‌شوند. بنابراین، بعد از این مدت هیچ نشتی از سطح زمین رخ نمی‌دهد اما هیچ روش پاک سازی برای خاک و آب زیرزمینی آلوده اجرا نمی‌شود. در این مورد، خاک آلوده به عنوان منبع آلودگی در بالای سطح آب زیرزمینی رفتار می‌کند. شبیه سازی برای توصیف فرآیندهای کنترل کننده انتقال واکنشی ترکیبات BTEX اجرا شد. نتایج نشان می‌دهند که حذف منابع آلودگی باعث کاهش غلظت ترکیبات BTEX می‌گردد (شکل ۶-۱۶).



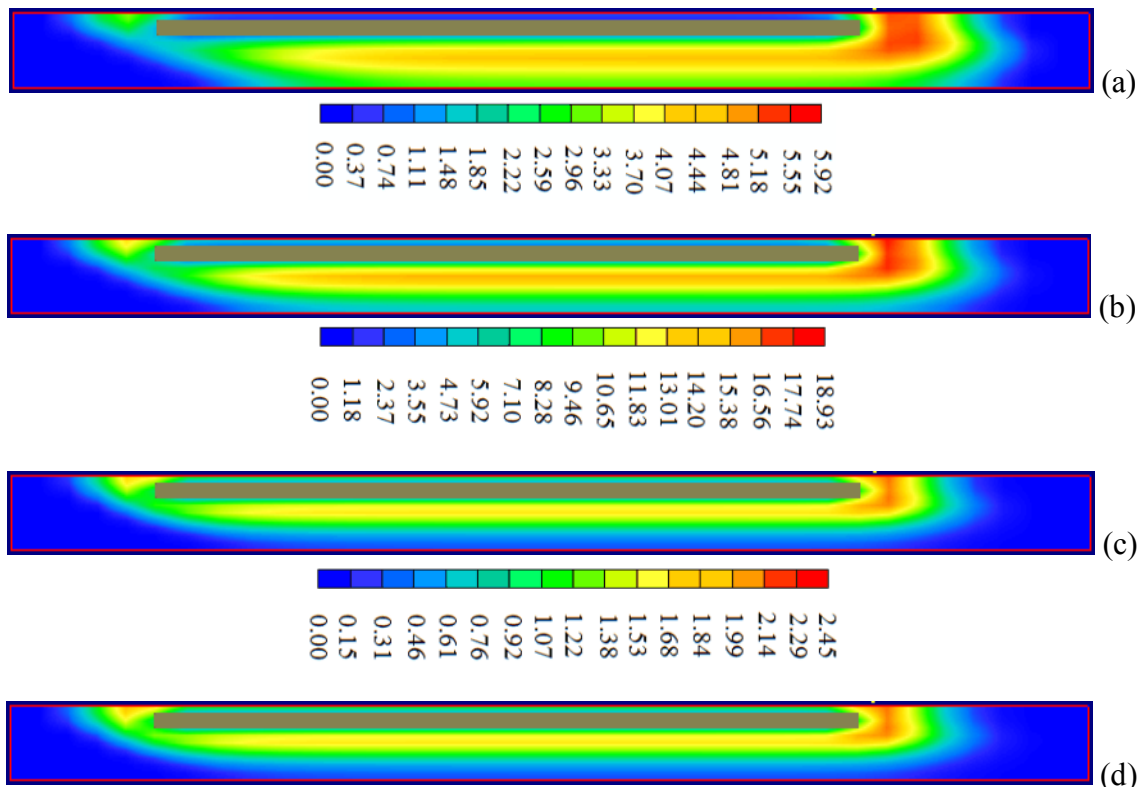


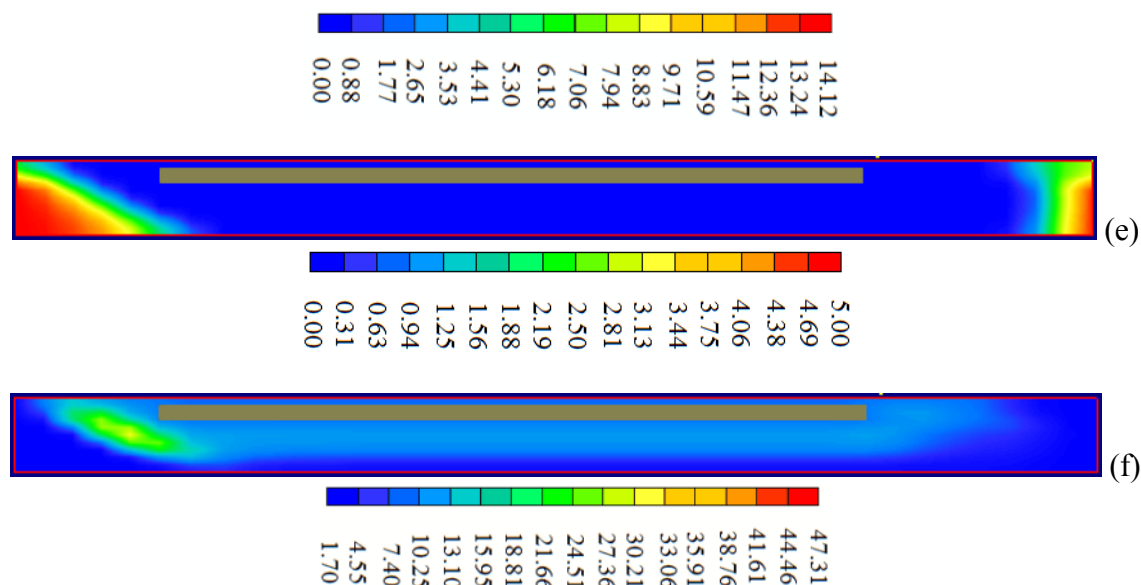
شکل (۶-۱۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با روش موند هستند. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می‌دهند.

۴-۲-۲-۶. سناریو چهارم: علاوه بر حذف منابع آلودگی در سطح زمین بعد از ۳۶ سال،

خاک آلوده نیز پاک‌سازی می‌گردد

در این سناریو، علاوه بر حذف منابع آلودگی در سطح زمین، خاک آلوده نیز مورد پاک‌سازی قرار می‌گیرد. بنابراین آلودگی راه یافته به سفره آب زیرزمینی پس از مدت زمان ۳۶ سال به وسیله فرآیندهای مختلف از جمله جذب و تجزیه بیولوژیکی رفع می‌شوند و غلظت ترکیبات BTEX به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد (شکل ۶-۱۷). با مقایسه نتایج سناریوهای سه و چهار می‌توان نتیجه گرفت که حذف منابع آلودگی در سطح زمین به تنهایی برای کاهش غلظت ترکیبات BTEX در آب زیرزمینی کافی نخواهد بود و خاک آلوده نیز باید مورد پاک‌سازی قرار گیرد.





شکل (۶-۱۷): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوتن، اتیل‌بنزن و زایلین بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با روش موند هستند. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده‌اند و خاک آلوده نیز پاک‌سازی گردید. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می‌دهند.

۳-۲-۶. تحلیل حساسیت

بیشتر عدم قطعیت های همراه با توصیف آلودگی آب های زیرزمینی به واسطه تغییر پذیری شرایط سفره و توزیع فضایی آلاینده‌ها می‌باشد. در ارزیابی رقیق سازی طبیعی، اثر این عدم قطعیت‌ها بر روی هندسه پلوم و توزیع غلظت آن مهم است، مخصوصاً در رابطه با ریسک های بالقوه همراه با آلودگی (Gribb et al., 2002, Suarez and Rifai, 2004). برای ارزیابی این عدم قطعیت‌ها از روش‌های مختلفی استفاده می‌شود. یکی از این روش‌ها تحلیل حساسیت است. این روش، اثر تغییرات پارامترهای ورودی مدل بر روی مقادیر خروجی آن را تعیین می‌کند. تحلیل حساسیت برای بالا بردن سطح دانش مهندسان محیط زیست جهت فهم این که کدام یک از پارامترهای مدل، مقادیر پیش‌بینی شده به وسیله مدل‌سازی را کنترل می‌کنند، مورد نیاز است.

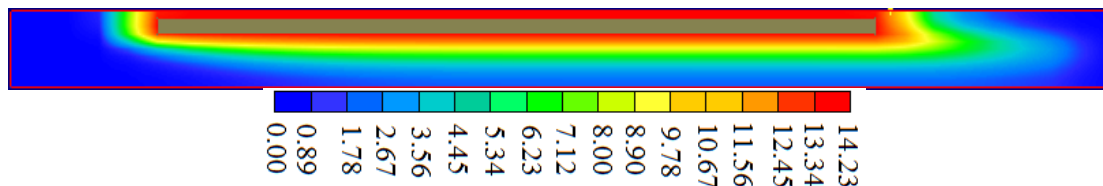
برای ملاحظه پاسخ مدل به تغییرات در مقادیر پارامترهای استفاده شده برای مدل‌سازی، حساسیت مدل به تغییرات در ضریب پراکندگی، ضریب توزیع، پارامترهای مربوط به مدل‌های

سینتیکی موند، میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر بر روی پلوم آلاینده ها با انجام چندین شبیه سازی بررسی گردید.

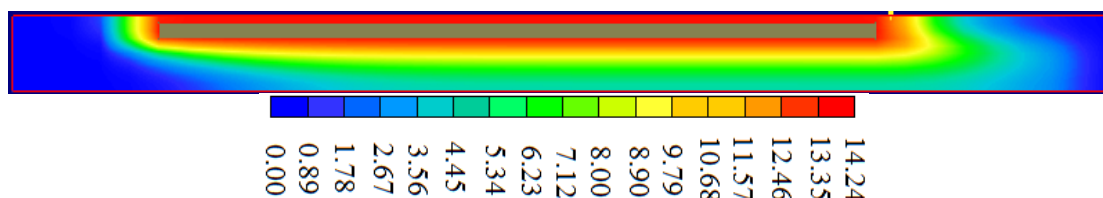
۶-۲-۳-۱. شبیه سازی اول: تحلیل حساسیت بر روی ضریب پراکندگی

اولین شبیه سازی برای بررسی حساسیت مدل به تغییرات مقادیر ضریب پراکندگی انجام گردید. ضریب پراکندگی از ۰/۵ متر تا ۱۵ متر تغییر داده شد.

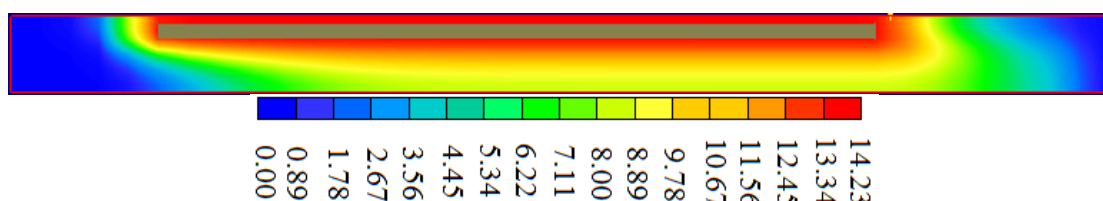
توزیع های غلظت بدست آمده با مقادیر مختلف ضریب پراکندگی، برای مدت زمان ۵۰ سال و یک ضریب توزیع صفر در شکل های (۶-۱۸) تا (۶-۲۲) نشان داده شده اند. نتایج نشان می دهند که با افزایش ضریب پراکندگی، آلودگی بیشتر در محیط جریان آب پخش می شود. معنی عبارت بالا این است که فرآیند پراکندگی یک مکانیزم مهم موثر بر تحول و انتقال آلاینده محلول است. بعلاوه، افزایش ضریب پراکندگی گرادیان غلظت را کاهش می دهد. چون جریان آب زیرزمینی به صورت افقی فرض شده، افزایش ضریب پراکندگی عرضی باعث می شود که آلاینده ها بیشتر به سمت مرز پایینی مدل پخش شوند.



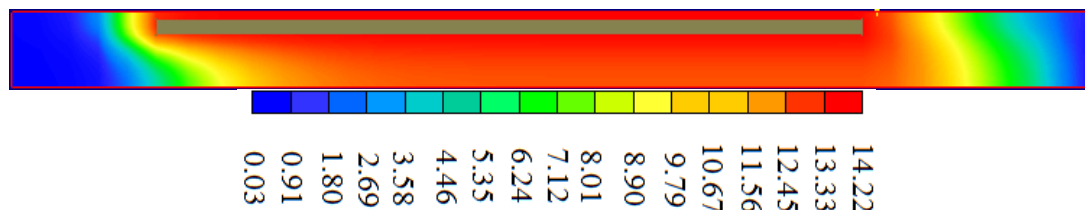
شکل (۶-۱۸): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 0.5 m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



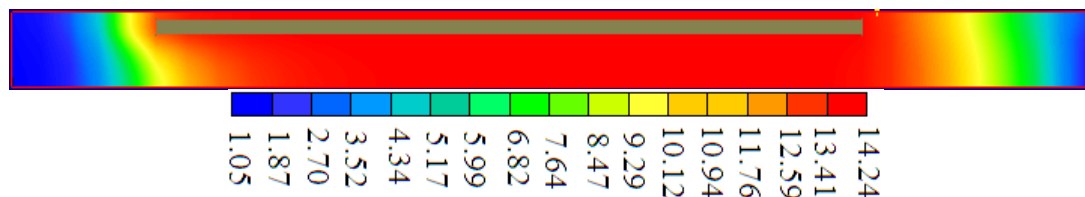
شکل (۶-۱۹): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 1 m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



شکل (۶-۲۰): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 2m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



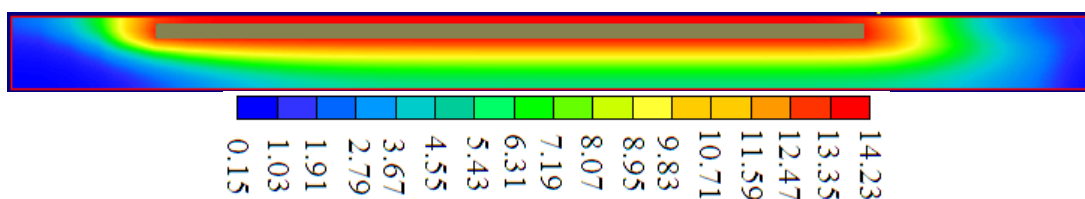
شکل (۶-۲۱): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 5m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



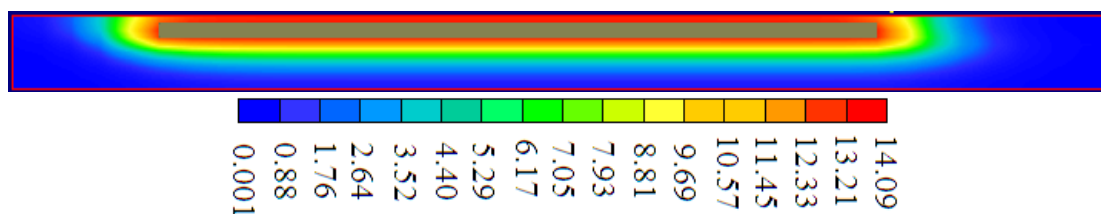
شکل (۶-۲۲): توزیع غلظت بنزن با مقدار ضریب پراکندگی $\alpha_L = \alpha_T = 15m$ برای مدت زمان ۵۰ سال.

۶-۲-۳-۲. شبیه‌سازی دوم: آنالیز حساسیت بر روی ضریب توزیع

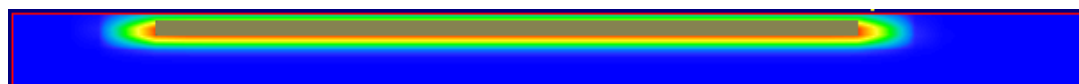
شبیه سازی دوم، اثر جذب خطی بر فرآیند انتقال آلاینده ها را بررسی می‌کند. شکل‌های (۶-۲۳) تا (۶-۲۵) اثر تغییر ضریب توزیع را بر روی توزیع غلظت آلاینده ها به ازای مقادیر پراکندگی $\alpha_L = 15m$ و $\alpha_T = 1m$ برای مدت زمان ۵۰ سال نشان می‌دهد. انتقال آلاینده ها به ازای مقادیر بزرگ k_d در جهت جریان کند می‌شود.

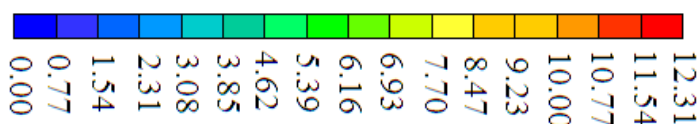


شکل (۶-۲۳): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع $1/34$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



شکل (۶-۲۴): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع $4/37$ برای مدت زمان ۵۰ سال.



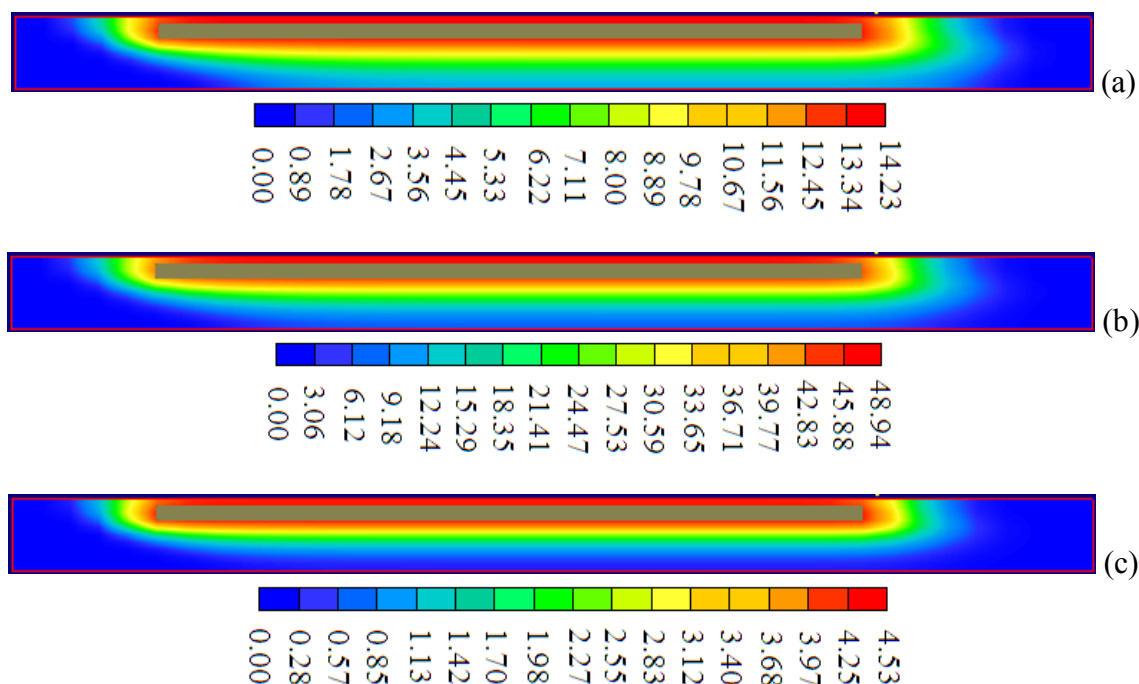


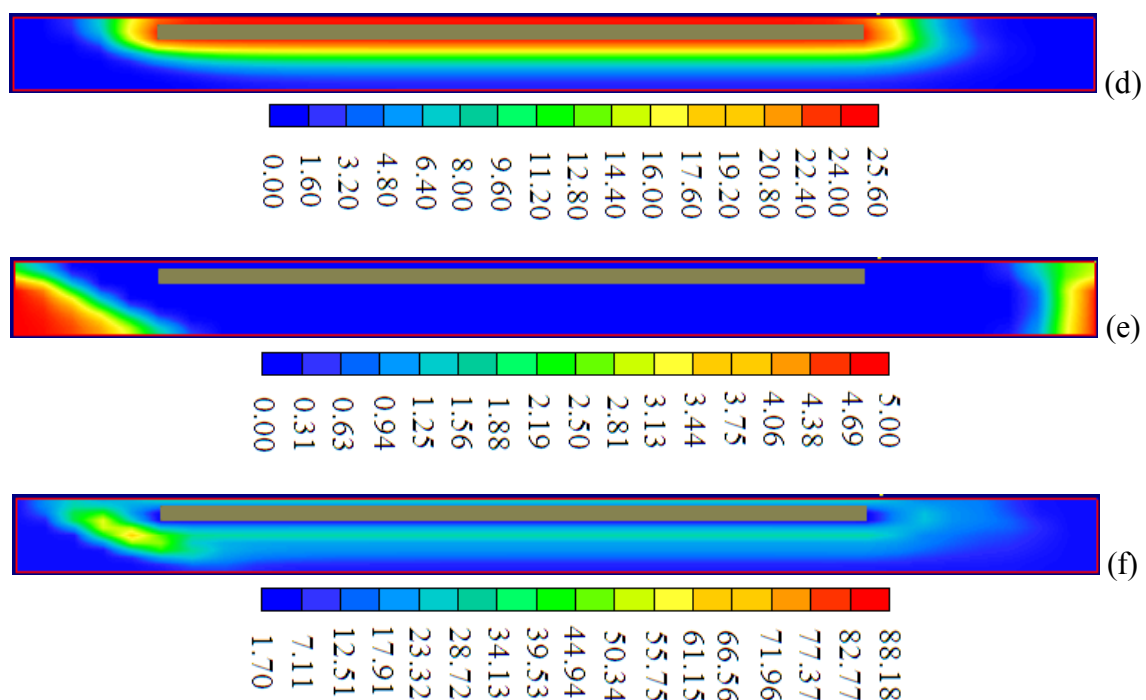
شکل (۶-۲۵): پلوم غلظت بنزن با ضریب توزیع ۳۴/۶ برای مدت زمان ۵۰ سال.

۶-۲-۳-۳. شبیه‌سازی سوم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک موند

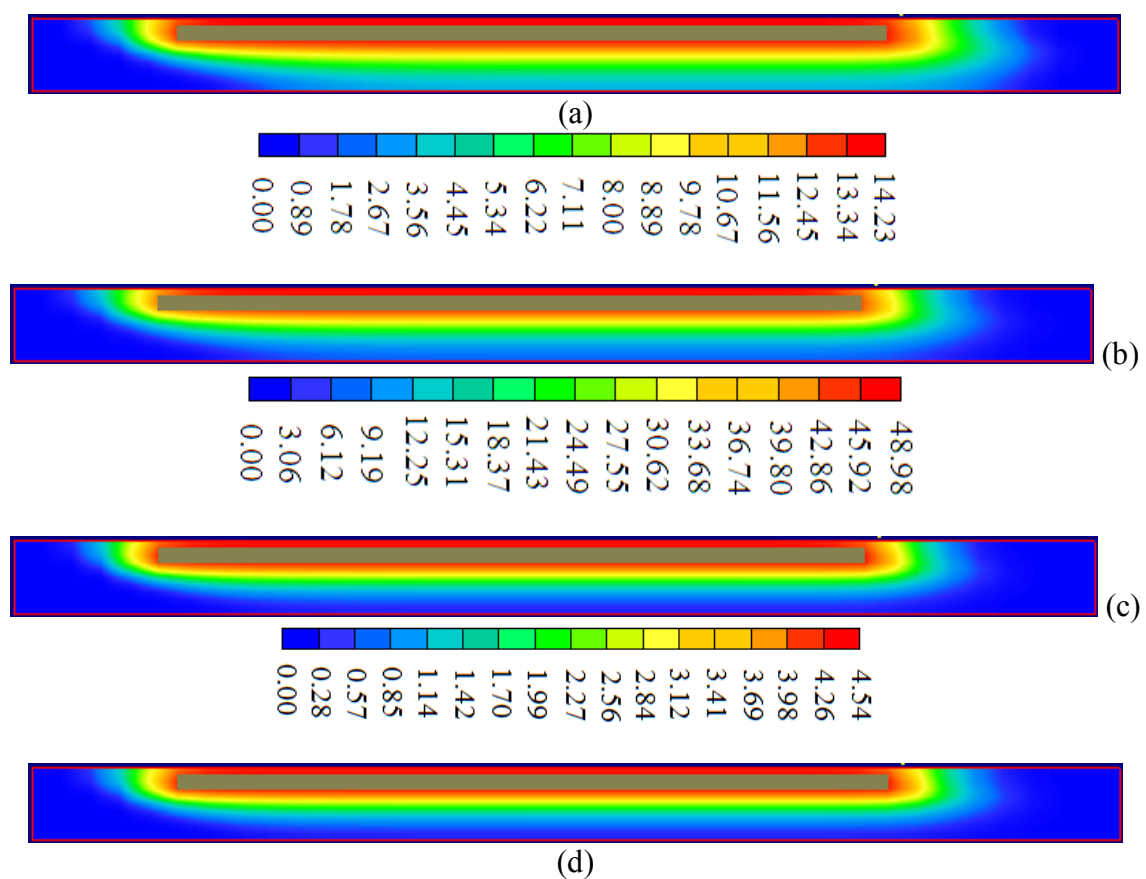
سومین شبیه سازی، برای بررسی حساسیت مدل به تغییرات پارامترهای سینتیک موند انجام شد. برای انجام این شبیه سازی، دو مجموعه پارامتر انتخاب شد. مجموعه اول، معمولاً تجزیه بیولوژیکی را با دو برابر کردن مقادیر حداکثر نرخ رشد ویژه و ضریب بازده ویژه واکنش و نصف کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن بیشتر تخمین می‌زند. دومین مجموعه از پارامترها، معمولاً تجزیه بیولوژیکی را با نصف کردن مقادیر حداکثر نرخ رشد ویژه و ضریب بازده ویژه واکنش و دو برابر کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن کمتر تخمین می‌زند.

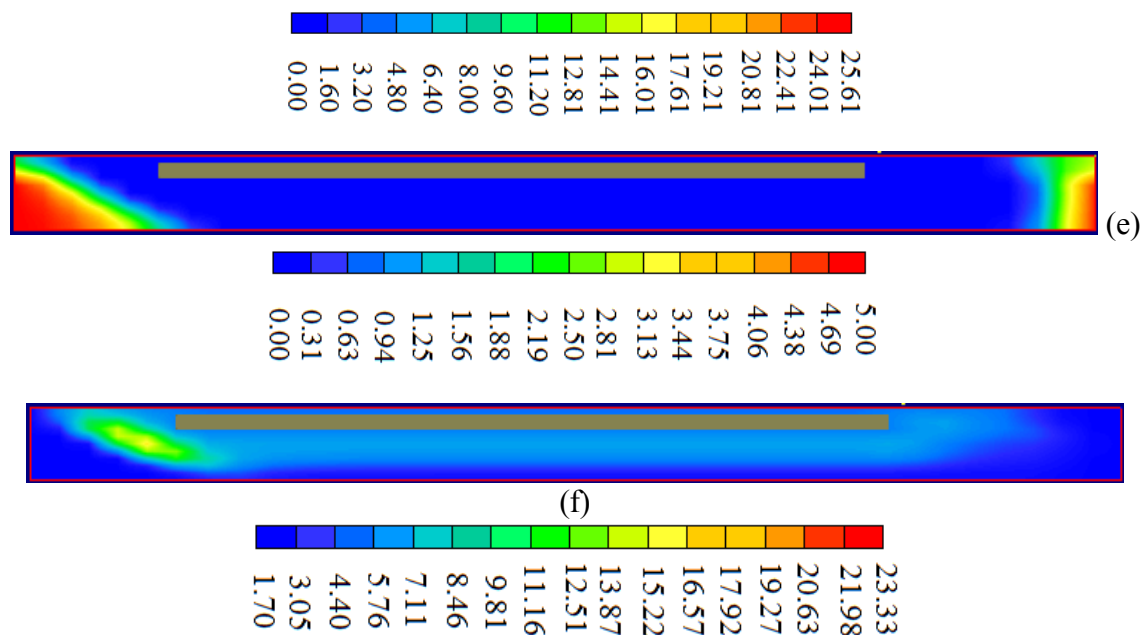
نتایج تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای سینتیک موند نشان می‌دهد که این روش خیلی به تغییرات این پارامترها حساس نیست، چون هیچ تغییر مهمی بر روی رفتار پلوم‌های ترکیبات BTEX و اکسیژن مشاهده نشد (شکل‌های ۶-۲۶ و ۶-۲۷).





شکل (۶-۲۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلین بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با استفاده از روش موند با لحاظ اولین مجموعه پارامترها، هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می‌دهند.





شکل (۶-۲۷): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با استفاده از روش موند با لحاظ دومین مجموعه پارامترها، هستند. (e) و (f) به ترتیب توزیع غلظت اکسیژن و بیومس بعد از ۵۰ سال را نشان می‌دهند.

این موضوع می‌تواند به این صورت توضیح داده شود که تجزیه بیولوژیکی هوازی به وسیله سینتیک میکروبی محدود نمی‌شود، بلکه به وسیله اختلاط پراکنده شونده آب آلوده با آب تمیز حاوی اکسیژن در سفره محدود می‌گردد. این پدیده، فرآیند پراکندگی مکانیکی است که باعث اختلاط آلاینده‌های محلول با الکترون‌گیرنده‌ها می‌شود. در سینتیک موند، تجزیه بیولوژیکی فقط جایی رخ می‌دهد که ترکیبات BTEX و اکسیژن در زمان و مکان یکسان موجودند. بنابراین، پلوم‌های شبیه‌سازی شده به وسیله سینتیک موند با پارامترهای تقریبی نسبت به پلوم‌های تعیین شده به وسیله روش‌های ساده شده بهتر با پلوم‌های واقعی مطابقت دارند.

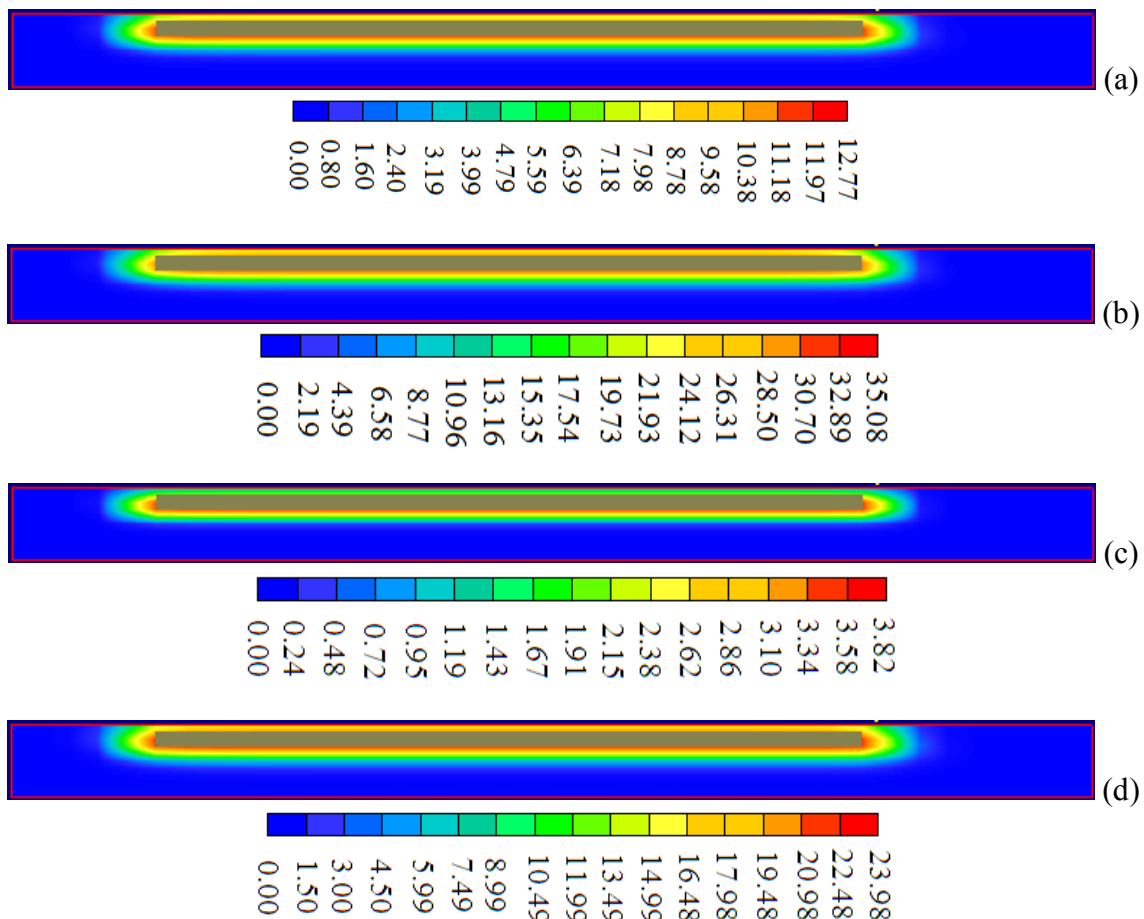
۴-۳-۲-۶. شبیه‌سازی چهارم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک

میکائیل - منتن

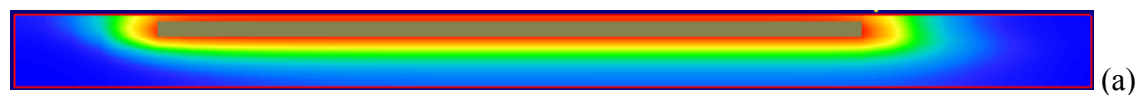
چهارمین شبیه‌سازی برای بررسی حساسیت مدل به تغییرات سینتیک میکائیل - منتن اجرا شد. برای اجرای این سناریو، دو مجموعه داده انتخاب شد. اولین مجموعه پارامترها، معمولاً تجزیه

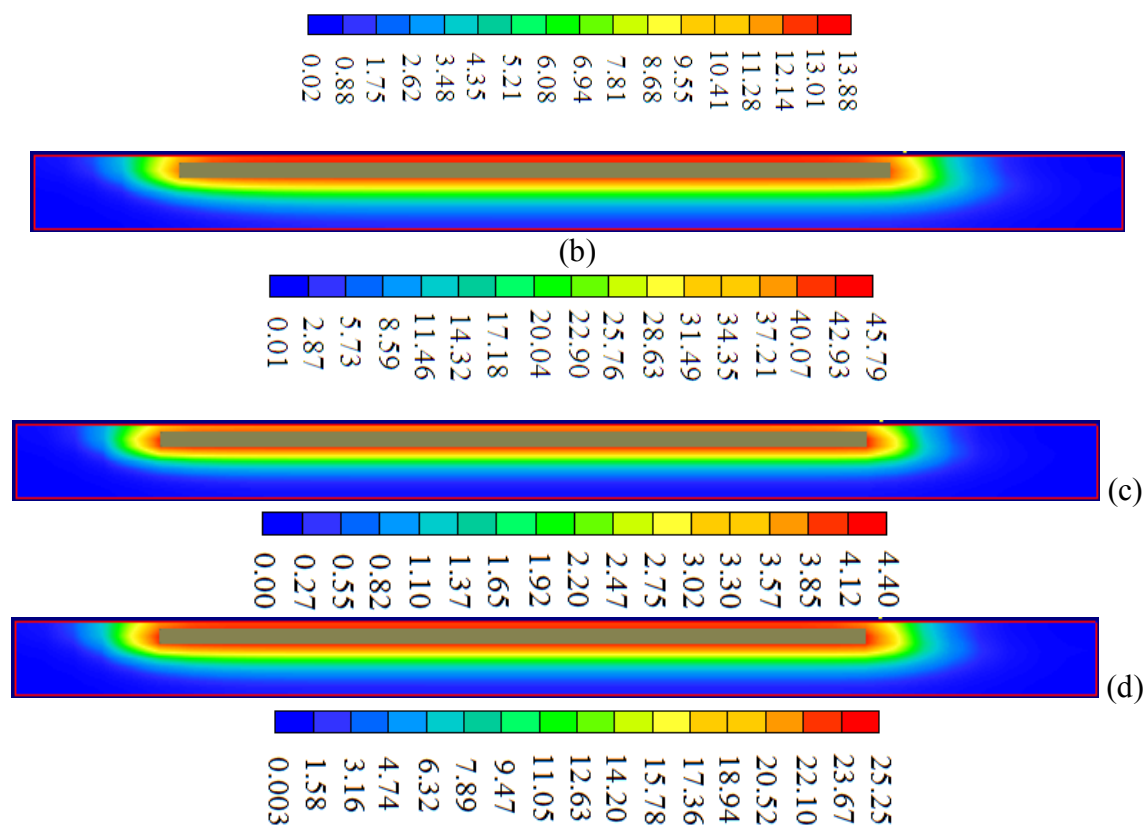
بیولوژیکی را با دو برابر کردن مقادیر حداکثر نرخ تجزیه و نصف کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن بیشتر تخمین می‌زند. مجموعه دوم پارامترها، معمولاً تجزیه بیولوژیکی را با نصف کردن مقادیر حداکثر نرخ تجزیه و دو برابر کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن کمتر تخمین می‌زند.

بر خلاف سینتیک موند، این روش به تغییرات پارامترهای آن حساس است. اولین مجموعه پارامترها باعث کاهش غلظت و طول پلوم‌ها می‌شود، در حالی که، با استفاده از مجموعه دوم پارامترها، پلوم‌ها می‌توانند با غلظت و وسعت بیشتر شبیه‌سازی شوند (شکل‌های ۶-۲۸ و ۶-۲۹).



شکل (۶-۲۸): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلین بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با روش میکائیل-منتن با لحاظ اولین مجموعه پارامترها هستند.



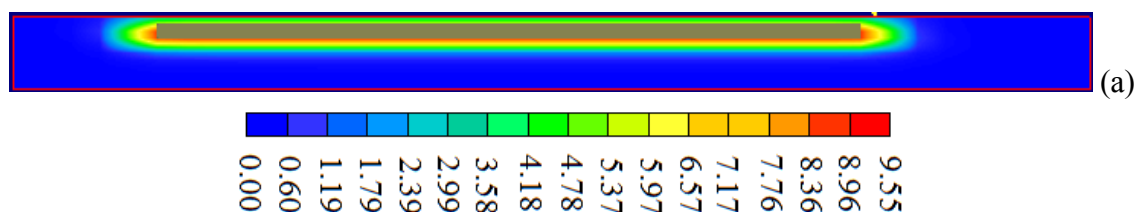


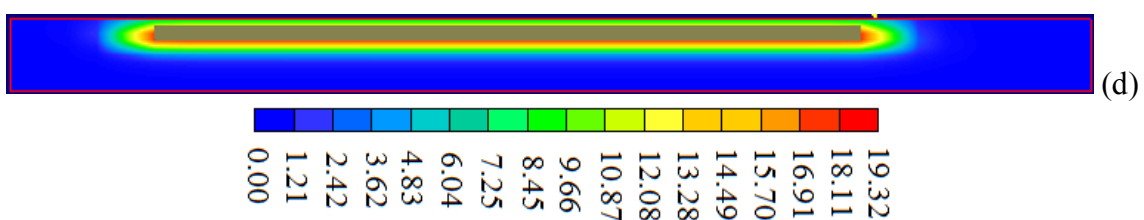
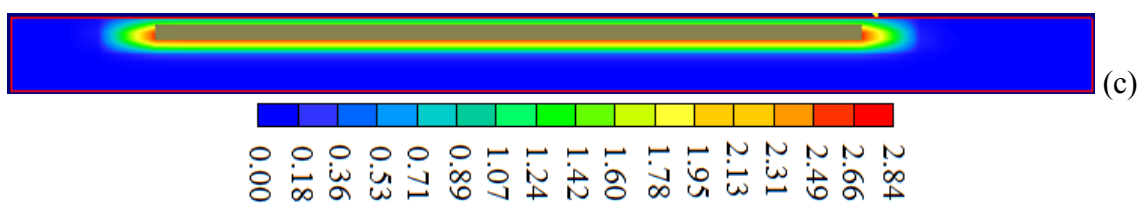
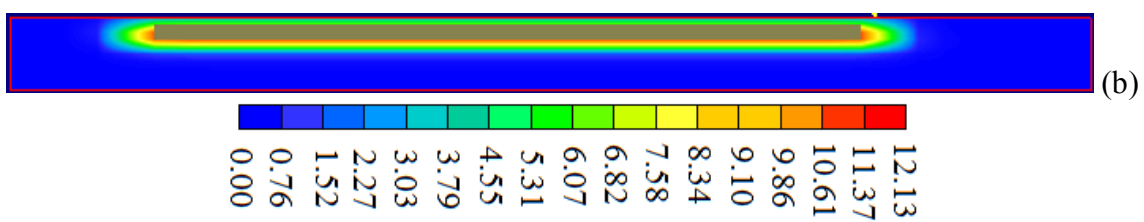
شکل (۶-۲۹): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تولن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی با روش میکائیل-منتن با لحاظ دومین مجموعه پارامترها هستند.

۶-۲-۵. شبیه‌سازی پنجم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک مرتبه

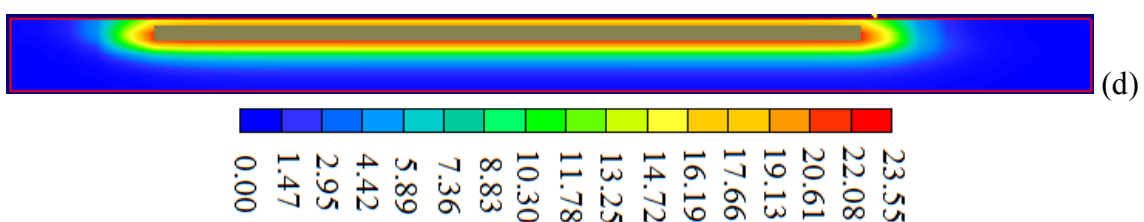
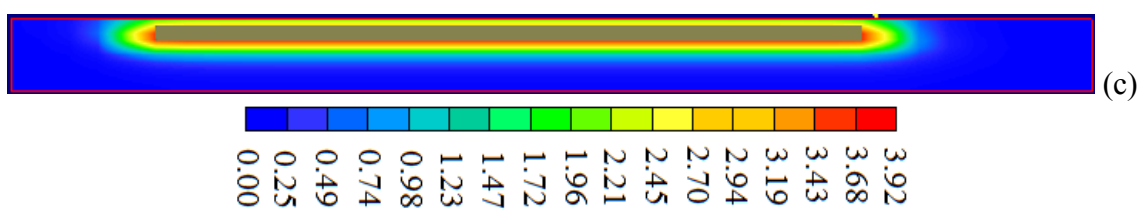
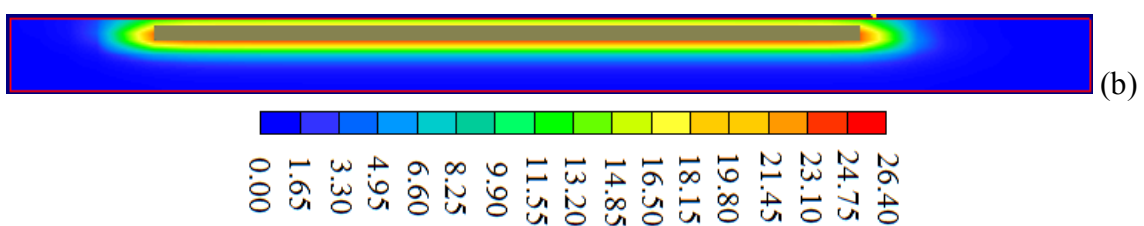
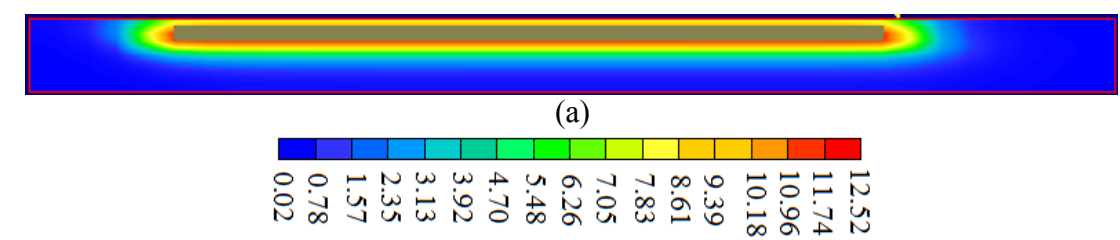
اول

پنجمین شبیه‌سازی شامل ارزیابی حساسیت مدل به تغییر ثابت سینتیک مرتبه اول این مدل است. مشابه روش میکائیل-منتن، این روش هم به تغییر ثابت سینتیک حساس است. غلظت و وسعت پلوم‌ها با دو برابر کردن ثابت مرتبه اول، کاهش می‌یابند. در حالی که اگر پارامتر مذکور نصف شود پلوم‌ها وسعت بیشتری پیدا می‌کنند (شکل‌های ۶-۳۰ و ۶-۳۱).





شکل (۶-۳): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلین بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی به وسیله سینتیک مرتبه اول با دو برابر کردن ثابت مرتبه اول هستند.

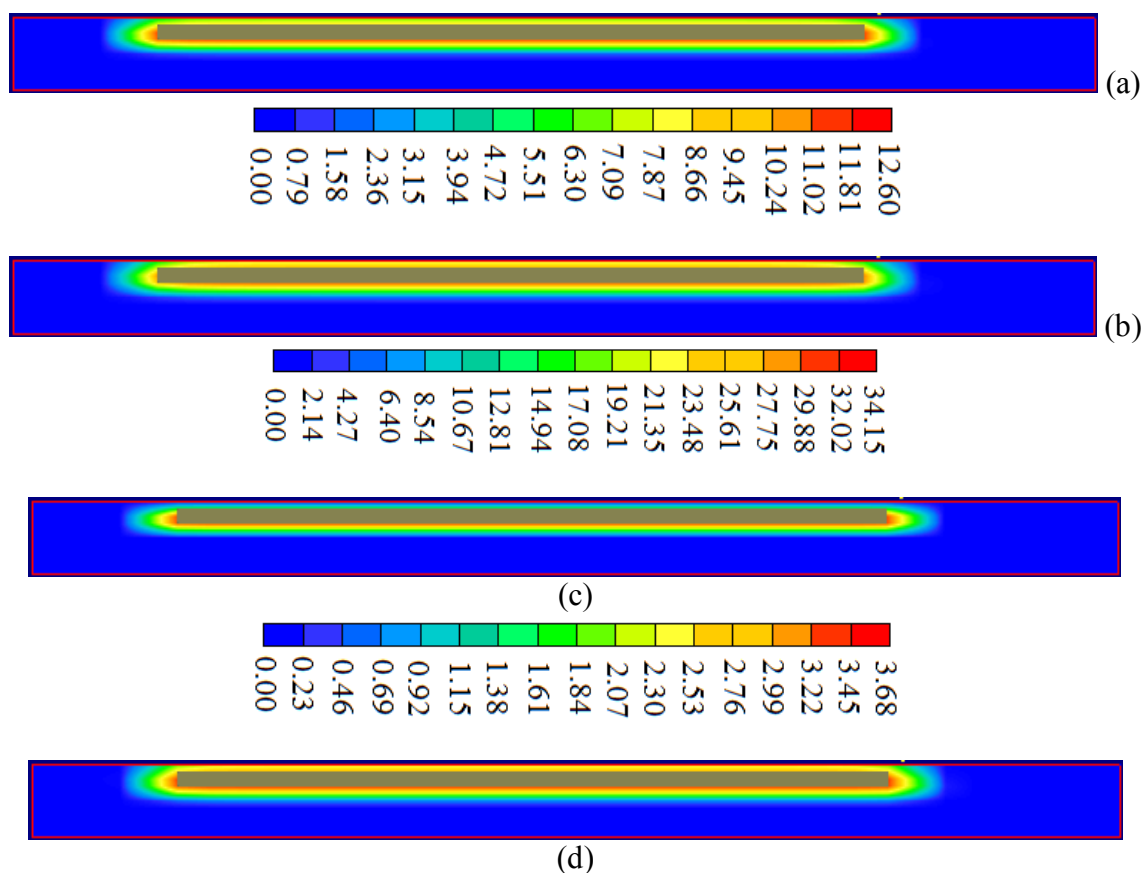


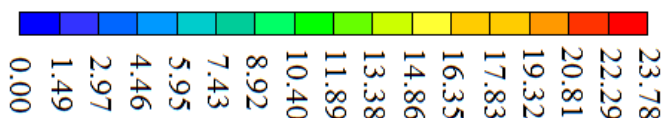
شکل (۶-۳۱): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوتن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی به وسیله سینتیک مرتبه اول با نصف کردن ثابت مرتبه اول هستند.

۶-۳-۲-۶. شبیه‌سازی ششم: تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای مدل سینتیک مرتبه

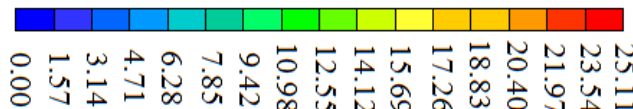
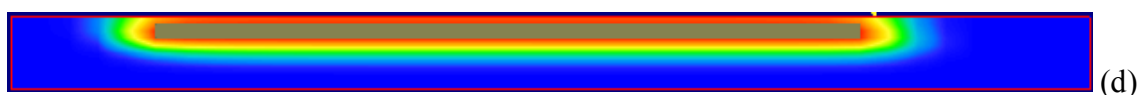
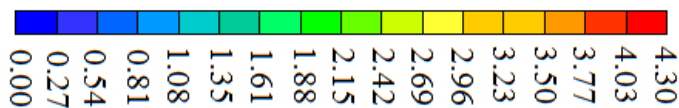
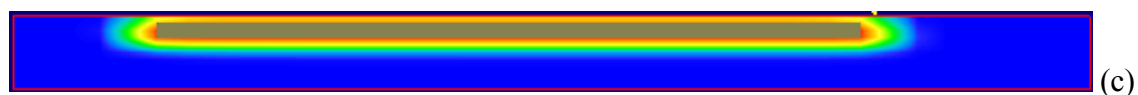
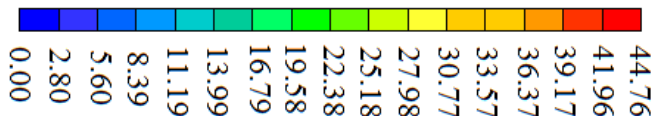
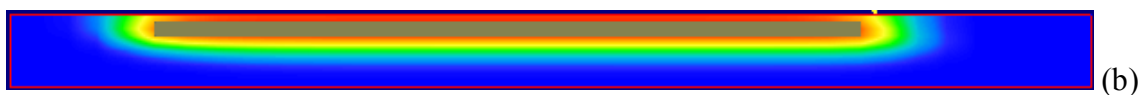
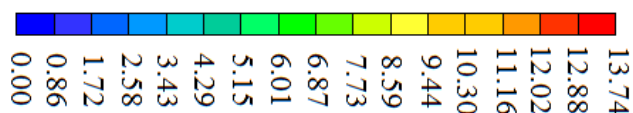
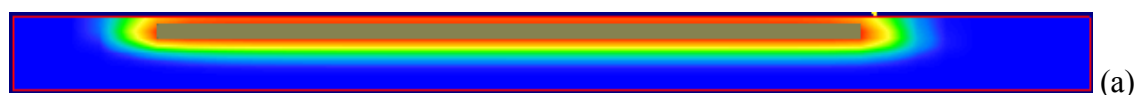
صفر

آخرین شبیه‌سازی برای بررسی حساسیت مدل به تغییر ثابت سینتیک مرتبه صفر اجرا شد. این روش هم مشابه دو روش میکائیل - منتن و مرتبه اول به تغییر ثابت سینتیک مرتبه صفر حساس است. غلظت و وسعت پلوم ها با دو برابر کردن ثابت سینتیک مرتبه صفر، کاهش می‌یابند. در مقابل، کاهش این پارامتر به حد نصف مقدار آن باعث افزایش طول و غلظت پلوم ها می‌شود (شکل‌های ۶-۳۲ و ۶-۳۳).





شکل (۶-۳۳): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی به وسیله سینتیک مرتبه صفر با دو برابر کردن ثابت مرتبه صفر هستند.



شکل (۶-۳۳): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: (a)، (b)، (c) و (d) توزیع غلظت بنزن، تلوئن، اتیل‌بنزن و زایلن بعد از گذشت ۵۰ سال از شبیه‌سازی به وسیله سینتیک مرتبه صفر با نصف کردن ثابت مرتبه صفر هستند.

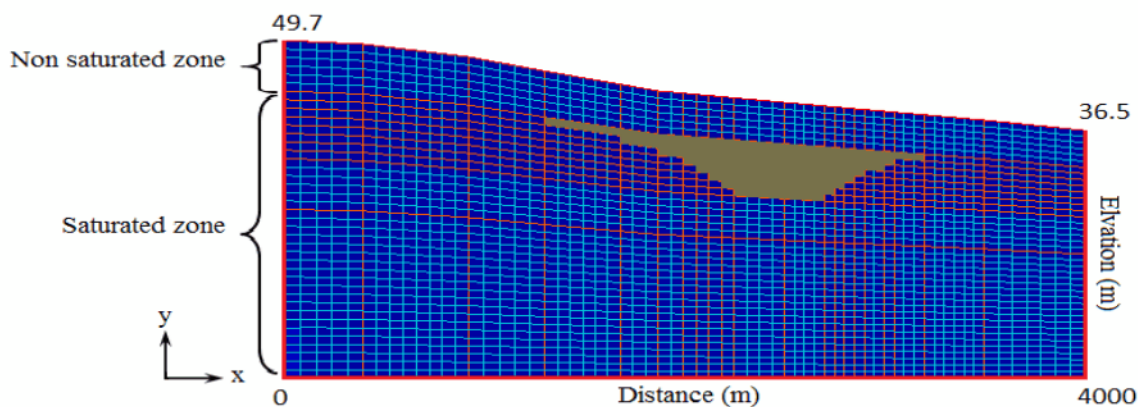
۶-۳. مدل سازی انتقال واکنشی چند فازي هیدروکربن های نفتی در ناحیه

صنعتی ری

۶-۳-۱. تنظیم مدل و داده‌های ورودی

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنشی چند فاز هیدروکربنهای نفتی در ناحیه صنعتی ری طراحی شد. چون در ناحیه مذکور تنوعی از آلایندهای نفتی در سفره آب زیرزمینی مشخص شده است، در مدل سازی مقادیر کل هیدروکربنها در نظر گرفته می شود. شبیه سازی بر روی یک مقطع عرضی مشابه پروفیل زمین شناسی GB1-CB4 ناحیه صنعتی ری انجام پذیرفت (شکل ۵-۹ در فصل ۵).

ابعاد مقطع عرضی دو بعدی مذکور ۴۰۰۰ متر در امتداد افقی و ۳۶/۵-۴۹/۷ متر در امتداد عمودی است که شامل ۲۵۶۰ حجم کنترلی می باشد (شکل های ۶-۳۴ و ۶-۳۵).



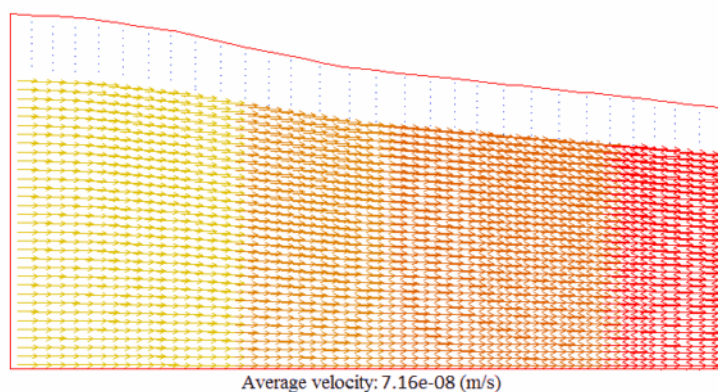
شکل (۶-۳۴): مقطع عرضی دو بعدی: شبکه حجم محدود (محور عمودی ۴۰ برابر محور افقی است).

شرایط اولیه و مرزی زیر برای مدل تعیین گردید:

- غلظت صفر به عنوان شرط اولیه در نظر گرفته شد. این مقدار، توزیع آلاینده محلول را در

حوزه جریان قبل از مدل سازی توصیف می کند ($C(x, 0) = 0, \quad x \geq 0$).

- غلظت ثابت برابر با صفر در مرز خروجی مدل تعیین شد ($C(\infty, t) = 0, \quad t \geq 0$).



شکل (۶-۳۵): بردارهای سرعت.

سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض شد. اختلاف هد هیدرولیکی بین مرزهای چپ و راست مدل ۱۰ متر است. مقدار متوسط بارش (تغذیه) ۰/۲۵ متر در سال برای مرز بالایی در نظر گرفته شد.

برای سادگی در فرآیند مدل سازی از مولفه افقی سرعت در منطقه اشباع نشده چشم‌پوشی شد و جهت جریان عمودی فرض شد. مقادیر غلظت بر حسب میلی گرم بر لیتر ارائه شده است. داده‌های ورودی مدل در جدول (۶-۴) آورده شده‌اند.

۶-۳-۲. نتایج شبیه‌سازی دو بعدی

۶-۳-۲-۱. سناریو اول: مدل سازی دو بعدی ضخامت لنز LNAPL بر روی سطح آب زیرزمینی

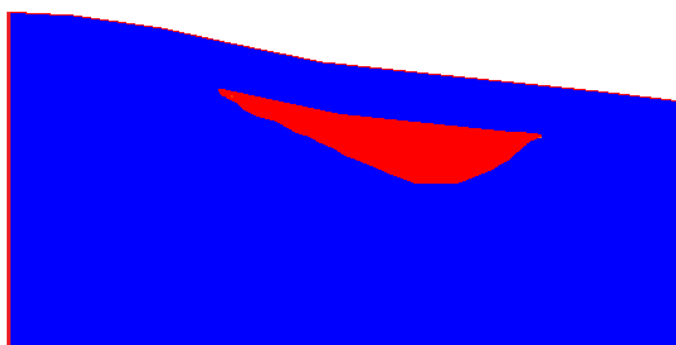
در مرحله اول، به منظور کالیبراسیون مدل، ضخامت لنز LNAPL با استفاده از معادله (۲-۷۵) ارائه شده در فصل دوم شبیه‌سازی شد.

در این شبیه سازی فرض گردید که هیچ تماس مستقیمی بین فازهای جامد و LNAPL وجود ندارد و بین فازها تعادل محلی برقرار است.

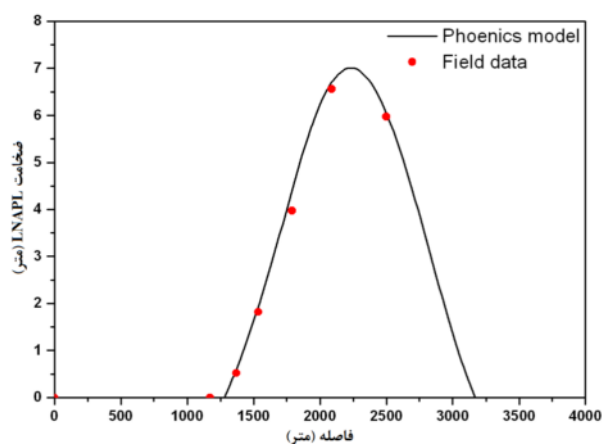
جدول (۴-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در شبیه‌سازی دو بعدی.

پارامتر	مقدار	مرجع
طول مدل در امتداد X	۴۰۰۰ متر	
عرض مدل در امتداد Y	۳۶/۵-۴۹/۷ متر	
تعداد المان‌های حجمی	۲۵۶۰	
مدت زمان شبیه‌سازی	۵۰ سال	
تعداد گام‌های زمانی	۵۰	
تعداد تکرار	۱۰۰۰	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد X	$8/07 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد Y	$8/07 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی نفت در امتداد X	$1/19 \times 10^{-8} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی نفت در امتداد Y	$1/19 \times 10^{-9} \text{ m/s}$	
تخلخل (θ)	۰/۴۱	
آب محتوی (θ_w)	۰/۲	
تخلخل هوادار (θ_a)	۰/۰۷	
تخلخل پر شده از نفت (θ_{NAPL})	۰/۱۴	
هد ثابت در مرز سمت چپ	۴۲	
هد ثابت در مرز سمت راست	۳۲	
ضریب پراکندگی طولی (α_L)	۱۵ متر	
ضریب پراکندگی عرضی (α_T)	۱ متر	
چگالی آب (ρ_w)	1000 kg/m^3	
چگالی نفت (ρ_{NAPL})	800 kg/m^3	
اشباع NAPL در لنز NAPL (S_{oo})	۰/۸۵	(Kim and Corapcioglu, 2003)
اشباع آب باقی مانده (S_{ow})	۰/۱۵	
اشباع NAPL باقی مانده (S_{oun})	۰/۰۵	(Kim and Corapcioglu, 2003)
نرخ جریان منبع NAPL (Q_o)	$0/022 \text{ m}^3/\text{day}$	
عامل تأخیر (R_w)	۲	
ضریب تجزیه هیدروکربن نفتی (k_1)	$0/00005 \text{ 1/day}$	(Kim and Corapcioglu, 2003)
ضخامت منطقه اشباع شده سفره (b)	۲۸ متر	
ضخامت منطقه اشباع نشده (d)	۱۲ متر	
نرخ پمپاژ NAPL	$3 \text{ m}^3/h$	

انتقال جرم از منطقه LNAPL به منطقه اشباع شده با فرآیند انحلال و به منطقه غیر اشباع (به واسطه تبخیر) در نظر گرفته می‌شود. با این فرضیات مدل اجرا گردید. نتایج مدل سازی در گام زمانی ۳۶ سال برای مقایسه با داده های صحرایی در شکل (۶-۳۶) نشان داده شده است. نتایج شبیه سازی عددی با نتایج بدست آمده از مطالعات صحرایی در شکل (۶-۳۷) مقایسه شده اند. این مقایسه نشان می دهد که مدل عددی ارائه شده به نحو خوبی توانسته ضخامت پلوم LNAPL بر روی آب را شبیه سازی کند.



شکل (۶-۳۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: ضخامت لنز LNAPL در مدت زمان ۳۶ سال.



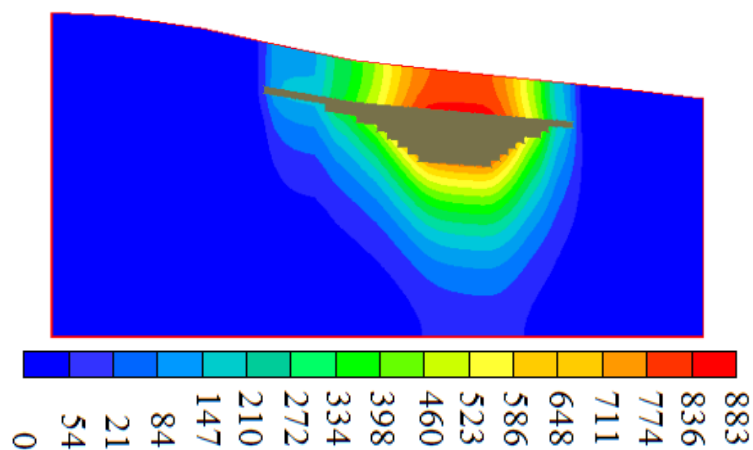
شکل (۶-۳۷): مقایسه نتایج بدست آمده از مدل حجم محدود با داده های صحرایی بعد از ۳۶ سال.

۶-۳-۲. سناریو دوم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول در آب

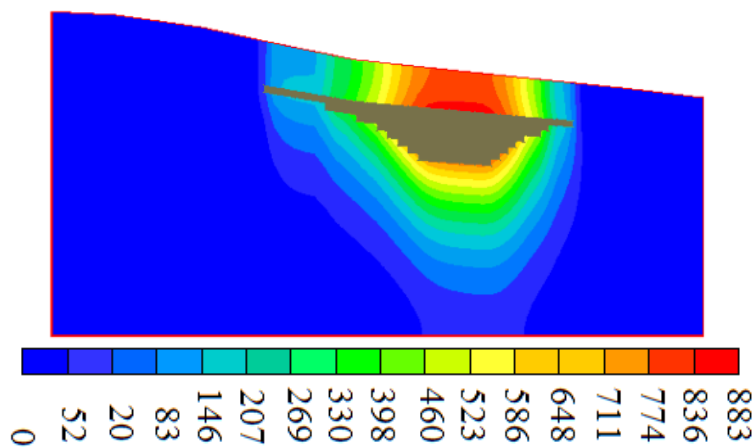
زیرزمینی

در این سناریو انتقال واکنشی هیدروکربن های م محلول در آب زیرزمینی با استفاده از معادله (۷۶-۲) ارائه شده در فصل دوم مدل سازی گردید. منطقه اشباع با منطقه NAPL به وسیله انحلال و منطقه غیر اشباع به واسطه انحلال و تبخیر، بر اساس غلظت های هیدروکربن ها در این دو منطقه متقابلا اثر دارد. در معادله (۷۶-۲) عبارت تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن های در نظر گرفته نشده و تجزیه شیمیایی آن ها به وسیله سینتیک مرتبه اول در مدل لحاظ شده است. در این سناریو، برای مدل سازی تجزیه بیولوژیکی از مدل تجزیه بیولوژیکی ارائه شده توسط هان و لونسپیل (۱۹۸۸) (معادله ۴۴-۲ در فصل دوم) استفاده گردید. چون بیشتر هیدروکربن های نفتی از نوع ترکیبات سمی هستند و قادرند که در غلظت های زیر حد قابلیتشان موجب مرگ سلول های میکروبی شوند (Sikkema et al., 1995) بنابراین، در موقعیت هایی که مقدار قابل توجهی از این آلاینده ها در تماس با آب هستند (مثل سناریو حاضر) ، پتانسیل بازدارندگی کامل فعالیت میکروبی و در نتیجه تجزیه بیولوژیکی ترکیبات بازدارنده وجود دارد (Sanders, 2002). در این مدل، غلظت بحرانی که بالاتر از آن تجزیه بیولوژیکی متوقف می شود، 400 mg/L در نظر گرفته شد. مدل یک دفعه با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی و بار دیگر بدون تجزیه بیولوژیکی اجرا گردید. نتایج شبیه سازی در گام های زمانی ۳۶ و ۵۰ سال در شکل های (۳۸-۶) تا (۴۱-۶) نشان داده شده اند.

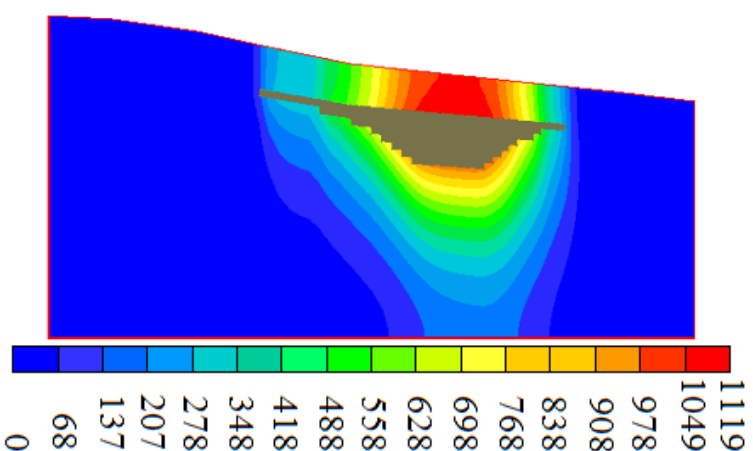
همان طور که در شکل های فوق مشاهده می گردد، مدل به لحاظ سینتیک تجزیه بیولوژیکی حساسیت چشم گیری ندارد و نتایج بدست آمده در دو حالت تقریباً با هم مشابه اند. این موضوع بدین دلیل است که غلظت آلاینده های هیدروکربنی محلول بالاتر از غلظت بحرانی تعیین شده است و عملاً تجزیه بیولوژیکی به موجب مرگ جمعیت میکروبی در غلظت های بالا صورت نمی گیرد.



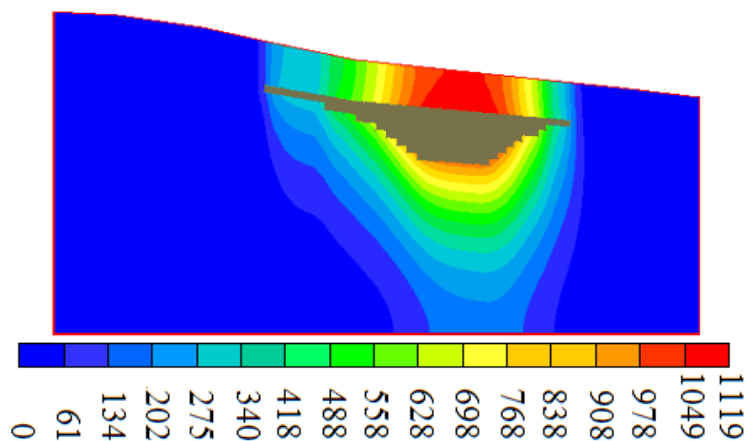
شکل (۶-۳۸): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۳۶ سال بدون در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی.



شکل (۶-۳۹): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۳۶ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی.



شکل (۶-۴۰): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال بدون در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی.



شکل (۶-۴۱): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی.

چون سرعت جریان آب زیرزمینی خیلی کم است، پلوم فاز محلول فقط در ناحیه فاز آزاد آلاینده هیدروکربنی گسترده شده است. این موضوع از نظر طراحی روش‌های پاک‌سازی یک مزیت برای منطقه محسوب می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود حتی با گذشت ۵۰ سال، پلوم فاز محلول گسترش کمی در جهت جریان آب زیرزمینی دارد، پس نمی‌تواند عامل آلودگی نواحی مجاور خود باشد.

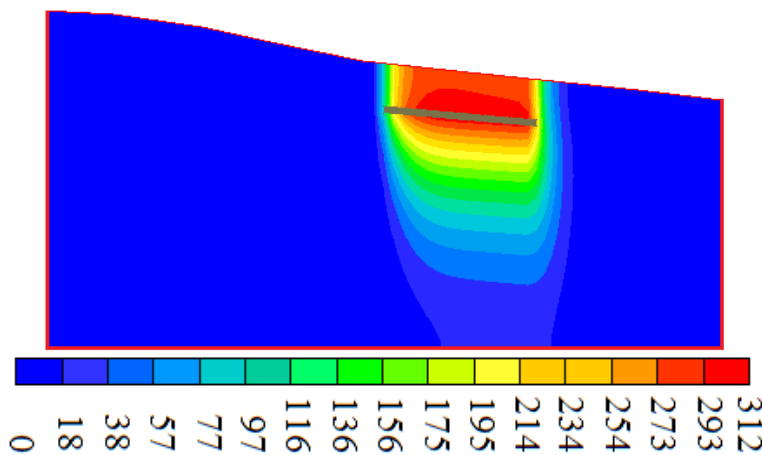
۶-۳-۲-۳. سناریو سوم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن‌های محلول با در

نظر گرفتن کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله پمپاژ آن

بعد از اتمام مطالعات و اندازه‌گیری‌های صحرایی در سال ۱۳۸۶، به عنوان اولین اقدام جهت رفع آلاینده‌ها و پاک‌سازی سفره آب زیرزمینی آلوده به مواد نفتی، پمپاژ فاز آزاد این آلاینده‌ها از داخل سفره به سطح زمین آغاز گردید. اما علی‌رغم عملیات پمپاژ در منطقه، به دلیل نشت از لایه‌های بالایی خاک آلوده، هنوز لایه نازکی از فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی باقی مانده است. نتایج شبیه‌سازی در این حالت نشان می‌دهد که با وجود این که بیشتر فاز آزاد از سفره زدوده شده است اما

وجود همین لایه نازک باعث تداوم آلودگی آب زیرزمینی در مقیاس چشمگیری شده است

(شکل ۶-۴۲).



شکل (۶-۴۲): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، لایه نازکی از فاز آزاد آلاینده‌های هیدروکربنی روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۵۰ سال باقی مانده است.

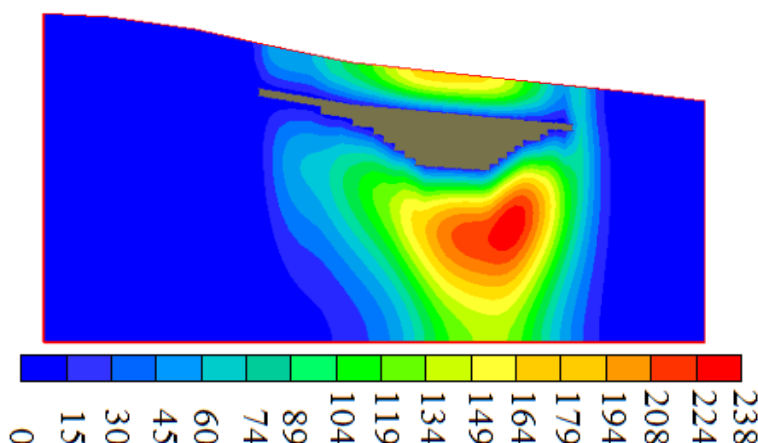
۶-۳-۴. سناریو چهارم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول در

آب زیرزمینی با در نظر گرفتن این که پلوم فاز آزاد بر روی آب بعد از ۴۲ سال کاملاً رفع

می‌شود

سناریو چهارم مشابه سناریو سوم است با این تفاوت که در این حالت، فرض می‌گردد که در اثر عمل پمپاژ بعد از گذشت ۶ سال، فاز آزاد به طور کلی از سطح سفره آب زیرزمینی زدوده شده باشد و در این حالت مدل اجرا می‌گردد. توزیع غلظت فاز محلول پس از گذشت ۵۰ سال در شکل (۶-۴۳) آورده شده است.

این شکل تغییرات چشمگیری را در توزیع غلظت فاز محلول هیدروکربن های نفتی نشان می‌دهد که نتیجه حذف فاز آزاد بعد از ۴۲ سال است. اما سفره آب زیرزمینی هنوز آلوده است و برای پاک سازی فاز محلول آلودگی، باید یک روش به سازی مناسب و مقرون به صرفه مثل روش به‌سازی بیولوژیکی با توجه به شرایط منطقه طراحی شود.



شکل (۴۳-۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز محلول در مدت زمان ۵۰ سال با در نظر گرفتن تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، فاز آزاد آلاینده‌های هیدروکربنی از روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۴۲ سال به طور کامل حذف شد.

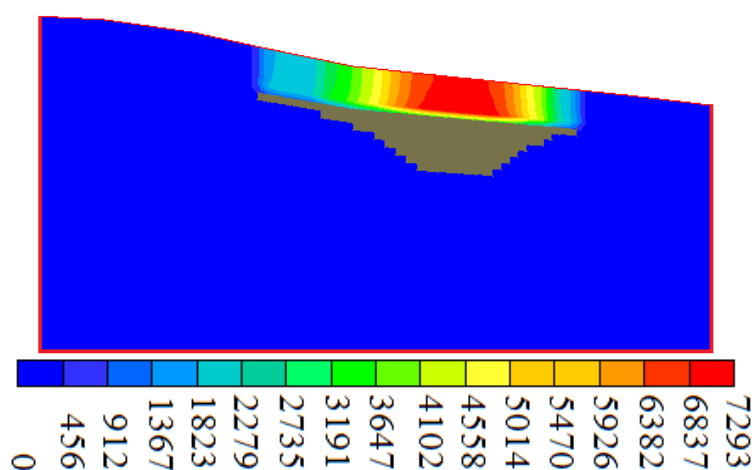
۵-۲-۳-۶. سناریو پنجم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده

در منطقه غیر اشباع

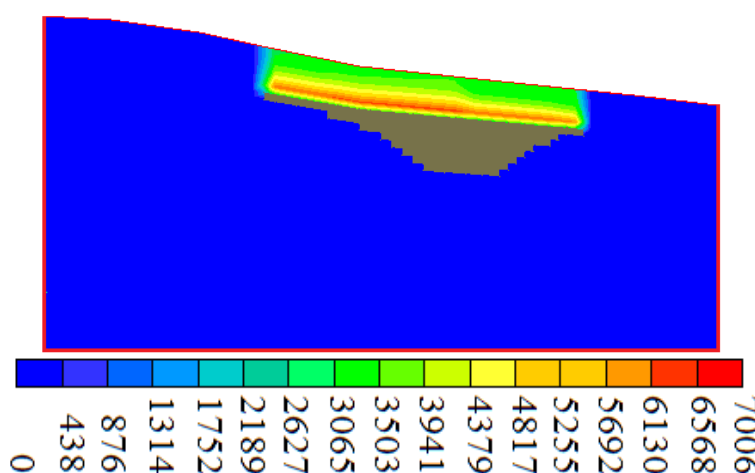
در این سناریو فرض می گردد که در منطقه غیر اشباع فاز NAPL حضور ندارد. این منطقه شامل فازهای گاز خاک، آب و جامد است و در معرض فعل و انفعالات با منطقه NAPL، منطقه اشباع و اتمسفر می‌باشد. اگر منطقه غیر اشباع با آلاینده های تبخیر شده از NAPL یا منطقه اشباع آلوده شود، جزءبندی تعادلی محلی آلاینده ها در بین فازها فرض می‌شود. برای مدل سازی دوبعدی انتقال هیدروکربن های نفتی در این منطقه از معادله (۷۹-۲) ارائه شده در فصل دوم استفاده می‌گردد. مدل با فرضیات بالا اجرا می‌شود. نتایج شبیه سازی برای دو گام زمانی ۳۶ و ۵۰ سال در شکل‌های (۴۴-۶) و (۴۵-۶) نشان داده شده‌اند.

شکل (۴۴-۶) نشان می دهد که در مدت زمان ۳۶ سال مقدار قابل توجهی از هیدروکربن‌های نفتی از سطح آب زیرزمینی و همچنین فاز آزاد NAPL تبخیر شده و به منطقه غیر اشباع منتقل شده‌اند. این موضوع نشان دهنده آن است که قابلیت فراریت آلاینده های هیدروکربنی موجود در منطقه زیاد است. اما در شکل (۴۵-۶) که توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن‌های نفتی را بعد از گذشت

۵۰ سال نشان می‌دهد، بیان می‌دارد که مقادیر غلظت ها نسبت به مقادیر نشان داده شده در شکل (۴۴-۶) کاهش یافته است. این کاهش مقادیر غلظت فاز گاز هیدروکربن ها در منطقه غیر اشباع به دلیل حفاری های زیاد در منطقه به منظور مطالعات صحرایی در سال های ۱۳۸۴-۱۳۸۶ است. از طریق این حفاری ها حجم قابل توجه ای از فاز گازی محبوس در زیر سطح زمین به اتمسفر راه یافت که منجر به کاهش تجمع گازهای فرار در زیر سطح زمین گردید.



شکل (۴۴-۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۳۶ سال.



شکل (۴۵-۶): نتایج شبیه‌سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال.

۶-۳-۲. سناریو ششم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع با در نظر گرفتن کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله پمپاژ آن

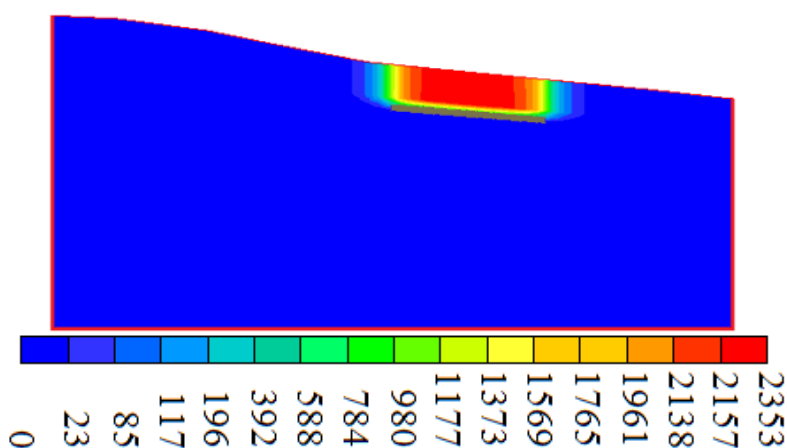
این سناریو مشابه سناریو سوم است. فرض می گردد که در اثر عملیات پمپاژ بعد از سال ۱۳۸۶ بیشتر فاز آزاد روی سطح آب رفع شده باشد و فقط یک لایه نازکی از NAPL باقی مانده است. مدل با این شرایط اجرا گردید. در شکل (۴۶-۶) نتیجه شبیه سازی برای گام زمانی ۵۰ سال مشاهده می شود. مقایسه شکل های (۴۵-۶) و (۴۶-۶) مشخص می کند که حذف فاز آزاد از روی سطح آب نقش مهمی در کاهش غلظت فاز گازی هیدروکربن های فرار دارد.

۶-۳-۲. سناریو هفتم: مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های فرار منطقه غیر اشباع با این فرض که پلوم فاز آزاد بر روی آب بعد از ۴۲ سال کاملاً رفع می شود در این سناریو فرض می شود که پلوم فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی بعد از گذشت ۴۲ سال کاملاً رفع می شود. نتیجه حاصل از این شبیه سازی برای گام زمانی ۵۰ سال در شکل (۴۷-۶) نشان داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود بیشتر فاز گازی هیدروکربن های فرار به اتمسفر انتقال یافته و قسمت دیگر آن تجزیه شده و یا به فاز جامد جذب شده است. در نتیجه غلظت آن ها در منطقه غیر اشباع به طور قابل ملاحظه ای کاهش یافته است.

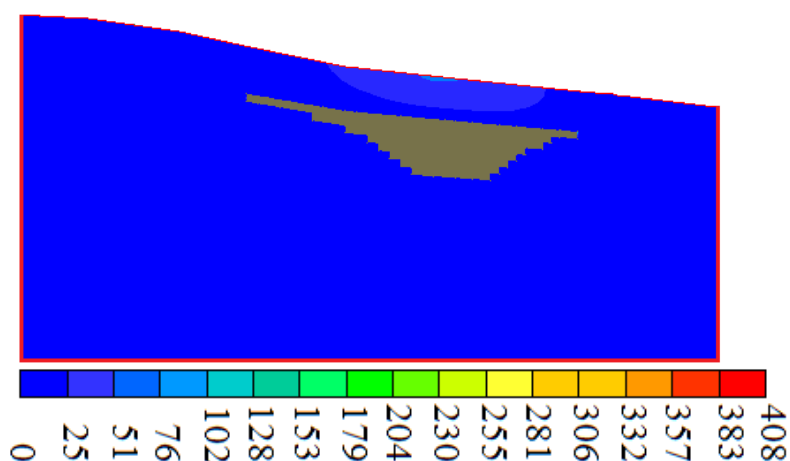
۶-۳-۲. سناریو هشتم: محاسبه توزیع LNAPL در فازهای مختلف

در این سناریو، فرض می شود که فاز آزاد LNAPL تا ۵۰ سال بر روی سطح آب زیرزمینی باقی می ماند و هیچ عملیات به سازی بر روی آن انجام نشده است. با این فرض بخش فازهای مختلف محاسبه می شود. شکل (۴۸-۶) توزیع زمانی فازهای مختلف را نشان می دهد. با کاهش بخش LNAPL آزاد بخش های محلول و تبخیر شده افزایش می یابد. بخش فاز جذب شده در ابتدا افزایش

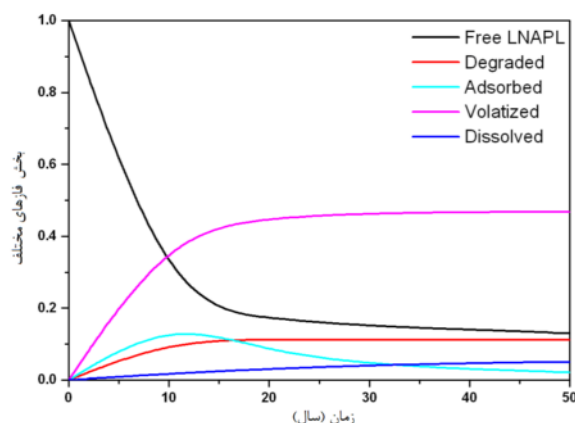
می یابد، اما حدوداً بعد از ۱۱ سال تدریجاً کاهش پیدا می کند. این کاهش احتمالاً به این دلیل است که یک تعادل محلی بین فاز جذب شده و فازهای محلول و گازی برقرار شده است. شکل (۴۸-۶) به طور آشکار نشان می دهد که فرآیند تبخیر به اتمسفر می تواند به طور قابل ملاحظه ای بر تحول و انتقال فاز آزاد LNAPL تأثیر بگذارد.



شکل (۴۶-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گازی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، یک لایه نازک از فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی از روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۵۰ سال باقی مانده است.



شکل (۴۷-۶): نتایج شبیه سازی دو بعدی: توزیع غلظت فاز گازی هیدروکربن های فرار در مدت زمان ۵۰ سال با لحاظ تجزیه بیولوژیکی. در این سناریو، فاز آزاد آلاینده های هیدروکربنی از روی سطح سفره آب زیرزمینی بعد از ۴۲ سال به طور کامل حذف گردید.



شکل (۶-۴۸): توزیع LNAPL در فازهای مختلف.

۴-۶. مدل سازی تجزیه هیدروکربن های نفتی به وسیله میکروارگانیسم های

بومی منطقه تحت شرایط احیای نیترات (نیترات زدایی)

۴-۶-۱. تنظیم مدل و داده های ورودی

نتایج مطالعات صحرایی نشان داد که تجمع نیتروژن در خاک ناحیه صنعتی ری و شرکت پالایش نفت تهران بالا است. این موضوع می تواند بیانگر تجزیه هیدروکربن های نفتی تحت شرایط نیترات زدایی در منطقه باشد. بنابراین، یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی تجزیه هیدروکربن های نفتی تحت شرایط نیترات زدایی در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. چون در ناحیه مذکور تنوعی از آلاینده های نفتی در سفره آب زیرزمینی مشخص شده است، در مدل سازی مقادیر کل هیدروکربن ها در نظر گرفته می شود. شبیه سازی به صورت نمایش از بالا انجام پذیرفت.

ابعاد مدل دو بعدی مذکور ۳۰۰۰ متر در امتداد افقی و ۵۰۰۰ متر در امتداد عمودی است که شامل ۱۵۳۶۰ حجم کنترلی می باشد. سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض شد. مقادیر غلظت بر حسب میلی گرم بر لیتر ارائه شده است. داده های ورودی مدل در جدول (۶-۵) آورده شده اند.

جدول (۵-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه‌سازی.

مرجع	مقدار	گسسته‌سازی فضایی و زمانی
	۳۰۰۰ متر	طول مدل در امتداد X
	۵۰۰۰ متر	عرض مدل در امتداد Y
	۱۵۳۶۰	تعداد المان‌های حجمی
	۵۰ سال	مدت زمان شبیه‌سازی
	۵۰	تعداد گام‌های زمانی
	۱۰۰۰	تعداد تکرار
مرجع	مقدار	پارامترهای جریان و انتقال
	$8/0.7 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	هدایت هیدرولیکی در امتداد X
	$8/0.7 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	هدایت هیدرولیکی در امتداد Y
	$1/7 \text{ gr/cm}^3$	چگالی خشک خاک
	۰/۴۱	تخلخل
	۱۵ متر	ضریب پراکندگی طولی (α_L)
	۱ متر	ضریب پراکندگی عرضی (α_T)
	$7/16 \times 10^{-8} \text{ m/s}$	سرعت جریان آب زیرزمینی
(Choi et al., 2009)	$1/86 \text{ mg/L}$	غلظت میکروبی
	18 mg/L	غلظت اولیه و ورودی نیترات
	۲	عامل تأخیر آلاینده (R)
(Choi et al., 2009)	$1/33 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$	ثابت نرخ مرتبه اول تجزیه آلاینده (k_1)
(Choi et al., 2009)	$4/44 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$	حداکثر نرخ رشد ویژه آلاینده (μ_m)
(Choi et al., 2009)	279 mg/L	ثابت نیمه اشباع آلاینده (K_C)
(Choi et al., 2009)	۰/۱۴	ضریب بازده میکروبی (Y)
(Choi et al., 2009)	$1/60 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$	ضریب نرخ مرگ میکروبی (k_{dec})
(Choi et al., 2009)	۲/۱۵	ضریب استوکیومتری نیترات (f)
(Choi et al., 2009)	130 mg/L	ثابت بازداري آلاینده (K_I)
(Choi et al., 2009)	$0/2 \text{ mg/L}$	ثابت نیمه اشباع نیترات ($K_{NO_3^-}$)

شرایط اولیه و مرزی زیر برای مدل تعیین گردید:

• غلظت صفر به عنوان شرط اولیه در نظر گرفته شد. این مقدار، توزیع آلاینده محلول را در

حوزه جریان قبل از مدل سازی توصیف می کند $(C(x, 0)=0, \quad x \geq 0)$.

• غلظت ثابت برابر با غلظت آلاینده در مرز ورودی مدل در نظر گرفته شد

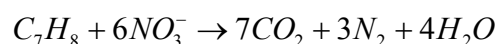
$(C(0, t)=C_0, \quad t > 0)$.

• غلظت ثابت برابر با صفر در مرز خروجی مدل تعیین شد $(C(\infty, t)=0, \quad t \geq 0)$.

در این شبیه سازی فرض می شود که هیدروکربن های نفتی تحت شرایط غیر هوازی احیای

نیترات به صورت بیولوژیکی تجزیه می شوند. به عنوان مثال، واکنش نیترات زدایی تلوثن به صورت زیر

بیان می شود (Molson, 2000):



(۵-۶)

۶-۴-۲. نتایج شبیه سازی

۶-۴-۲-۱. سناریو اول: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت، جذب

و تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط نیترات زدایی با فرض این که بعد از ۳۶ سال منابع آلودگی

از سطح زمین رفع می گردد

در این شبیه سازی، برای توصیف فرآیند تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط نیترات زدایی شامل رشد

میکروبی از مدل ارائه شده توسط چویی و همکاران (معادلات ۲-۸۴، ۲-۸۵ و ۲-۸۷ فصل دوم)

استفاده شد. برای بکارگیری این مدل، یک گروه از میکروب های متحرک غیر هوازی با غلظت پایین

در محیط در نظر گرفته شد. مدل با این فرض اجرا گردید که منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح

زمین رفع می شوند. بنابراین، بعد از این زمان هیچ نشستی از سطح زمین رخ نمی دهد اما هیچ روش

پاک سازی برای خاک و آب زیرزمینی آلوده اجرا نمی شود. همچنین، فرض می شود که جمعیت

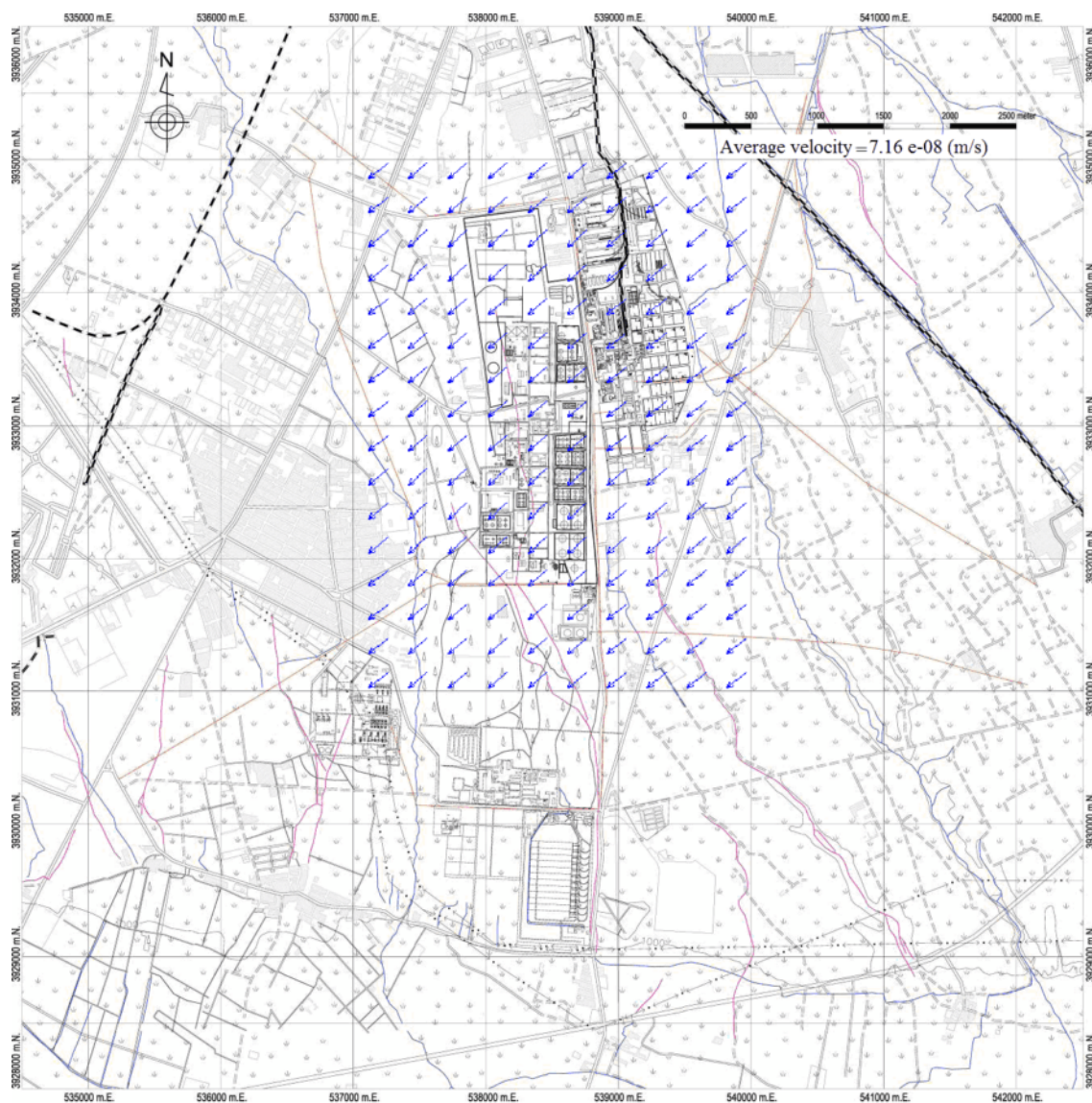
میکروبی به فاز جامد محیط آبخانه ای جذب نمی شود و نیترات تنها الکترون گیرنده موجود در محیط

است. با این فرضیات مدل برای ۵۰ گام زمانی اجرا شد. نتایج مدل سازی در دو گام زمانی ۳۶ سال و ۵۰ سال در شکل های ۴۹-۶ تا ۵۷-۶ نشان داده شده اند.

مقایسه شکل (۶-۵۰) با شکل

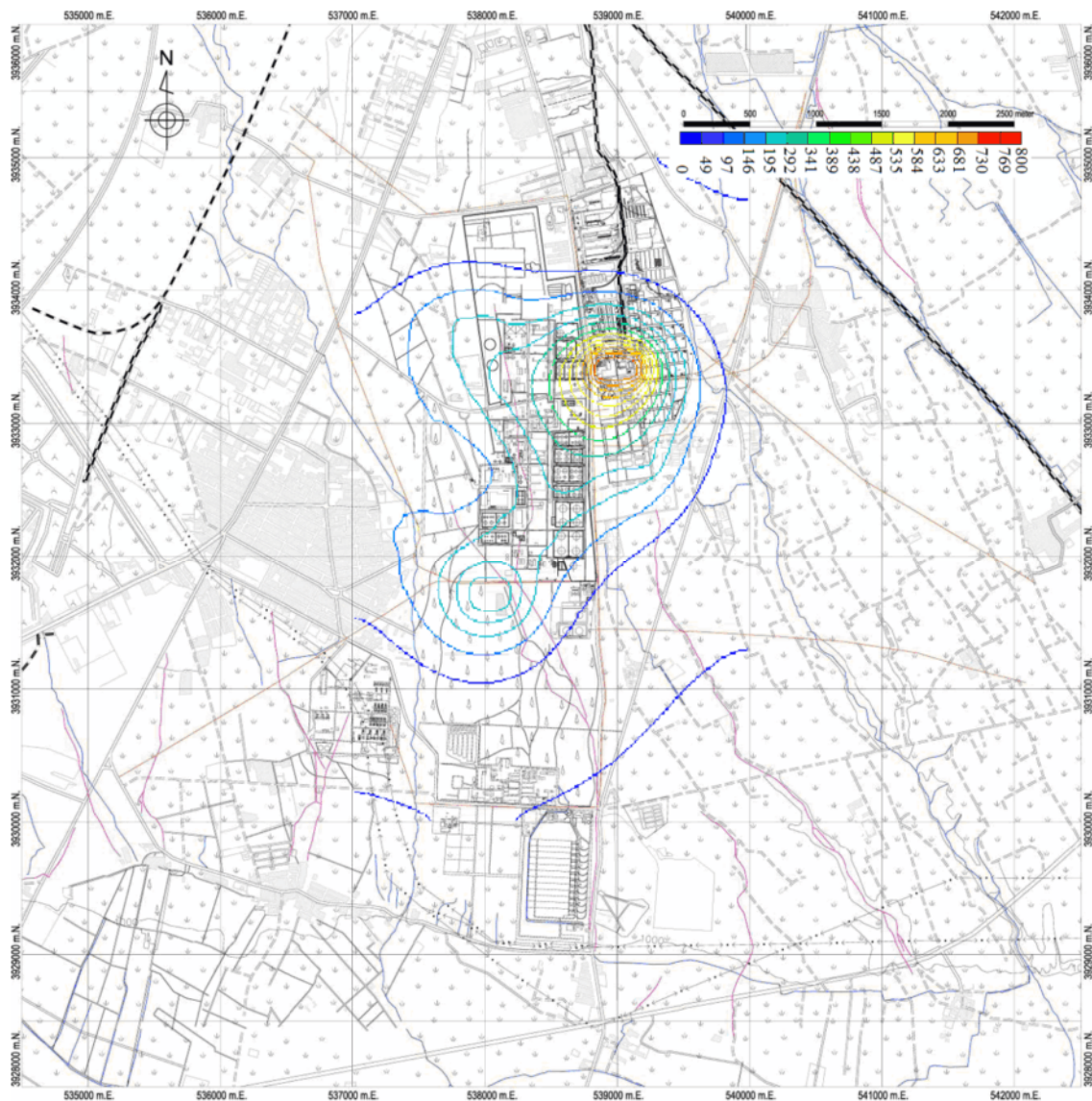
(۴۴-۵) در فصل پنجم حاکی از انطباق خوب نتایج مدل سازی عددی با داده های صحرایی است.

از مقایسه شکل های (۶-۵۰) تا (۶-۵۲) می توان دریافت که در ناحیه (a) به دلیل غلظت بالای آلاینده (بالاتر از 500 mg/L) هیچ واکنش تجزیه بیولوژیکی رخ نمی دهد. در نتیجه، در آن ناحیه نیترات مصرف نمی شود و غلظت آن برابر غلظت ورودی باقی می ماند. از طرفی، در ناحیه مذکور جمعیت میکروبی فاقد رشد بوده و فقط تخریب می شوند بنابراین غلظت آن به سمت صفر کاهش می یابد.



شکل (۶-۴۹): بردارهای سرعت جریان آب زیرزمینی.

در ناحیه (b) ، به دلیل تجزیه هیدروکربن های نفتی تحت شرایط نیترات زدایی، تمامی مقدار نیترات مصرف می شود و غلظت آن به صفر می رسد. همان طور که در شکل (۶-۵۲) مشاهده می گردد، وقوع واکنش نیترات زدایی در ناحیه مذکور همچنین باعث رشد جمعیت میکروبی می شود که با افزایش غلظت در آن ناحیه مشخص می گردد.



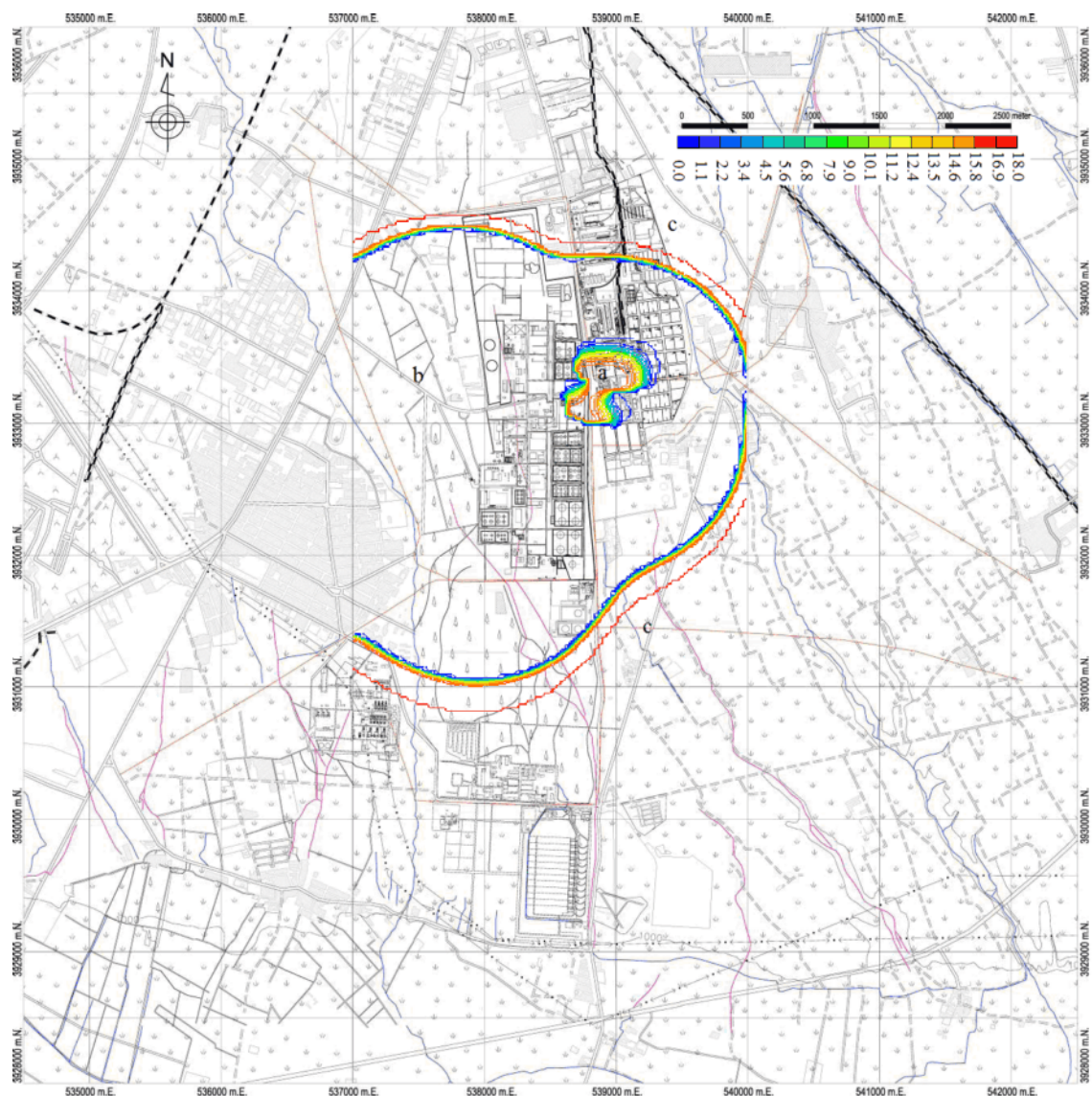
شکل (۶-۵۰): توزیع غلظت هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

غلظت هیدروکربن های نفتی در

ناحیه (c) صفر است، بنابراین، در این ناحیه هیچ واکنش بیولوژیکی صورت نمی گیرد که موجب

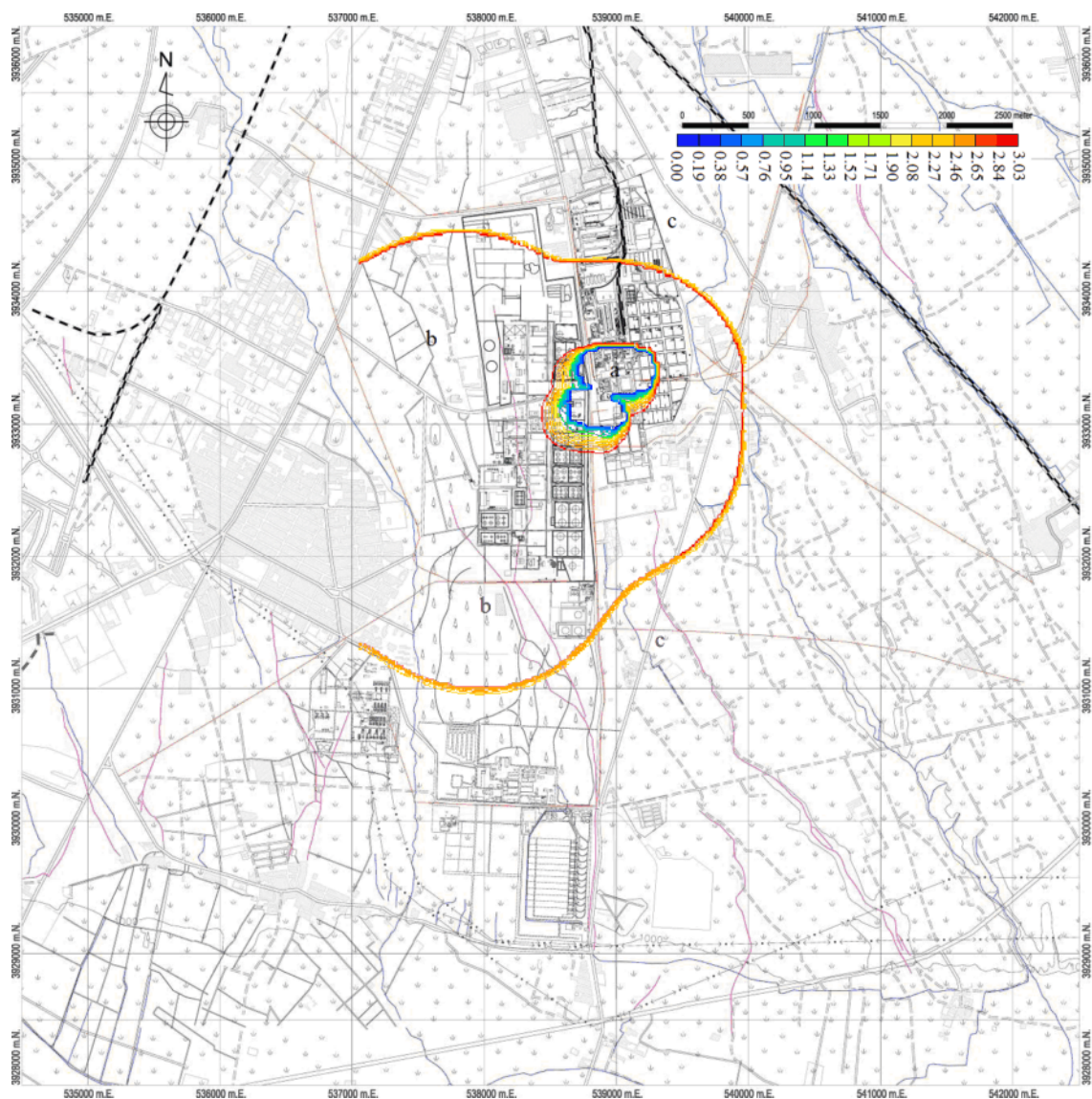
مصرف نیترات و رشد جمعیت میکروبی شود. از طرفی جمعیت میکروبی تحت سینتیک مرتبه اول

تخریب می‌شود، لذا، در ناحیه (c) غلظت آن کاهش می‌یابد.



شکل (۶-۵۱): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

شکل (۶-۵۳) ناحیه فعالیت واکنش نیترات زدایی را به همراه نرخ واکنش آن نشان می‌دهد. همان طور که در شکل مشاهده می‌شود، واکنش نیترات زدایی جزء واکنش‌های اکسیداسیون و احیای حاشیه ای بوده که نیاز به اختلاط الکترون دهنده (هیدروکربن‌های نفتی) و الکترون گیرنده (نیترات) دارد.



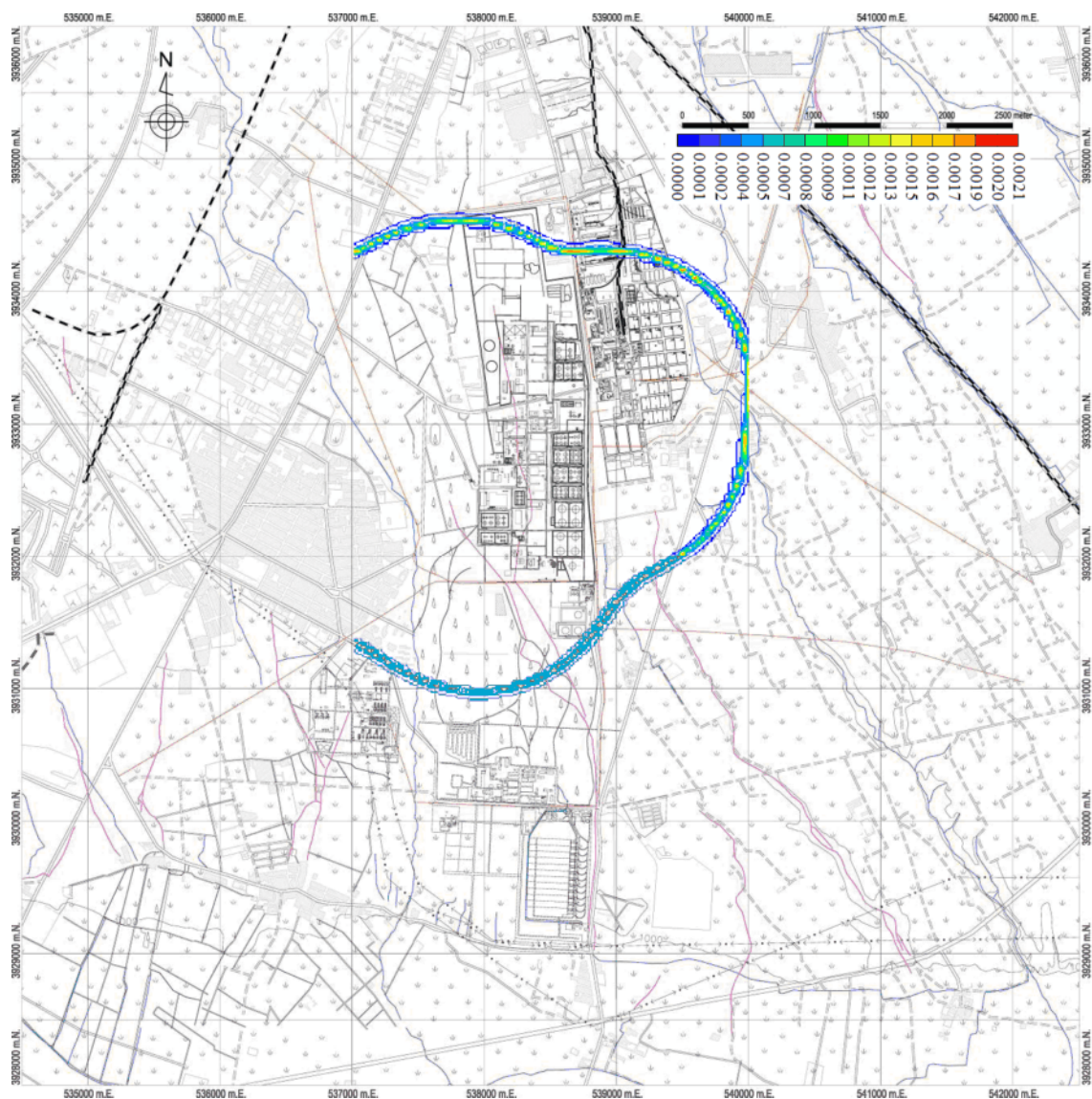
شکل (۶-۵۲): توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

واکنش های اکسیداسیون و احیای

حاشیه ای به وسیله فرآیند پراکندگی تسریع می شوند. مشخص سازی مناطقی که در آن واکنش های

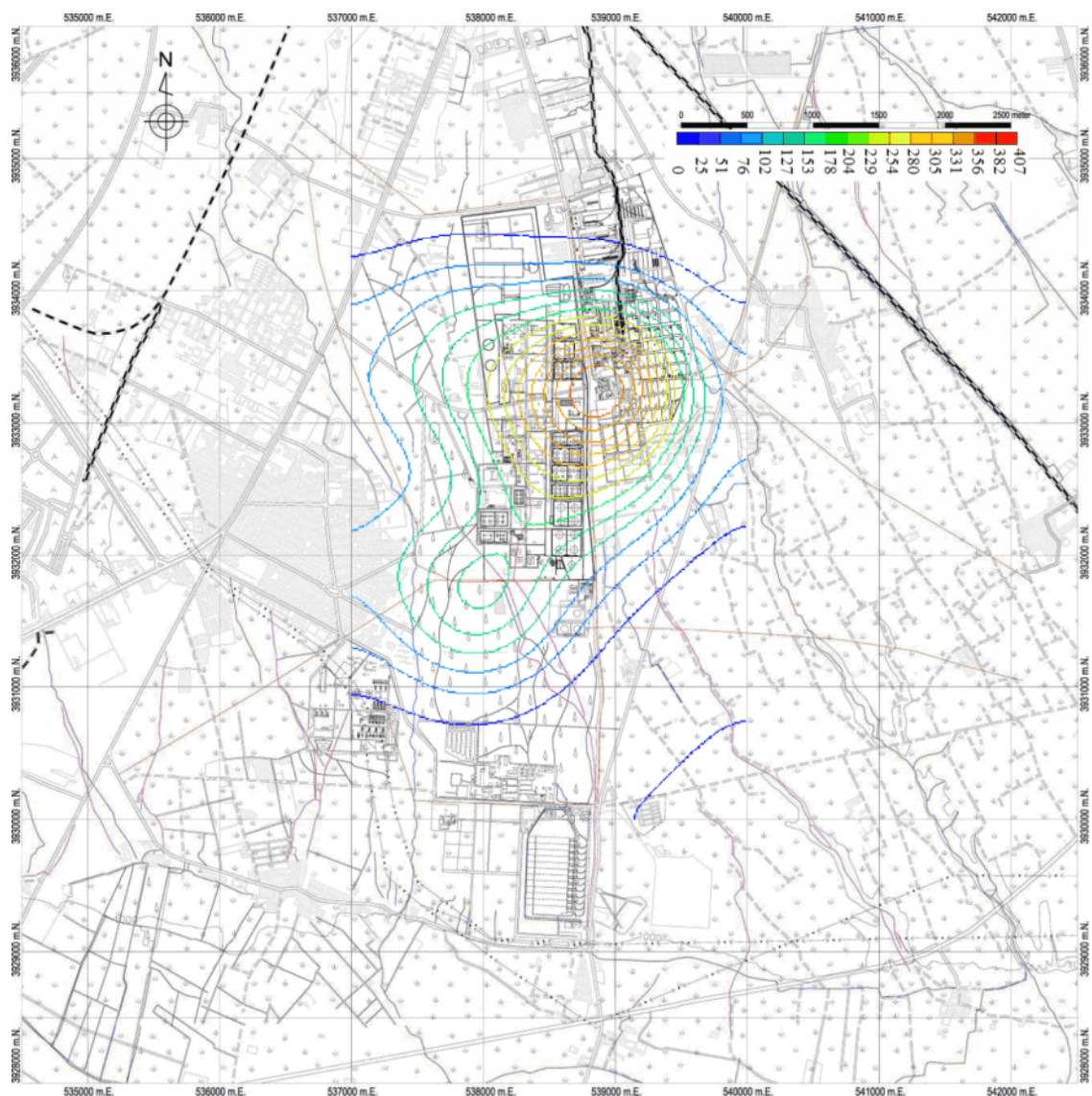
ژئوشیمیایی مختلف از جمله نیترات زدایی رخ می دهند، در مرحله طراحی یک استراتژی به سازی

مناسب برای ناحیه می تواند مناسب باشد.



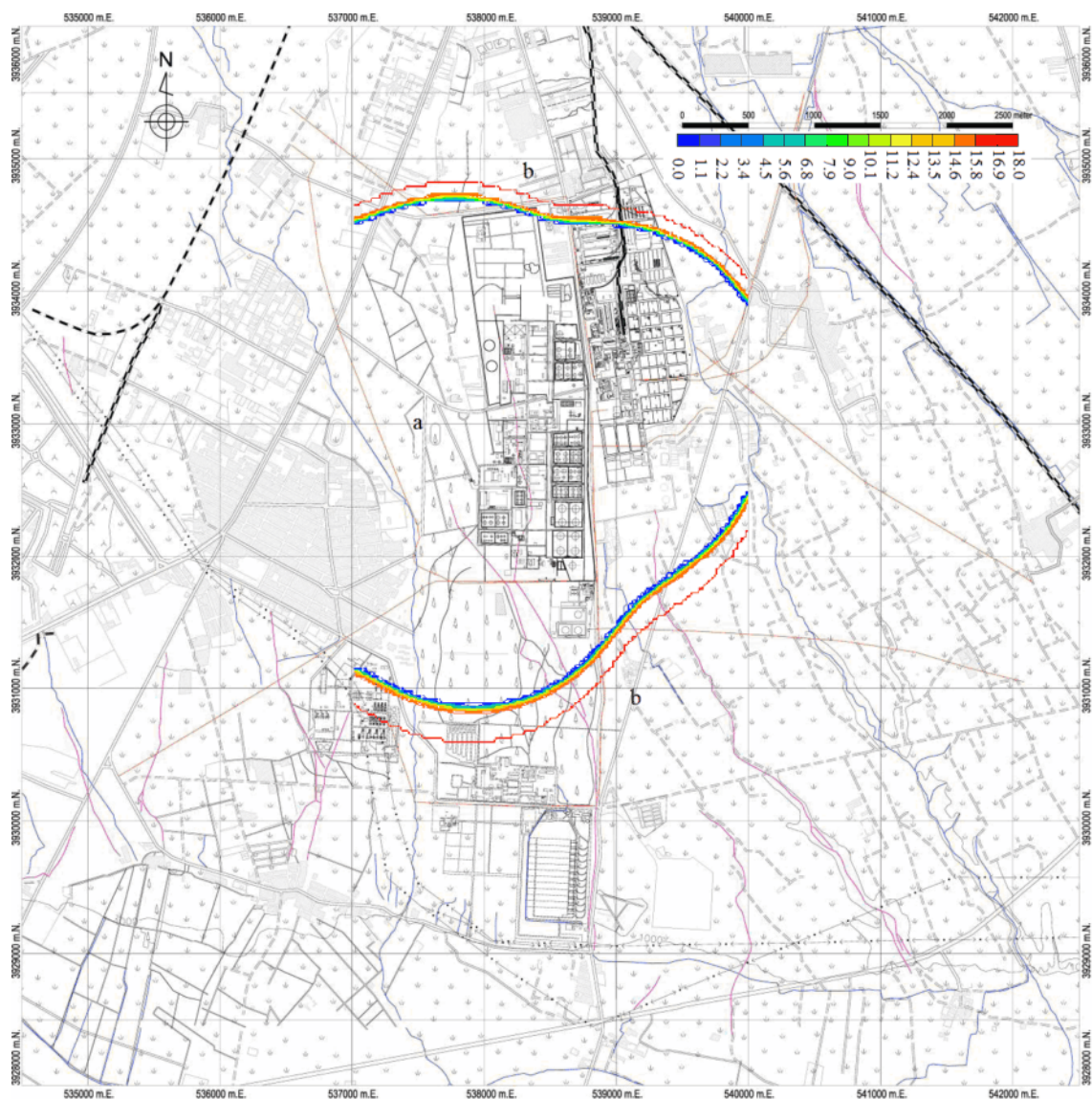
شکل (۶-۵۳): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۳۶ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

همان طور که در شکل (۶-۵۴) مشاهده می شود، حذف منابع آلودگی در سطح زمین بعد از گام زمانی ۳۶ سال باعث کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی محلول در آب زیرزمینی در گام زمانی ۵۰ سال می گردد. اما، آلودگی نفتی در لایه های خاک بالای سفره هنوز موجود است و این آلودگی توسط آب های تغذیه ای می تواند شسته شده و وارد سیستم آبخانه ای شوند.



شکل (۶-۵۴): توزیع غلظت هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

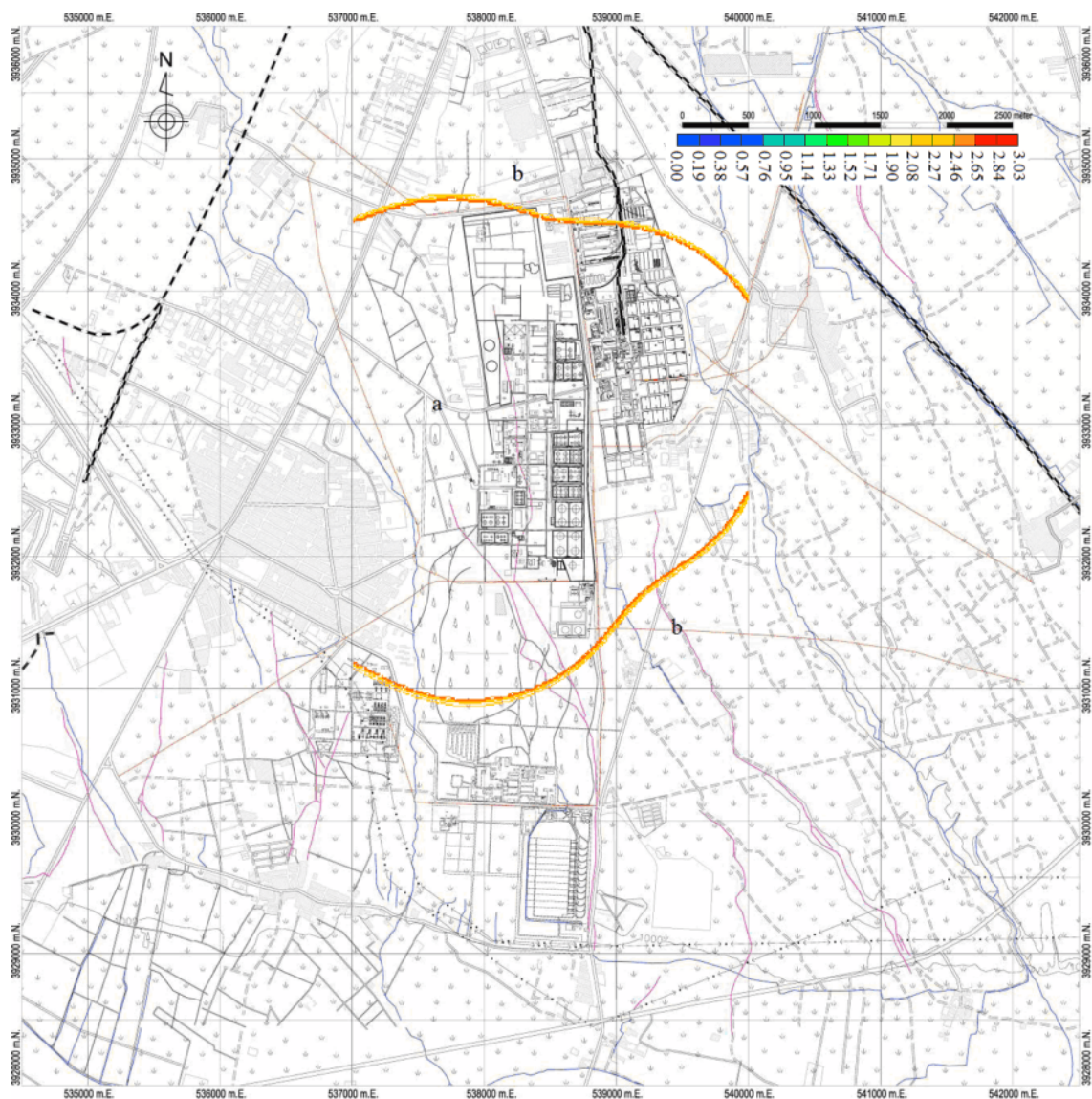
بنابراین، علی‌رغم کاهش غلظت هیدروکربن‌های نفتی محلول در گام زمانی ۵۰ سال نسبت به گام زمانی ۳۶ سال، پلوم آلاینده هنوز به شکل پیوسته باقی است. با توجه به شکل‌های (۶-۵۵) و (۶-۵۶) واکنش نیترات زدایی و تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن‌های نفتی در مناطقی که آلاینده با غلظت کمتر از 500 mg/L موجود است (ناحیه (a))، رخ می‌دهد که این امر موجب مصرف هیدروکربن‌های نفتی و نیترات و رشد جمعیت میکروبی در نواحی مذکور می‌شود.



شکل (۶-۵۵): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

در سایر مناطق (ناحیه (b)) که

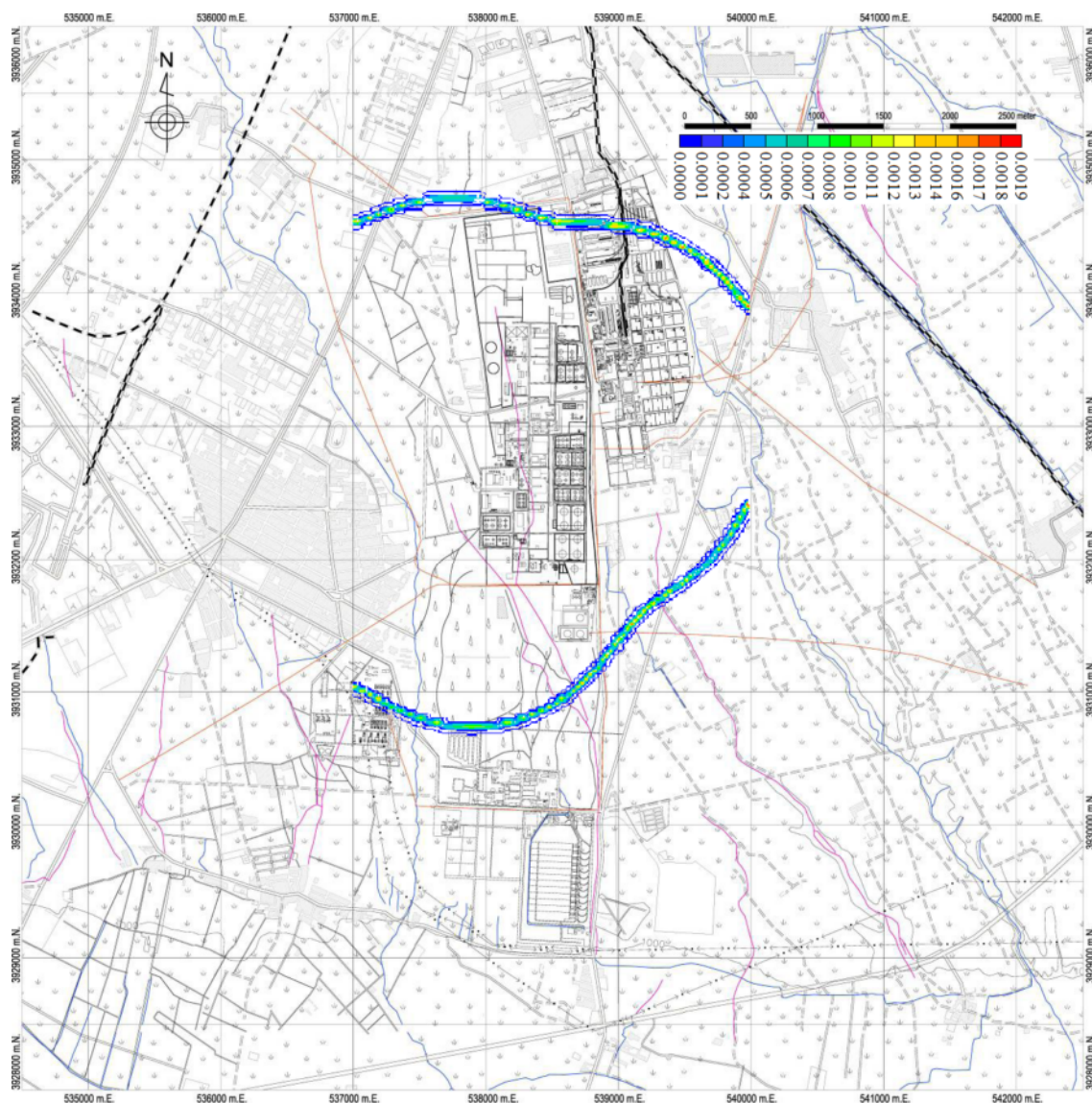
هیدروکربن های نفتی حضور ندارند، غلظت نیترات در حد غلظت ورودی باقی می ماند و جمعیت میکروبی به دلیل تخریب مرتبه اول کاهش غلظت می دهد.



شکل (۶-۵۶): توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

شکل (۶-۵۷) ناحیه فعالیت

واکنش نیترات زدایی و نرخ واکنش آن را در گام زمانی ۵۰ سال نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نرخ واکنش نیترات زدایی در گام زمانی ۵۰ سال نسبت به گام زمانی ۳۶ سال کاهش یافته است. این موضوع به دلیل کاهش غلظت هیدروکربن‌های نفتی بعد از گام زمانی ۳۶ سال است.



شکل (۶-۵۷): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شدند.

۶-۴-۲. سناریو دوم: مدل دو بعدی واکنشی شامل فرآیندهای پراکندگی، پهنرفت،

جذب و تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط نیترات زدایی با فرض این که بعد از ۳۶ سال منابع

آلودگی از سطح زمین رفع و علاوه بر آن، خاک آلوده نیز پاک سازی می گردد

در این سناریو، علاوه بر حذف منابع آلودگی در سطح زمین، خاک آلوده به هیدروکربن های

نفتهای بالای سطح آب زیرزمینی نیز مورد پاک سازی قرار می گیرد. بنابراین، آلودگی راه یافته به سفره

پس از مدت زمان ۳۶ سال به وسیله فرآیندهای مختلف پراکندگی، جذب سطحی و تجزیه بیولوژیکی و تحت شرایط نیترات زدایی به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد (شکل ۶-۵۸).

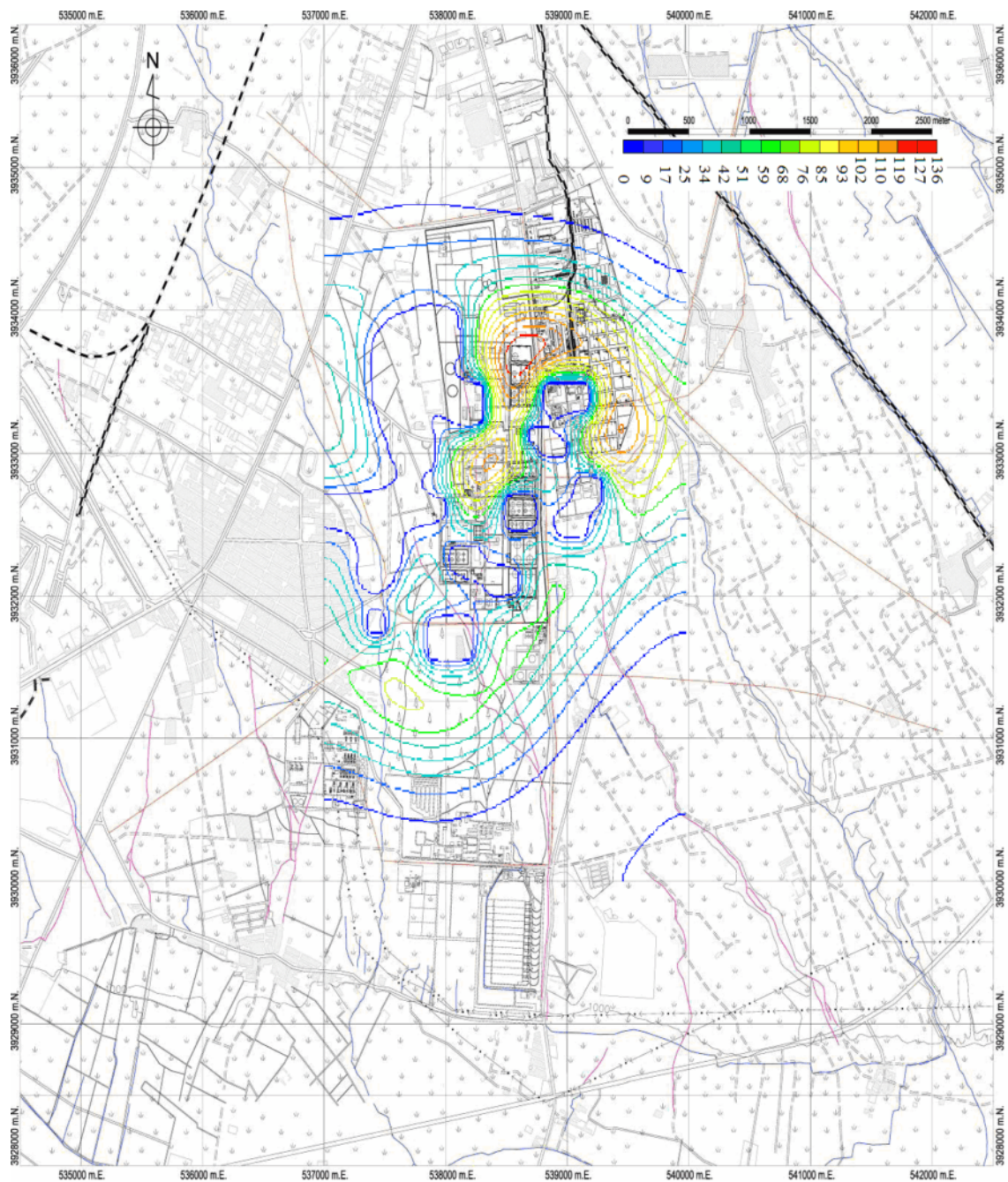
اما، با این وجود هنوز غلظت هیدروکربن های نفتی در برخی مناطق سایت بالاتر از حد استاندارد است که می تواند باعث خطرات سلامتی گردد. این موضوع نشان دهنده آن است که فرآیندهای رقیق سازی طبیعی به تنهایی قادر به پاک سازی کامل سایت مورد مطالعه از آلودگی‌های نفتی نمی باشند و باید برای پاک سازی کامل سیستم آبخانه ای یک استراتژی به سازی مناسب با توجه به شرایط سایت طراحی شود.

همان طور که در شکل (۶-۵۸) مشاهده می شود، در برخی از نواحی سایت غلظت هیدروکربن های نفتی به صفر می‌رسد. این کاهش غلظت و تغییر شکل پلوم آن ها در اثر فرآیندهای پراکندگی هیدرودینامیکی و پهنرفت ایجاد می‌گردد.

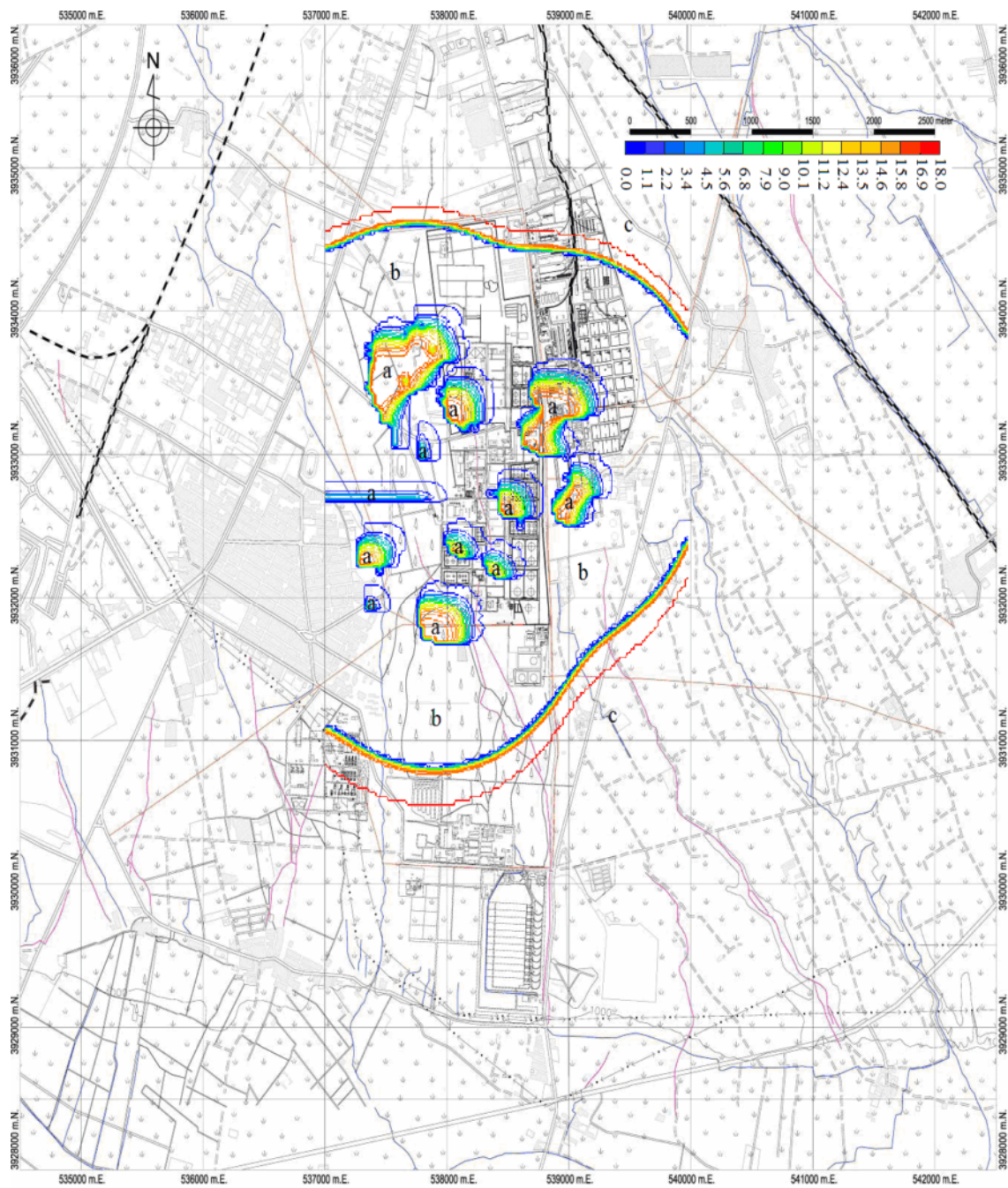
با مقایسه شکل‌های (۶-۵۸) تا (۶-۶۰) مشخص می شود که در نواحی نشان داده شده با نام (a) به دلیل عدم حضور هیدروکربن های نفتی واکنش نیترات زدایی رخ نمی‌دهد. در نتیجه، در این نواحی غلظت نیترات در حد غلظت ورودی باقی مانده و غلظت جمعیت میکروبی به واسطه تخریب به صفر می‌رسد.

در ناحیه (b)، هیدروکربن های نفتی و نیترات در واکنش نیترات زدایی مصرف می‌شوند. این امر باعث کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی و مصرف کامل نیترات و رشد جمعیت میکروبی در این ناحیه می‌شود.

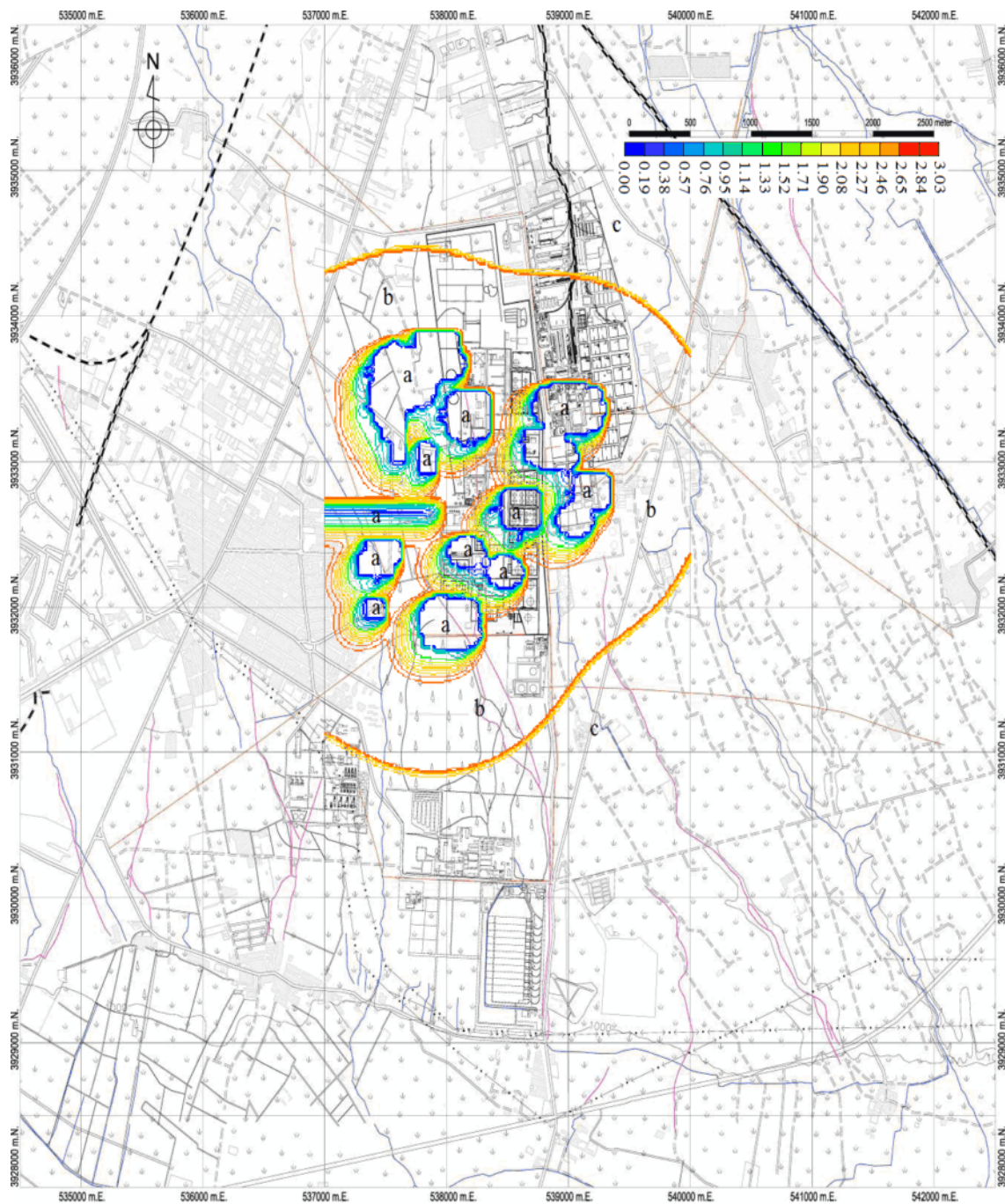
کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی در ناحیه (c) در اثر فرآیند پراکندگی هیدرودینامیکی، موجب کاهش نرخ مصرف نیترات و نرخ رشد جمعیت میکروبی در اثر واکنش نیترات زدایی می‌گردد. شکل (۶-۶۱) ناحیه فعالیت واکنش نیترات زدایی به همراه نرخ واکنش آن را در این سناریو نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌گردد نرخ واکنش نیترات زدایی نسبت به سناریو اول کمی کاهش یافته است. این امر مربوط به کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی در این سناریو می‌باشد.



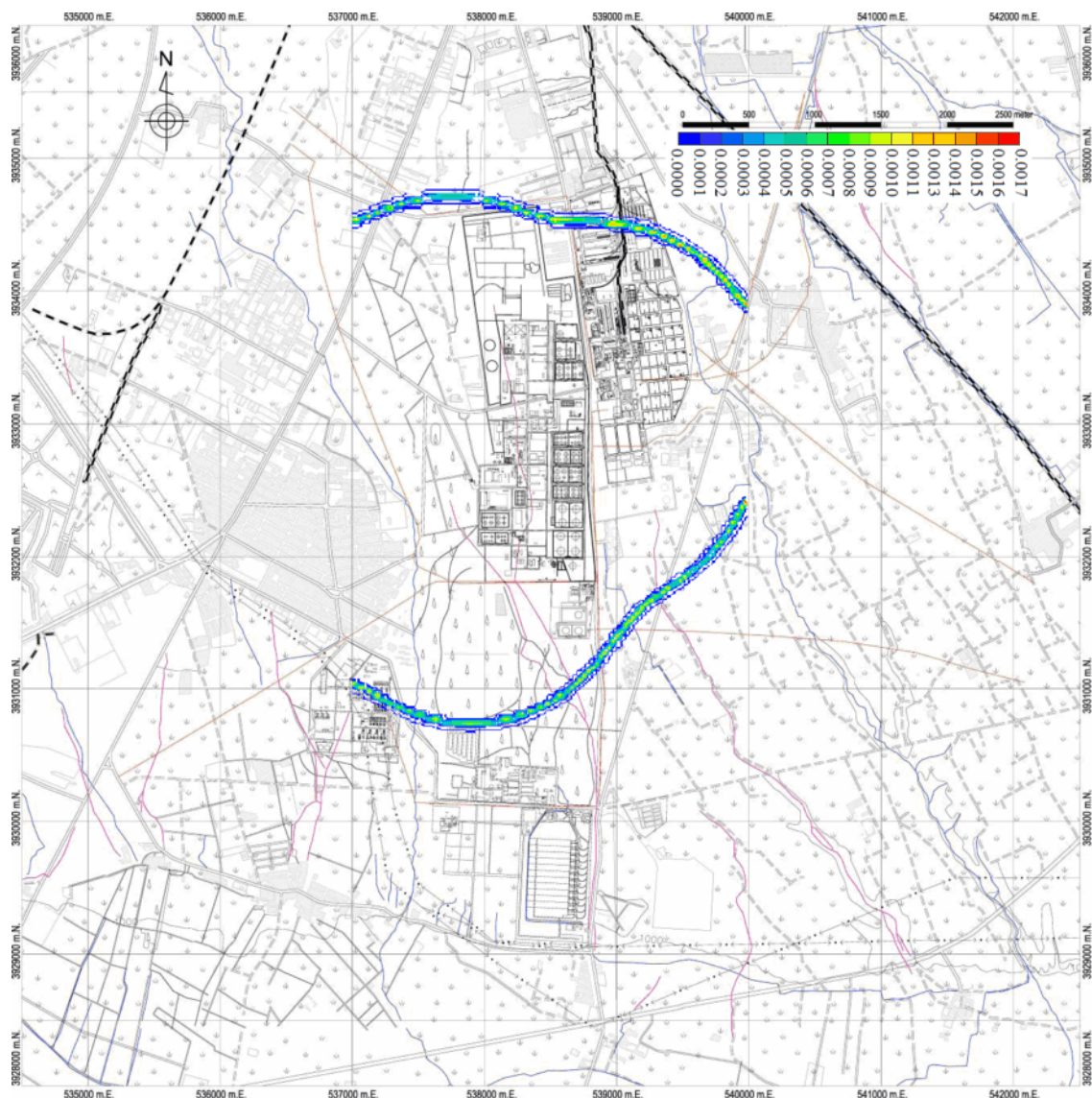
شکل (۶-۵۸): توزیع غلظت هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده و خاک آلوده نیز پاک‌سازی گردید.



شکل (۶-۵۹): توزیع غلظت نیترات در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده و خاک آلوده نیز پاک‌سازی گردید.



شکل (۶-۶۰): توزیع غلظت جمعیت میکروبی در مدت زمان ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده و خاک آلوده نیز پاک‌سازی گردید.



شکل (۶-۶): نرخ واکنش نیترات زدایی بعد از ۵۰ سال. در این سناریو، منابع آلودگی بعد از ۳۶ سال از سطح زمین حذف شده و خاک آلوده نیز پاک‌سازی گردید.

۶-۵. مدل سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب

زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری با فرض عملیات پمپاژ بعد از ۳۶ سال

۶-۵-۱. تنظیم مدل و داده‌های ورودی

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن‌های نفتی شناور بر روی سطح

آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. شبیه‌سازی به صورت نمایش از بالا انجام پذیرفت.

ابعاد مدل دو بعدی مذکور ۳۰۰۰ متر در امتداد افقی و ۵۰۰۰ متر در امتداد عمودی است که شامل ۱۵۳۶۰ حجم کنترلی می باشد.

شرایط اولیه و مرزی زیر برای مدل تعیین گردید:

- اعمال غلظت صفر به عنوان شرط اولیه ($C(x, 0) = 0, \quad x \geq 0$)
- اعمال غلظت ثابت برابر با غلظت آلاینده در مرز ورودی مدل ($C(0, t) = C_0, \quad t > 0$).
- اعمال غلظت ثابت برابر با صفر در مرز خروجی مدل ($C(\infty, t) = 0, \quad t \geq 0$).

سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض گردید. مقدار متوسط بارش (تغذیه) ۰/۲۵ متر در سال در نظر گرفته شد. مقادیر ضخامت بر حسب متر ارائه شده است. داده های ورودی مدل در جدول (۶-۶) ارائه شده اند.

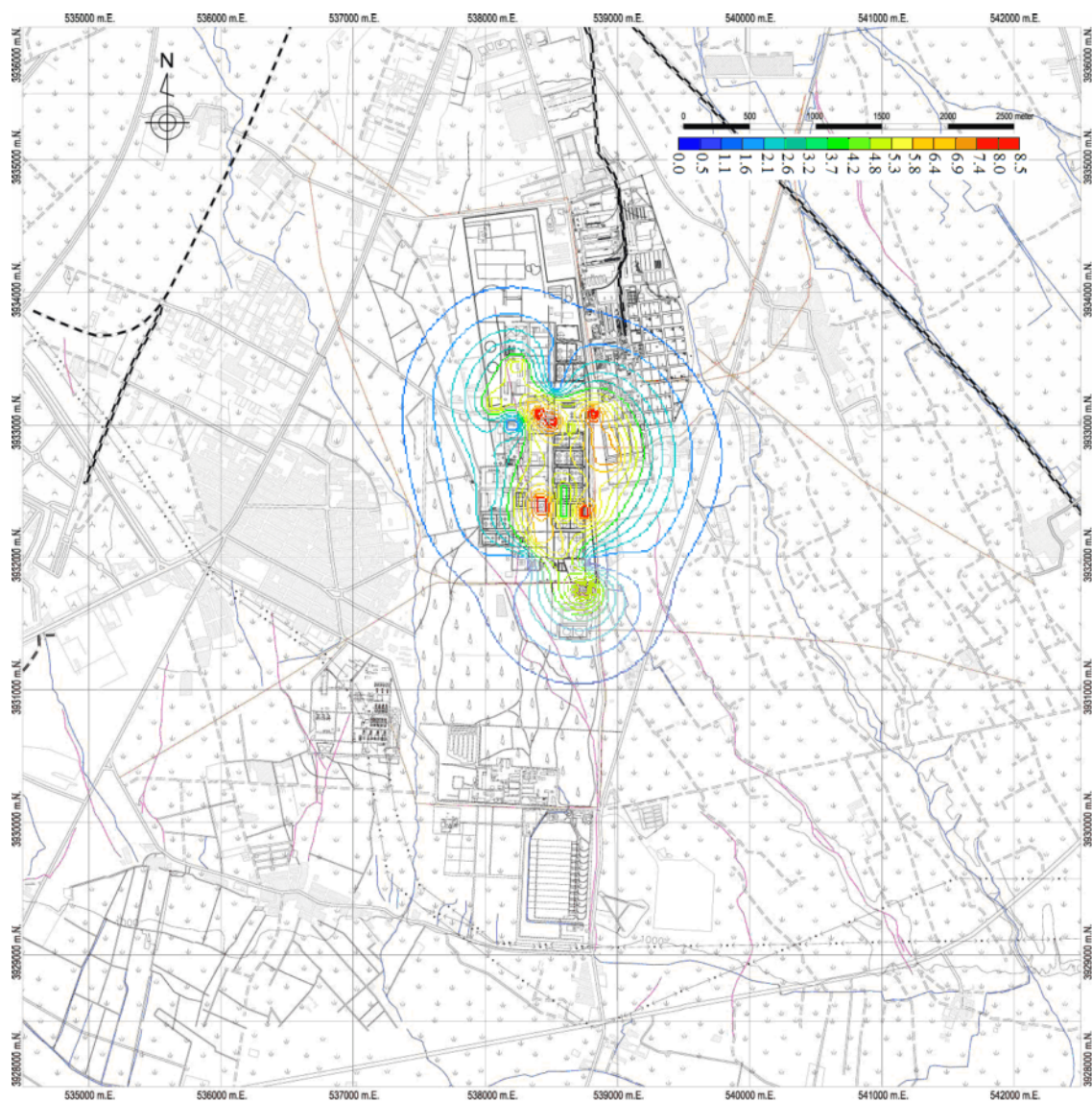
۶-۵-۲. نتایج شبیه سازی

برای شبیه سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری از معادله (۷۵-۲) ارائه شده در فصل دوم استفاده شد. در این سناریو فرض شده که فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی بعد از ۳۶ سال با نرخ m^3/h ۳ پمپاژ می گردد.

در این شبیه سازی فرض گردید که هیچ تماس مستقیمی بین فازهای جامد و آزاد وجود ندارد و بین فازها تعادل محلی برقرار است. انتقال جرم از منطقه فاز آزاد هیدروکربن های نفتی به منطقه اشباع شده با فرآیند انحلال و به منطقه غیر اشباع به واسطه تبخیر در نظر گرفته می شود. با این فرضیات مدل اجرا گردید. نتایج مدل سازی در دو گام زمانی ۳۶ و ۵۰ سال نشان داده شده اند (شکل های ۶-۶۲ و ۶-۶۳).

جدول (۶-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه‌سازی

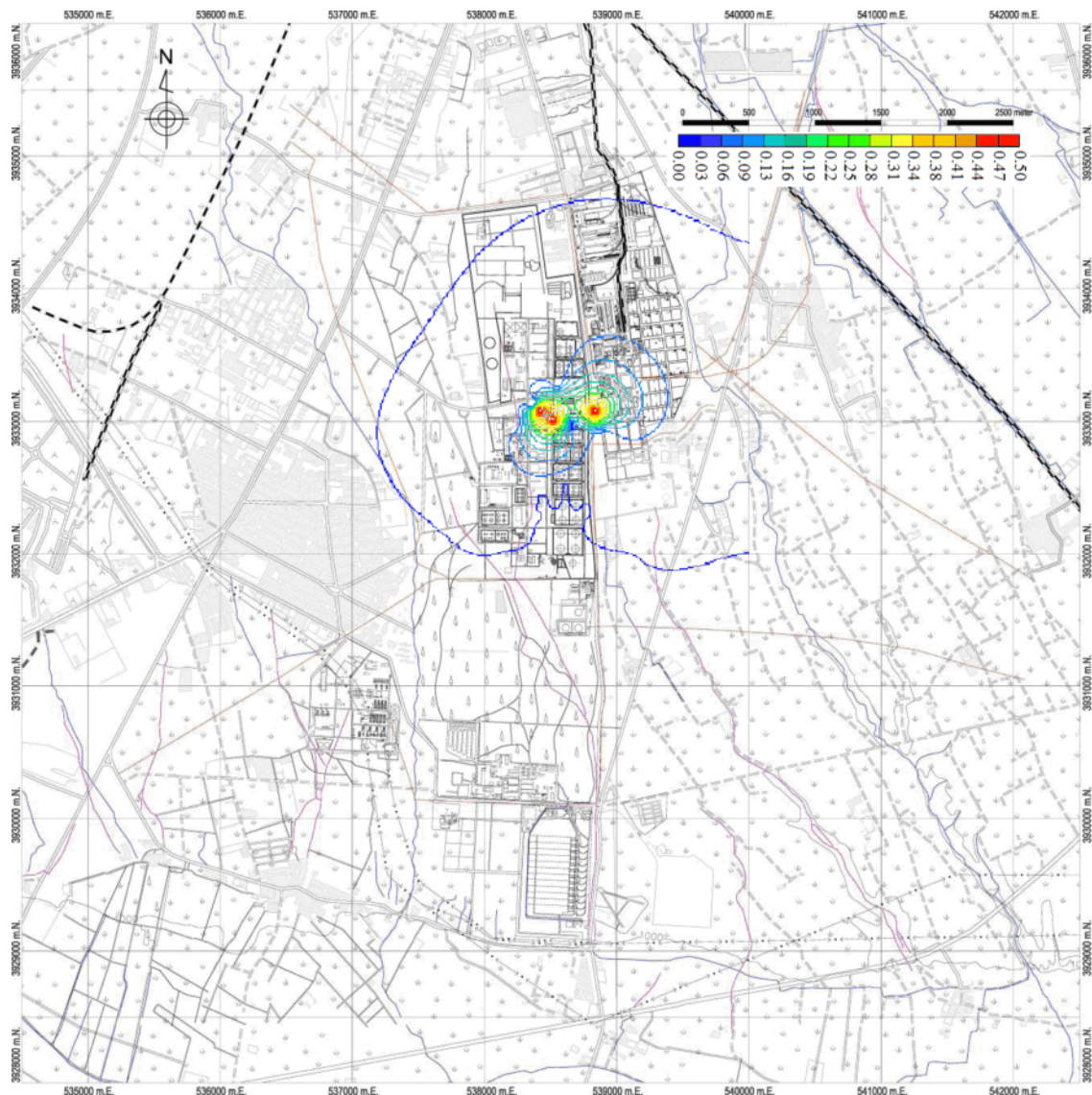
پارامتر	مقدار	مرجع
طول مدل در امتداد X	۳۰۰۰ متر	
عرض مدل در امتداد Y	۵۰۰۰ متر	
تعداد المان‌های حجمی	۱۵۳۶۰	
مدت زمان شبیه‌سازی	۵۰ سال	
تعداد گام‌های زمانی	۵۰	
تعداد تکرار	۱۰۰۰	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد X	$8/07 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد Y	$8/07 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی نفت در امتداد X	$1/19 \times 10^{-8} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی نفت در امتداد Y	$1/19 \times 10^{-9} \text{ m/s}$	
تخلخل (θ)	۰/۴۱	
آب محتوی (θ_w)	۰/۲	
تخلخل هوادار (θ_a)	۰/۰۷	
تخلخل پر شده از نفت (θ_{NAPL})	۰/۱۴	
ضریب پراکندگی طولی (α_L)	۱۵ متر	
ضریب پراکندگی عرضی (α_T)	۱ متر	
چگالی آب (ρ_w)	1000 kg/m^3	
چگالی نفت (ρ_{NAPL})	800 kg/m^3	
اشباع NAPL در لنز NAPL (S_{oo})	۰/۸۵	
اشباع آب باقی مانده (S_{ow})	۰/۱۵	(Kim and Corapcioglu, 2003)
اشباع NAPL باقی مانده (S_{oun})	۰/۰۵	(Kim and Corapcioglu, 2003)
نرخ جریان منبع NAPL (Q_o)	$0/022 \text{ m}^3/\text{day}$	
نرخ پمپاژ NAPL	$3 \text{ m}^3/\text{h}$	
عامل تأخیر (R_w)	۲	



شکل (۶-۶۲): ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن‌های نفتی شناور بر روی سطح آب بعد از ۳۶ سال.

نتایج شبیه‌سازی عددی در گام زمانی ۳۶ سال با نتایج بدست آمده از مطالعات صحرایی در شکل (۵-۴۷) فصل پنجم مقایسه شده‌اند. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل عددی ارائه شده به نحو خوبی توانسته ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب را شبیه‌سازی کند.

همان‌طور که در شکل (۶-۶۳) مشاهده می‌گردد، عملیات پمپاژ فاز آزاد هیدروکربن‌های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی بعد از ۳۶ سال موجب کاهش قابل توجه ضخامت پلوم فاز آزاد در گام زمانی ۵۰ سال می‌شود.



شکل (۶-۶۳): ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن‌های نفتی شناور بر روی سطح آب بعد از ۵۰ سال.

۶-۶. مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن‌های نفتی توسط سیستم قنوات

۶-۶-۱. تنظیم مدل و داده‌های ورودی

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنش هیدروکربن‌های نفتی توسط سیستم قنوات در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. شبیه‌سازی به صورت نمایش از بالا انجام پذیرفت. ابعاد مدل دو بعدی مذکور ۸۲۵۰ متر در امتداد افقی و ۸۲۵۰ متر در امتداد عمودی است که شامل ۸۴۶۴ حجم کنترلی می‌باشد. شرایط اولیه و مرزی اعمالی مشابه حالات قبل می‌باشد.

سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض شد. مقادیر غلظت بر حسب غلظت نسبی

ارائه شده است. داده‌های ورودی مدل در جدول (۷-۶) ارائه شده‌اند.

جدول (۷-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه‌سازی.

پارامتر	مقدار	مرجع
طول مدل در امتداد X	۸۲۵۰ متر	
عرض مدل در امتداد Y	۸۲۵۰ متر	
تعداد المان‌های حجمی	۸۴۶۴	
مدت زمان شبیه‌سازی	۵۰ سال	
تعداد گام‌های زمانی	۵۰	
تعداد تکرار	۱۰۰۰	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد X	$8/0.7 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد Y	$8/0.7 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	
تخلخل (θ)	۰/۴۱	
ضریب پراکندگی طولی (α_L)	۱۵ متر	
ضریب پراکندگی عرضی (α_T)	۱ متر	
ثابت تجزیه مرتبه اول هیدروکربن نفتی (k_1)	$0/00005 \text{ 1/day}$	
عامل تأخیر (R_w)	۲	

۶-۶-۲. نتایج شبیه‌سازی

در این شبیه سازی، برای توصیف فرآیند تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن های نفتی در سیستم

قنات از سینتیک مرتبه اول استفاده شد. در مدل حاضر، فرآیند جذب به صورت خطی شبیه‌سازی

گردید. هدف از مدل سازی مشخص سازی این موضوع است که از طریق سیستم قنات، پلوم آلاینده تا

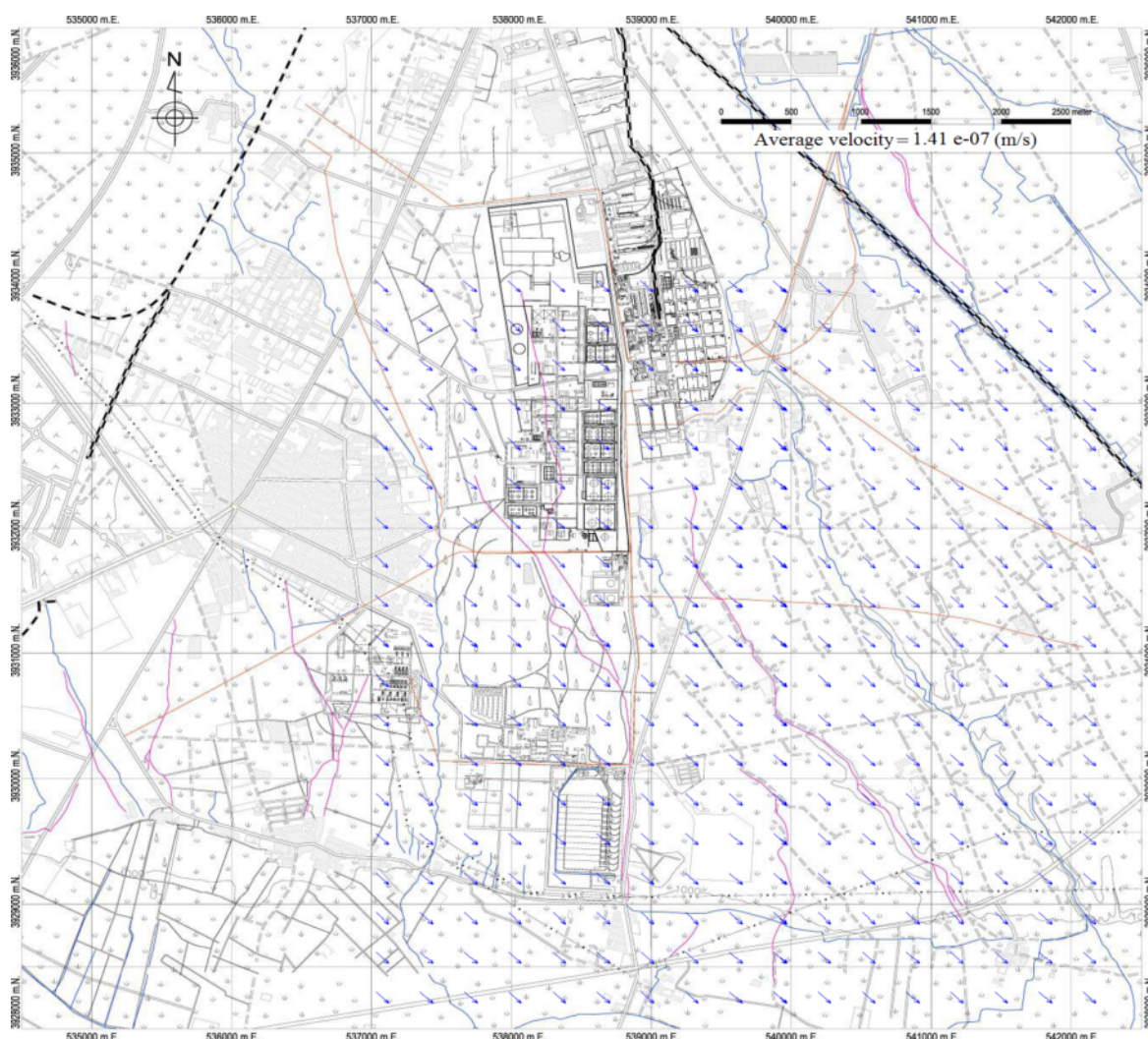
چه مسافتی می تواند در محیط گسترده شود. نتایج مدل سازی در دو گام زمانی ۳۶ سال و ۵۰ سال در

شکل‌های (۶۴-۶) تا (۶۶-۶) نشان داده شده است.

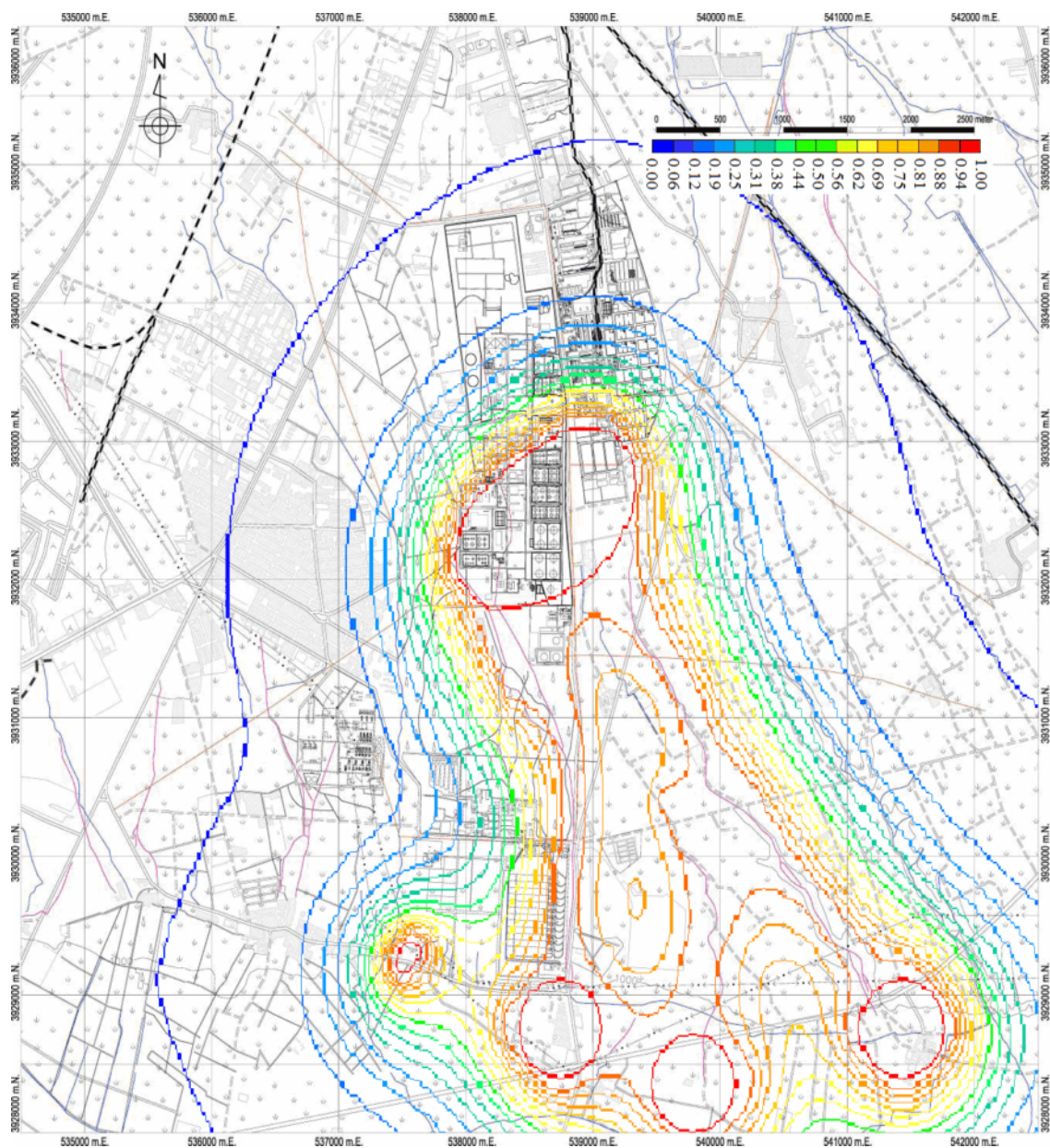
مقایسه شکل (۶۵-۶) با شکل‌های (۵-۴۸) و (۵-۴۹) در فصل پنجم بیانگر این موضوع است

که مدل عددی ارائه شده به خوبی توانسته است انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در سیستم

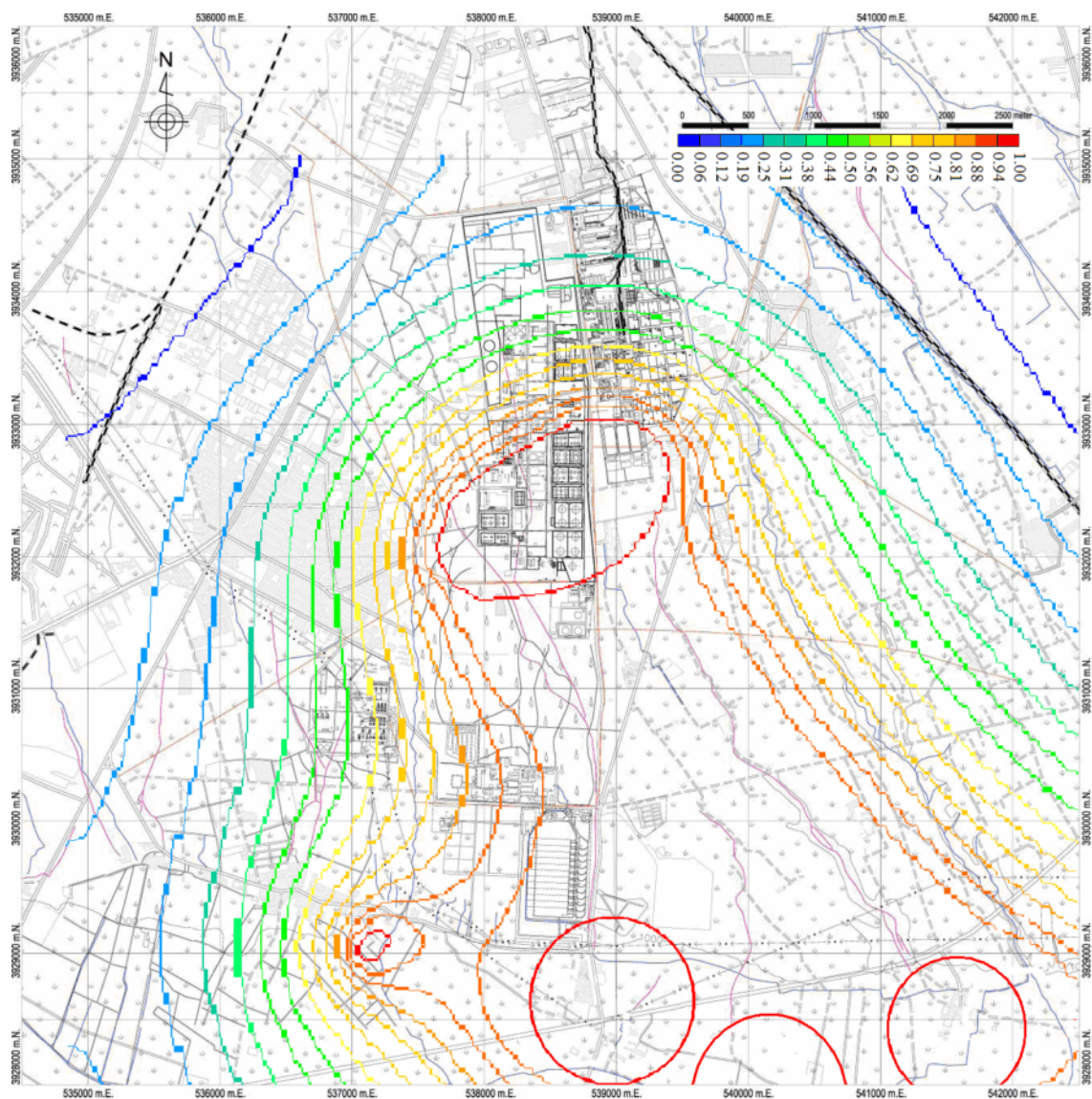
قنات را شبیه سازی نماید. همچنین نتایج حاصل از این مدل سازی این مطلب را تأیید می کند که انتشار آلودگی در جنوب ناحیه صنعتی ری به واسطه انتقال آن ها توسط سیستم قنات می باشد. همان طور که در شکل (۶-۶۶) مشاهده می گردد، در گام زمانی ۵۰ سال هیدروکربن های نفتی در مساحت بیشتری از ناحیه گسترده شده اند. بنابراین، برای جلوگیری از پخش بیشتر آلودگی نفتی توسط قنات باید سریعاً مسیر جریان قنات آلوده را مسدود کرده و هیدروکربن های نفتی از داخل کانال های آن ها جمع آوری گردد. در مرحله بعد، با طراحی یک استراتژی مناسب به سازی، سیستم قنات آلوده را به طور کامل پاک سازی نمود.



شکل (۶-۶۴): بردارهای سرعت جریان آب قنوات.



شکل (۶-۶۵): توزیع غلظت هیدروکربن‌های نفتی بعد از ۳۶ سال.



شکل (۶-۶۶): توزیع غلظت هیدروکربن‌های نفتی بعد از ۵۰ سال.

۶-۷. مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه

غیر اشباع در کل ناحیه صنعتی ری

۶-۷-۱. تنظیم مدل و داده‌های ورودی

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر

اشباع در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. شبیه‌سازی به صورت نمایش از بالا انجام پذیرفت.

ابعاد مدل دو بعدی مذکور ۳۰۰۰ متر در امتداد افقی و ۴۰۰۰ متر در امتداد عمودی است که

شامل ۱۲۱۶۸۰ حجم کنترلی می باشد.

شرایط اولیه و مرزی اعمالی مشابه حالات قبل می باشد.

سیستم جریان آب زیرزمینی به صورت پایا فرض شد. مقادیر غلظت بر حسب میلی گرم بر لیتر

ارائه شده است. داده های ورودی مدل در جدول (۸-۶) ارائه شده اند.

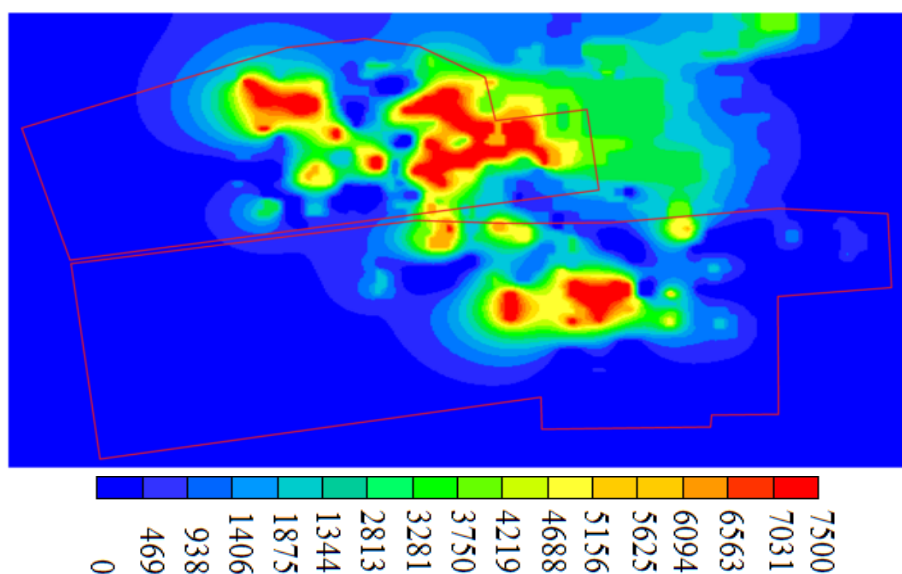
جدول (۸-۶): پارامترهای ورودی استفاده شده در این شبیه سازی.

پارامتر	مقدار	مرجع
طول مدل در امتداد X	۳۰۰۰ متر	
عرض مدل در امتداد Y	۴۰۰۰ متر	
تعداد المان های حجمی	۱۲۱۶۸۰	
مدت زمان شبیه سازی	۵۰ سال	
تعداد گام های زمانی	۵۰	
تعداد تکرار	۱۰۰۰	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد X	$8/0.7 \times 10^{-6} \text{ m/s}$	
هدایت هیدرولیکی آب در امتداد Y	$8/0.7 \times 10^{-7} \text{ m/s}$	
تخلخل (θ)	۰/۴۱	
آب محتوی (θ_w)	۰/۲	
تخلخل هوادار (θ_a)	۰/۰۷	
ضریب نفوذ آلاینده در آب (D_w)	$1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$	(Baehr and Corapcioglu, 1987)
ضریب نفوذ آلاینده در هوا (D_g)	$1 \times 10^{-1} \text{ cm}^2 / \text{s}$	(Baehr and Corapcioglu, 1987)
عامل تأخیر (R_w)	۲	
ثابت تجزیه مرتبه اول هیدروکربن نفتی (k_1)	$0/00005 \text{ 1/day}$	
ثابت هنری (H)	۰/۲۳	
ضخامت منطقه اشباع نشده (d)	۱۲ متر	

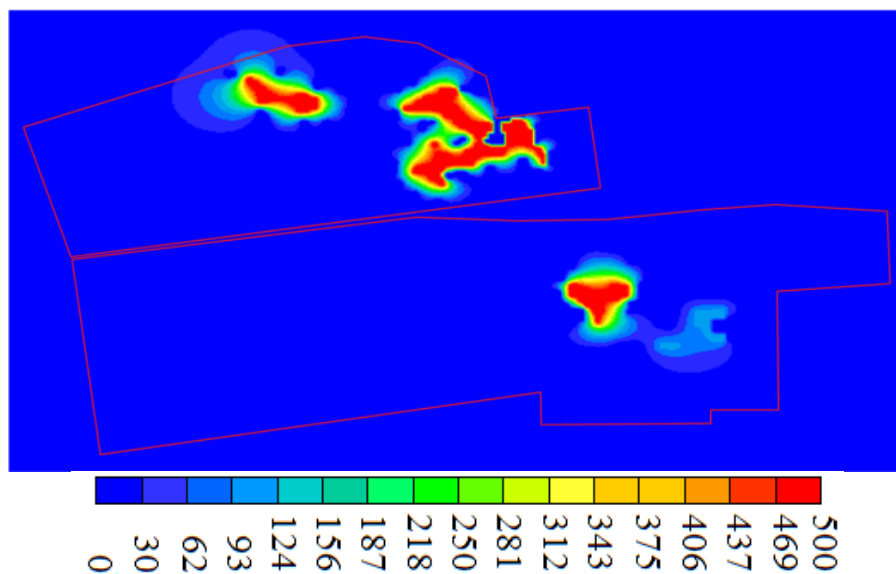
۶-۷-۲. نتایج شبیه سازی

در این شبیه سازی فرض گردید که در منطقه غیر اشباع فاز NAPL حضور ندارد. این منطقه شامل فازهای گاز خاک، آب و جامد است و در معرض فعل و انفعالات با فاز NAPL، منطقه اشباع و اتمسفر می باشد. اگر منطقه غیر اشباع با آلاینده های تبخیر شده از NAPL یا منطقه اشباع آلوده شود، جزءبندی تعادلی محلی آلاینده ها در بین فازها فرض می شود. برای مدل سازی دو بعدی انتقال هیدروکربن های نفتی در این منطقه از معادله (۷۹-۲) ارائه شده در فصل دوم استفاده گردید. مدل با فرضیات بالا اجرا شد. نتایج شبیه سازی برای دو گام زمانی ۳۶ و ۵۰ سال در شکل های (۶-۶۷) و (۶-۶۸) نشان داده شده اند.

مقایسه نتایج شبیه سازی در گام زمانی ۳۶ سال با نتایج مطالعات صحرایی (شکل ۵-۳۳ فصل پنجم) نشان می دهد مدل عددی ارائه شده به نحو خوبی توانسته است انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع شبیه سازی نماید.



شکل (۶-۶۷): توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن های نفتی در مدت زمان ۳۶ سال.



شکل (۶-۶۸): توزیع غلظت فاز گاز هیدروکربن‌های نفتی در مدت زمان ۵۰ سال.

همان طور که در شکل (۶-۶۸) مشاهده می شود مقادیر غلظت ها نسبت به مقادیر نشان داده شده در شکل (۶-۶۷) کاهش یافته است. این کاهش مقادیر غلظت فاز گاز هیدروکربن ها در منطقه غیر اشباع به دلیل حفاری های انجام شده در سایت به منظور مطالعات صحرایی است. از طریق این حفاری ها حجم قابل توجه ای از فاز گازی محبوس در زیر سطح زمین به اتمسفر راه می یابد که منجر به کاهش تجمع گازهای فرار در زیر سطح زمین می گردد.

فصل هفتم

جمع‌بندی، نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۷-۱. مقدمه

امروزه یکی از مسایل زیست محیطی مهم در سراسر دنیا، آلودگی سیستم‌های آبخانه‌ای توسط آلاینده‌های آلی از جمله هیدروکربن‌های نفتی می‌باشد. در نتیجه ریزش‌های تصادفی، شیوه‌های دفع ناقص و نشتی‌های حاصل از تأسیسات مخزنی زیر سطحی، این آلاینده‌ها وارد محیط‌های زیر سطحی می‌شوند و در نهایت منابع با ارزش آب زیرزمینی را آلوده می‌کنند. آلاینده‌های نفتی می‌توانند در خاک زیر سطح زمین برای سال‌های طولانی باقی بمانند و به واسطه قابلیت انحلال پائینی که دارند می‌توانند سفره آب‌های زیرزمینی را برای سالیان متمادی آلوده سازند. طبیعت پیچیده این آلاینده‌ها اغلب باعث می‌گردد که تلاش‌های به‌سازی با شکست مواجه شوند یا کمتر از آن چه مورد نظر است، موثر باشند. با توجه به این که منابع آب‌های زیرزمینی توسط نشتی‌های منابع هیدروکربنی به راحتی آلوده می‌گردند و از طرفی پاک‌سازی این آلودگی از سفره‌های آب دارای فرآیند طولانی مدت و هزینه بر می‌باشد، بنابراین پیش‌بینی محدوده آلودگی حاصل از منابع نفتی و بررسی مکانیزم‌های حاکم بر انتقال آلاینده‌های هیدروکربنی در سفره آب‌ها از مسائل مهم و روز زیست محیطی می‌باشد که ضمن تعیین محدوده آلودگی احتمالی، می‌تواند ما را در ارائه راهکارهای کنترلی و طراحی استراتژی‌های مناسب جهت حفاظت منابع آب زیرزمینی و پاک‌سازی مناطق آلوده یاری نماید.

طی سال‌های اخیر، مدل‌سازی عددی یک ابزار مهمی جهت کمک در تحلیل و فهم سیستم‌های زیست محیطی پیچیده شده است. در محیط‌های آبخانه ای که بسیاری از فرآیندها با ماهیت فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی درگیر هستند، مدل‌سازی عددی می‌تواند جهت تهیه یک چارچوب منطقی برای فرمول بندی اطلاعاتی که از راه‌های مختلف (کارهای تئوری، مطالعات آزمایشگاهی و مطالعات صحرایی) نتیجه می‌شوند، به کار روند. مدل‌ها می‌توانند ابزار قدرتمندی برای پیش‌بینی تحول و انتقال هیدروکربن های نفتی در آب های زیرزمینی باشند. فرآیندهایی همچون انحلال آلاینده ها به داخل سیستم جریان آب زیر زمینی، پدیده پهنرفت، پدیده پراکندگی طولی و عرضی، جذب به مواد آبخانه، تجزیه بیولوژیکی، تغییر شکل و یا فرآیند کانی سازی، تحول و انتقال آلاینده های نفتی را در آب زیرزمینی متأثر می‌سازند. اهمیت نسبی و برتری این فرآیندها شدیداً از آغاز آلودگی آب‌های زیرزمینی تا ناپدید شدن کامل آلاینده‌ها تغییر می‌کند. بنابراین، شناسایی فعل و انفعالات آلاینده‌ها با مواد متخلخل آبخانه و آب‌های زیرزمینی برای پیش‌بینی دقیق انتقال و تحول آلاینده‌ها مهم است.

در نظر گرفتن تمامی این فرآیندها می‌تواند در ارزیابی جامع رقیق سازی طبیعی ترکیبات هیدروکربنی در آب های زیرزمینی یا برای طراحی یک استراتژی مناسب در پاک سازی سفره آب زیرزمینی از ترکیبات هیدروکربنی موثر باشد. برای مدل سازی واقعی تر و جامع تر از فرآیندهای درگیر در آلودگی سفره آب ها با هیدروکربن های نفتی، داده های کافی و یک مدل مفهومی صحیح که نشان دهنده مکانیزم های موثر در انتقال آلاینده ها، توسعه پلوم آلودگی و همچنین واکنش های هیدروژئوشیمیایی درگیر باشد، مورد نیاز هستند. در ارائه یک مدل مفهومی، شناخت مشخصات سفره، ژئوشیمی، تعیین مرزهای محدوده مورد مطالعه و هدف مدل سازی ضروری می‌باشند.

بررسی سایت شرکت پالایش نفت تهران و ناحیه صنعتی شهر ری در سال ۱۳۸۲ شروع و در سال ۱۳۸۴ طبق برنامه ریزی های انجام شده با شرکت پالایش نفت تهران انجام پذیرفت.

در این بررسی، مواد آلاینده و منابع آلودگی از طریق پرسش از مردم، جمع آوری داده، اندازه‌گیری‌های موقتی و مشاهده جریان آب زیرزمینی شناسایی شدند. همچنین، نمونه‌برداری و آنالیز گاز خاک در صدها نقطه در سایت و اندازه‌گیری ضخامت نفت و محتوی نفت در داخل خاک صورت پذیرفت. علاوه بر این، در تمام چاه‌های ناحیه برای تعیین کیفیت آب نمونه‌برداری انجام شد. همچنین، در این بررسی مقدماتی، گمانه‌زنی موقتی برای بررسی‌های تفصیلی بر اساس نتایج اندازه‌گیری‌ها و آنالیزهای اشاره شده در بالا انجام گرفت.

در سال ۱۳۸۳ و بعد از آن، بررسی‌های نیمه تفصیلی در چندین نقطه از سایت برای بررسی شرایط زمین‌شناسی در جهت عمق، شرایط آلودگی خاک و آب زیرزمینی و تهیه یک تصویر سه بعدی از ساختار زمین‌شناسی و آلودگی انجام گردید.

نتایج بررسی سایت نشان دهنده آلودگی آب زیرزمینی وسیع‌تر از آن چه پیش‌بینی شده بوده و نفت حتی در مناطق اطراف سایت شرکت پالایش نفت تهران نیز پخش شده است. همچنین، نتایج نشان می‌دهند که چندین منبع آلودگی در منطقه وجود دارد.

به عنوان اولین مرحله اقدام برای حل این مسأله زیست‌محیطی، منابع آلودگی مشخص و تعمیر شدند. سپس، نفت آزاد موجود بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله روش پمپ و اصلاح رفع شد. ادامه این کار چندین سال طول می‌کشد. با این حال، این روش نمی‌تواند هنوز رفع کامل آلودگی از سایت را تضمین کند. آلودگی نفت می‌تواند به دو شکل در زیر سطح زمین وجود داشته باشد:

- محلول در آب زیرزمینی

- در بین ذرات خاک

در هر دو شکل، حضور نفت در زیر سطح به عنوان یک منبع بالقوه آلودگی برای آب زیرزمینی عمل می‌کند. بنابراین باید یک استراتژی مناسب و مقرون به صرفه برای پاک‌سازی کامل سایت طراحی گردد. برای نیل به این هدف، به یک مدل عددی جامع و کامل نیاز است که بتواند شرایط سایت و وضعیت انتقال و تحول هیدروکربن‌های نفتی را به خوبی منعکس کند. در این تحقیق سعی گردید با

توجه به شرایط ناحیه و داده های حاصل از اندازه گیری های صحرایی و داده های موجود در متون منتشر شده، مدل های جامع و کاملی برای هر منطقه ارائه گردد.

در ادامه این فصل به نتایج حاصل از این مدل سازی عددی اشاره می گردد.

۷-۲. جمع بندی نتایج مربوط به مدل سازی ۱ انتقال واکنشی گازوئیل در منطقه

ایستگاه پمپاژ شرکت پالایش نفت تهران

در ابتدا، فرآیندهای فیزیکی،

شیمیایی و بیولوژیکی موثر در انتقال و تحول هیدروکربن های نفتی شناسایی و بر اساس آن ها یک مدل دو بعدی طراحی گردید. نتایج زیر از این مرحله مدل سازی بدست آمد:

- با در نظر گرفتن سینتیک موند، بیشترین جمعیت میکروبی و در نتیجه پتانسیل اصلی تجزیه بیولوژیکی در مرز بالایی محدوده آلودگی جایی که آلاینده ها با اکسیژن توسط فرآیند پهنرفت مخلوط می شوند، توسعه می یابد.
- در پایین دست منبع آلودگی، تجزیه فقط در منطقه اختلاط توسط فرآیند پراکندگی در حاشیه پلوم رخ می دهد.
- در خارج ناحیه پلوم، به واسطه نبود آلاینده ها هیچ تجزیه بیولوژیکی اتفاق نمی افتد.
- اکسیژن در منطقه داخلی پلوم به واسطه واکنش با آلاینده ها و مصرف توسط میکروبها تخلیه می شود.
- مقایسه نتایج بدست آمده از مدل عددی با لحاظ سینتیک موند با داده های صحرایی در محل های گمانه حفاری و چاه نظارتی بعد از گذشت ۳۶ سال نشان می دهد که سینتیک موند به خوبی قادر به شبیه سازی رفتار پلوم BTEX است.

- اختلاف نسبتا جزئی بین نتایج مدل و داده های صحرایی به این دلیل است که فقط ترکیبات BTEX در شبیه سازی در نظر گرفته شده و از دیگر ترکیبات موجود در گازوئیل چشم پوشی شده است.
- روش های سینتیکی میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر در مقایسه با سینتیک موند، غلظت آلاینده ها را کمتر تخمین می زنند. دلیل اصلی این موضوع، آن است که تمامی این روش ها جمعیت میکروبی و قابلیت دسترسی اکسیژن را در مدل در نظر نمی گیرند.
- پلوم های پیش بینی شده با استفاده از روش های میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر کوتاه تر و کم عرض تر از پلوم های شبیه سازی شده با سینتیک موند هستند.
- روش سینتیک مرتبه اول، فرآیند تجزیه بیولوژیکی را بیشتر تخمین می زند، در نتیجه پلوم با گذشت زمان بدون تغییر می ماند.
- روش های سینتیکی میکائیل - منتن، مرتبه اول و مرتبه صفر برای شبیه سازی سفره های آب زیرزمینی که در آن ها فرآیندهای بیولوژیکی نقش مهم بر تحول و انتقال آلاینده ها دارند، مناسب نخواهند بود.
- مدل های سینتیکی مرتبه اول و مرتبه صفر فقط بر روی بخشی از طیف غلظت آلاینده های موجود در سفره معتبر هستند. لذا، در چنین مواردی روش سینتیک موند ممکن است نتایج دقیق تری به واسطه در نظر گرفتن جمعیت میکروبی و اکسیژن به عنوان الکترون گیرنده فراهم سازد.
- نتایج سناریوهای سه و چهار (فصل ۶، صفحات ۲۴۰ تا ۲۴۲) نشان می دهند که حذف منابع آلودگی در سطح زمین به تنهایی برای کاهش غلظت ترکیبات BTEX در آب زیرزمینی کافی نخواهد بود و خاک آلوده نیز باید مورد پاک سازی قرار گیرد.
- نتایج بررسی حساسیت مدل به تغییرات مقادیر ضریب پراکندگی نشان می دهند که با افزایش ضریب پراکندگی، آلودگی بیشتر در سیستم جریان آب پخش می شود. معنی عبارت بالا این

است که فرآیند پراکندگی یک مکانیزم مهم و موثر بر تحول و انتقال آلاینده های محلول است.

- افزایش ضریب پراکندگی گرادیان غلظت را کاهش می دهد. چون جریان آب زیرزمینی به صورت افقی فرض شده، افزایش ضریب پراکندگی عرضی باعث می شود که آلاینده ها بیشتر به سمت مرز پایینی مدل پخش شوند.
- تحلیل حساسیت مدل به تغییرات مقدار ضریب توزیع نشان می دهد که انتقال آلاینده ها به ازای مقادیر بزرگ ضریب توزیع در جهت جریان کند می شود.
- چون تجزیه بیولوژیکی ه وازی به وسیله سینتیک میکروبی محدود نمی شود، بلکه به وسیله اختلاط پراکنده شونده آب آلوده با آب تمیز حاوی اکسیژن در سفره محدود می گردد، این روش خیلی به تغییرات پارامترهای سینتیک حساس نیست، چون هیچ تغییر مهمی بر روی رفتار پلوم های ترکیبات BTEX و اکسیژن مشاهده نشد.
- پلوم های شبیه سازی شده به وسیله سینتیک موند با پارامترهای تقریبی نسبت به پلوم های تعیین شده به وسیله روش های ساده شده بهتر با پلوم های واقعی مطابقت دارند.
- بر خلاف سینتیک موند، روش میکائیل - منتن به تغییرات پارامترهای آن حساس است. اولین مجموعه پارامترها (معمولاً تجزیه بیولوژیکی را با دو برابر کردن مقادیر حداکثر نرخ تجزیه و نصف کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن بیشتر تخمین می زند) باعث کاهش غلظت و طول پلوم ها می شود، در حالی که، با استفاده از مجموعه دوم پارامترها (معمولاً تجزیه بیولوژیکی ی را با نصف کردن مقادیر حداکثر نرخ تجزیه و دو برابر کردن مقدار ثابت نیمه اشباع ترکیبات BTEX و اکسیژن کمتر تخمین می زند)، پلوم ها می توانند با غلظت و وسعت بیشتر شبیه سازی شوند.

- مشابه روش میکائیل - منتن، روش سینتیک مرتبه اول هم به تغییر ثابت سینتیک حساس است. غلظت و وسعت پلوم ها با دو برابر کردن ثابت مرتبه اول، کاهش می یابند. در حالی که اگر پارامتر مذکور نصف شود پلوم ها وسعت بیشتری پیدا می کنند.
- روش سینتیک مرتبه صفر هم مشابه دو روش میکائیل - منتن و مرتبه اول به تغییر ثابت سینتیک مرتبه صفر حساس است. غلظت و وسعت پلوم ها با دو برابر کردن ثابت سینتیک مرتبه صفر، کاهش می یابند. در مقابل، کاهش این پارامتر به حدود نصف مقدار آن باعث افزایش طول و غلظت پلوم ها می شود.

۷-۳. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی انتقال واکنشی چند فازی

هیدروکربن های نفتی در ناحیه صنعتی ری

- در این مرحله، مدلی دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنشی چند فازی هیدروکربن های نفتی در ناحیه صنعتی ری طراحی شد. چون در ناحیه مذکور تنوعی از آلاینده های نفتی در سفره آب زیرزمینی مشخص شده است، در مدل سازی، مقادیر کل هیدروکربن ها در نظر گرفته شد. نتایج زیر از این مدل سازی حاصل شد:
- مقایسه نتایج شبیه سازی عددی با نتایج بدست آمده از مطالعات صحرایی نشان می دهد که مدل عددی ارائه شده به نحو خوبی توانسته ضخامت پلوم فاز (LNAPL) بر روی آب را شبیه سازی کند.
 - مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های محلول در آب زیرزمینی نشان می دهد که مدل به لحاظ سینتیک تجزیه بیولوژیکی حساسیت چشم گیری ندارد و نتایج بدست آمده در دو حالت تقریباً با هم مشابه اند. این موضوع بدین دلیل است که غلظت آلاینده های هیدروکربنی محلول بالاتر از غلظت بحرانی تعیین شده است و عملاً تجزیه بیولوژیکی به موجب مرگ جمعیت میکروبی در غلظت های بالا صورت نمی گیرد.

- چون سرعت جریان آب زیرزمینی خیلی کم است، پلوم فاز محلول فقط در ناحیه فاز آزاد آلاینده هیدروکربنی گسترده شده است. این موضوع از نظر طراحی روش های پاک سازی یک مزیت برای منطقه محسوب می شود. حتی با گذشت ۵۰ سال، پلوم فاز محلول گسترش کمی در جهت جریان آب زیرزمینی دارد، پس نمی تواند عامل آلودگی نواحی مجاور خود باشد.
- نتایج شبیه سازی در حالت کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله پمپاژ آن نشان می دهد که با وجود این که بیشتر فاز آزاد از سفره زدوده شده است اما وجود همین لایه نازک باعث تداوم آلودگی آب زیرزمینی در مقیاس چشمگیری شده است.
- در نتیجه حذف فاز آزاد بعد از ۴۲ سال، تغییرات چشمگیری در توزیع غلظت فاز محلول هیدروکربن های نفتی ایجاد می گردد. اما سفره آب زیرزمینی هنوز آلوده است و برای پاک سازی فاز محلول آلودگی، باید یک روش به سازی مناسب و مقرون به صرفه مثل روش به سازی بیولوژیکی با توجه به شرایط منطقه طراحی شود.
- مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع نشان می دهد که در مدت زمان ۳۶ سال مقدار قابل توجهی از هیدروکربن های نفتی از سطح آب زیرزمینی و همچنین فاز آزاد NAPL تبخیر شده و به منطقه غیر اشباع منتقل شده اند. این موضوع نشان دهنده آن است که قابلیت فراریت آلاینده های هیدروکربنی موجود در منطقه زیاد است.
- توزیع غلظت فاز گازی هیدروکربن های نفتی بعد از گذشت ۵۰ سال بیان می دارد که مقادیر غلظت ها نسبت به مقادیر نشان داده شده در مدت زمان ۳۶ سال کاهش یافته است. این کاهش مقادیر غلظت فاز گازی هیدروکربن ها در منطقه غیر اشباع به دلیل حفاری های زیاد در منطقه به منظور مطالعات صحرایی در سال های ۱۳۸۶-۱۳۸۴ است. از طریق این حفاری ها حجم قابل توجهی از فاز گازی محبوس در زیر سطح زمین به اتمسفر راه یافت که منجر به کاهش تجمع گازهای فرار در زیر سطح زمین گردید.

- مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع با در نظر گرفتن کم شدن ضخامت فاز آزاد بر روی سطح آب زیرزمینی به وسیله پمپاژ آن مشخص می کند که حذف فاز آزاد از روی سطح آب نقش مهمی در کاهش غلظت فاز گازی هیدروکربن های فرار دارد.
- مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی هیدروکربن های فرار منطقه غیر اشباع با فرض رفع کامل پلوم فاز آزاد بر روی آب بعد از ۴۲ سال نشان می دهد که بیشتر فاز گازی هیدروکربن های فرار به اتمسفر انتقال یافته و بخش دیگر آن تجزیه شده و یا به فاز جامد جذب شده است. در نتیجه غلظت آن ها در منطقه غیر اشباع به طور قابل ملاحظه ای کاهش یافته است.
- محاسبه توزیع LNAPL در فازهای مختلف نشان می دهد که با کاهش بخش LNAPL آزاد بخش های محلول و تبخیر شده افزایش می یابد.
- نتایج این مدل سازی همچنین بیان می دارد که بخش فاز جذب شده در ابتدا افزایش می یابد، اما حدوداً بعد از ۱۱ سال تدریجاً کاهش پیدا می کند. این کاهش احتمالاً به این دلیل است که تعادل محلی بین فاز جذب شده و فازهای محلول و گازی برقرار شده است.
- مدل سازی توزیع LNAPL در فازهای مختلف نشان می دهد که فرآیند تبخیر به اتمسفر می تواند به طور قابل ملاحظه ای بر تحول و انتقال فاز آزاد LNAPL تأثیر بگذارد.

۷-۴. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی تجزیه هیدروکربن های نفتی به

وسیله میکروارگانسیم های بومی منطقه تحت شرایط احیای نیترات

(نیترات زدایی)

نتایج مطالعات صحرائی نشان داد که تجمع نیتروژن در خاک ناحیه صنعتی ری و شرکت

پالایش نفت تهران بالا است. این موضوع می تواند بیانگر تجزیه هیدروکربن های نفتی تحت شرایط

نیترات زدایی در منطقه باشد. بنابراین، یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی تجزیه هیدروکربن‌های نفتی تحت شرایط نیترات زدایی در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. نتایج حاصل از این شبیه سازی به قرار زیر است:

- در نواحی با غلظت بالای آلاینده (بالاتر از 500 mg/L) هیچ واکنش تجزیه بیولوژیکی رخ نمی‌دهد. در نتیجه، در آن نواحی نیترات مصرف نمی شود و غلظت آن برابر غلظت ورودی باقی می‌ماند. از طرفی، در نواحی مذکور جمعیت میکروبی فاقد رشد بوده و فقط تخریب می‌شوند، بنابراین، غلظت آن به سمت صفر کاهش می‌یابد.
- به دلیل تجزیه هیدروکربن‌های نفتی تحت شرایط نیترات زدایی، تمامی مقدار نیترات مصرف می‌شود و غلظت آن به صفر می‌رسد. وقوع واکنش نیترات زدایی همچنین باعث رشد جمعیت میکروبی می‌شود که با افزایش غلظت در آن نواحی مشخص می‌گردد.
- واکنش نیترات زدایی جزء واکنش‌های اکسیداسیون و احیای حاشیه‌ای بوده که نیاز به اختلاط الکترون‌دهنده (هیدروکربن‌های نفتی) و الکترون گیرنده (نیترات) دارد.
- واکنش‌های اکسیداسیون و احیای حاشیه‌ای به وسیله فرآیند پراکندگی تسریع می‌شوند. تعیین مناطقی که در آن واکنش‌های ژئوشیمیایی مختلف از جمله نیترات زدایی رخ می‌دهد، در مرحله طراحی یک استراتژی به سازی مناسب برای ناحیه می‌تواند مناسب باشد.
- حذف منابع آلودگی در سطح زمین بعد از ۳۶ سال از آغاز نشت باعث کاهش غلظت هیدروکربن‌های نفتی محلول در آب زیرزمینی بعد از ۵۰ سال می‌گردد. اما، آلودگی نفتی در لایه‌های خاک بالای سفره هنوز موجود است و این آلودگی توسط آب‌های تغذیه‌ای می‌تواند شسته شده و وارد سیستم آبخانه‌ای شوند. بنابراین، علی‌رغم کاهش غلظت هیدروکربن‌های نفتی محلول بعد از ۵۰ سال نسبت به زمان ۳۶ سال، پلوم آلاینده هنوز به شکل پیوسته باقی است.

- علی رغم حذف منابع آلودگی در سطح زمین و پاک سازی خاک آلوده به هیدروکربن های نفتی بالای سطح آب زیرزمینی، هنوز غلظت هیدروکربن های نفتی در برخی مناطق سایت بالاتر از حد استاندارد است که می تواند باعث خطرات سلامتی گردد. این موضوع نشان دهنده آن است که فرآیندهای رقیق سازی طبیعی به تنهایی قادر به پاک سازی کامل سایت مورد مطالعه از آلودگی های نفتی نمی باشند و باید برای پاک سازی کامل سیستم آبخانه ای یک روش به سازی مناسب با توجه به شرایط سایت طراحی شود.
- مطابق سناریو دوم (فصل ۶، صفحه ۲۷۷)، در برخی از نواحی سایت غلظت هیدروکربن های نفتی به صفر می رسد. این کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی و تغییر شکل پلوم آن ها در اثر فرآیندهای پراکندگی هیدرودینامیکی و پهنرفت ایجاد می گردد.
- در سناریو دوم، نرخ های واکنش نیترات زدایی نسبت به سناریو اول (فصل ۶، صفحات ۲۶۸ تا ۲۸۲) کمی کاهش یافته است. این امر مربوط به کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی در این سناریو می باشد.

۷-۵. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های

نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری با فرض

عملیات پمپاژ بعد از ۳۶ سال

در این مرحله، مدلی دو بعدی برای شبیه سازی ضخامت فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. نتایج زیر از این شبیه سازی حاصل شده اند:

- مقایسه نتایج شبیه سازی عددی بعد از ۳۶ سال با نتایج بدست آمده از مطالعات صحرایی نشان می دهد که مدل ارائه شده به نحو خوبی توانسته ضخامت پلوم فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب را شبیه سازی کند.
- عملیات پمپاژ فاز آزاد هیدروکربن های نفتی شناور بر روی سطح آب زیرزمینی بعد از ۳۶ سال موجب کاهش قابل توجه ضخامت پلوم فاز آزاد پس از ۵۰ سال می شود.

۶-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی

توسط سیستم قنوات

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی توسط سیستم قنوات در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. موارد زیر از این مدل سازی نتیجه شده اند:

- مقایسه نتایج شبیه سازی عددی پس از ۳۶ سال با نتایج صحرایی بیانگر این موضوع است که مدل عددی ارائه شده به خوبی توانسته است انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی در سیستم قنات را شبیه سازی نماید. همچنین نتایج حاصل از این مدل سازی این مطلب را تأیید می کند که انتشار آلودگی در جنوب ناحیه صنعتی ری به واسطه انتقال آن ها توسط سیستم قنوات می باشد.
- پس از ۵۰ سال از آغاز نشت، هیدروکربن های نفتی مساحت بیشتری از ناحیه را شامل می شوند. بنابراین، برای جلوگیری از پخش بیشتر آلودگی نفتی توسط قنوات باید سریعاً مسیر جریان قنوات آلوده را مسدود کرده و هیدروکربن های نفتی از داخل کانال های آنها جمع آوری گردد. در مرحله بعد، با طراحی یک روش مناسب به سازی سیستم قنوات آلوده را به طور کامل پاک سازی نمود.

۷-۷. جمع بندی نتایج حاصل از مدل سازی دو بعدی انتقال واکنشی

هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع در کل ناحیه صنعتی ری

یک مدل دو بعدی برای شبیه سازی انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر

اشباع در کل ناحیه صنعتی ری طراحی شد. نکات زیر از این شبیه سازی نتیجه شده اند:

- مقایسه نتایج شبیه سازی بعد از ۳۶ سال با نتایج مطالعات صحرایی نشان می دهد که مدل عددی ارائه شده به نحو خوبی توانسته است انتقال واکنشی هیدروکربن های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع را شبیه سازی نماید.
- مقادیر غلظت ها بعد از ۳۶ سال نسبت به مقادیر نشان داده شده بعد از ۵۰ سال کاهش یافته است. این کاهش مقادیر غلظت فاز گازی هیدروکربن ها در منطقه غیر اشباع به دلیل حفاری های انجام شده در سایت به منظور مطالعات صحرایی است. از طریق این حفاری ها حجم قابل توجه ای از فاز گازی محبوس در زیر سطح زمین به اتمسفر راه می یابد که منجر به کاهش تجمع گازهای فرار در زیر سطح زمین می گردد.

۷-۸. توانایی های مدل سازی انتقال واکنشی چند مولفه ای و چند فازی

هیدروکربن ه ای نفتی با استفاده از روش حجم های محدود در نرم افزار

PHOENICS

- اصول روش حجم های محدود جهت درک و کاربرد آسان است.
- روش حجم های محدود در مورد مش بندی غیر یکنواخت قوی است.
- یک مزیت مهم استفاده از روش حجم های محدود نسبت به سایر روش های عددی، توانایی قوی آن در گسسته سازی و حل عبارت های منبع ویژه مخصوصاً عباراتی که معادله انتقال را شدیداً غیر خطی می سازد، است.

- شرایط مرزی مختلف می توانند به سادگی در ماژول پیش پردازش نرم افزار PHOENICS تنظیم شوند.
- برای عبارات منبع پیچیده و غیر خطی، کدنویسی FORTRAN از طریق یک زیر برنامه به نام GROUND امکان پذیر می باشد.
- توانایی و مشخصات ماژول پس پردازش نرم افزار، مقایسه آسان خروجی PHOENICS با نتایج صحرایی یا پیش بینی های تحلیلی را اجازه می دهد. نتایج خروجی به صورت های مختلف مثل بردارها، نقشه های کانتوری، تصاویر و گراف ها می توانند نمایش داده شوند.

۷-۹. پیشنهاداتی برای تحقیقات آینده

- چون در ناحیه مورد مطالعه تنوعی از آلاینده های نفتی موجود است، به منظور مدل سازی کامل تر انتقال واکنشی هیدروکربن های نفتی پیشنهاد می شود که نوع و مقدار هر یک از آلاینده ها و همچنین درصد وزنی مولفه های آنها از طریق آزمایش های مربوطه به طور دقیق مشخص شوند.
- از آن جا که در منطقه مورد مطالعه هیچ گونه مطالعات میکروبی انجام نگرفته است، توصیه می گردد که این مطالعات به منظور شناسایی جمعیت های میکروبی تجزیه کننده هیدروکربن های نفتی و تعیین غلظت آنها در محیط انجام گیرد.
- با توجه به اثر بازدارندگی فلزات سنگین بر روی تجزیه بیولوژیکی هیدروکربن های نفتی و فعالیت های میکروبی، پیشنهاد می شود که غلظت فلزات سنگین در تمامی چاه های موجود در منطقه به طور دقیق اندازه گیری شود.
- جهت مدل سازی کامل فرآیند تجزیه بیولوژیکی زنجیره ای توسط الکترون گیرنده های مختلف (O_2 , NO_3^- , Mg^{2+} , Fe^{2+} , SO_4^{2-} , CO_2) توصیه می گردد که غلظت الکترون گیرنده های مختلف در تمامی چاه های موجود در منطقه به طور پیوسته اندازه گیری گردد.

- همان طور که نتایج مدل سازی ها نشان داد، حذف منابع آلودگی در سطح زمین و پمپاژ لایه آزاد نفت بر روی سطح آب زیرزمینی باعث کاهش غلظت هیدروکربن های نفتی محلول می شود، اما لایه های خاک آلوده بالای سطح آب زیرزمینی خود به عنوان یک منبع آلودگی عمل کرده و موجب تداوم آلودگی سفره می گردند. لذا، پیشنهاد می شود که قبل از پاک سازی سفره آب زیرزمینی از آلاینده های نفتی محلول، لایه های خاک آلوده بالای سطح سفره پاک سازی شوند.
- جهت طراحی یک روش پاک سازی خاک های آلوده به هیدروکربن های نفتی در سایت توصیه می گردد در مناطقی که مقدار آلودگی بیشتر است فاز مطالعات تفصیلی انجام شده و از نتایج آن در شبیه سازی فرآیندهای مؤثر در انتقال و تحول هیدروکربن های نفتی در منطقه غیر اشباع استفاده گردد.
- چون مدل به تغییرات مقادیر ضریب پراکندگی و ضریب توزیع حساس است، لذا پیشنهاد می شود این پارامترها بر اساس مطالعات دقیق آزمایشگاهی و صحرایی تعیین گردند.
- نتایج تحلیل حساسیت بر روی پارامترهای سینتیک موند نشان می دهد که این روش خیلی به تغییرات این پارامترها حساس نیست. از طرف دیگر پلوم های شبیه سازی شده به وسیله سینتیک موند حتی با پارامترهای تقریبی نسبت به پلوم های تعیین شده به وسیله روش های ساده شده بهتر با پلوم های واقعی مطابقت دارند. با توجه به این موضوع توصیه می گردد که در شبیه سازی های مورد نیاز برای طراحی روش پاک سازی از این روش استفاده گردد.
- از آنجا که مقادیر اشباع آب باقی مانده و اشباع NAPL باقی مانده بر اساس مقادیر منتشر شده در متون انتخاب شدند، پیشنهاد می شود این پارامترها بر اساس مطالعات آزمایشگاهی دقیق تعیین شوند.
- مقایسه نتایج مدل سازی عددی و مطالعات صحرایی بیان گر این موضوع هستند که فرآیند نیترات زدایی در سایت مورد مطالعه به احتمال خیلی زیاد رخ می دهد. بنابراین، می توان با

تقویت این فرآیند یک استراتژی مناسب برای منطقه طراحی نمود. توصیه می‌گردد مطالعات بیشتری در این خصوص انجام پذیرد.

- همان طور که در شبیه‌سازی ها مشخص شد، به دلیل سرعت پایین آب زیرزمینی، پخش آلودگی نفتی از طریق سیستم آبخانه ای در یک مقیاس وسیع غیر ممکن است. اما دلیل اصلی گسترش آلودگی در ناحیه صنعتی ری به ویژه نو احی جنوبی آن، پخش آلودگی‌های نفتی از طریق قنوات آلوده است. لذا پیشنهاد می‌شود به عنوان اولین قدم در کنترل گسترش آلودگی، مسیر جریان قنوات آلوده سریعاً مسدود شود و هیدروکربن‌های نفتی از داخل کانال-های آن‌ها جمع‌آوری گردد. در مرحله بعد، با طراحی یک استراتژی مناسب به‌سازی، سیستم قنوات آلوده را به طور کامل پاک‌سازی نمود.

- شبیه‌سازی انتقال واکنشی هیدروکربن‌های تبخیر شده در منطقه غیر اشباع نشان می‌دهد که مقدار قابل توجه ای از هیدروکربن های نفتی از سطح آب زیرزمینی و همچنین فاز آزاد NAPL تبخیر شده و به منطقه غیر اشباع منتقل شده‌اند. این موضوع نشان دهنده آن است که قابلیت فراریت آلاینده های هیدروکربنی موجود در منطقه زیاد است. لذا توصیه می‌گردد در زمینه طراحی یک استراتژی به سازی بر اساس این ویژگی آلاینده های نفتی موجود در منطقه، مطالعات مورد نیاز انجام پذیرد.

- جمع شدن فاز آزاد نفت بر روی سطح آب زیرزمینی موجب تغییر فشار در حاشیه مویینه و پایین رفتن سطح آب می‌شود. این تغییرات در مدل ارائه شده در این تحقیق لحاظ نشده‌اند. لذا پیشنهاد می‌گردد که مدل جهت در نظر گرفتن تغییرات فشار مویینه و سطح آب زیرزمینی بسط داده شود.

۷-۱۰. روش های پیشنهادی برای پاک سازی ناحیه صنعتی ری از آلودگی‌های

نفتی

با در نظر گرفتن شرایط سایت، مخصوصاً حضور تأسیسات پالایشی سراسر منطقه و لزوم کارکردن آن‌ها به طور پیوسته، باید روش هایی برای پاک سازی و به سازی منطقه طراحی نمود که خدشه ای به این تأسیسات و عملیات آن‌ها وارد نشود. در مرحله نخست، باید منابع آلودگی در سطح زمین رفع شوند. سپس به دلیل ضخامت زیاد فاز آزاد آلاینده های نفتی روی سطح سفره آب زیر زمینی، باید عملیات پمپاژ در سایت انجام گیرد تا فاز آزاد به طور کامل از روی سطح آب زدوده شود. این کار ممکن است چندین سال طول بکشد.

مرحله بعدی، پاک سازی خاک های آلوده به هیدروکربن های نفتی است. از جمله روش های پاک سازی خاک های آلوده به آلاینده های نفتی، روش انحلال افزایش یافته^{۱۱۵} است. در این روش، از موادی که قادرند آلاینده های نفتی را در خود حل کنند (از جمله اسید هیومیک^{۱۱۶}) استفاده می شود. وقتی این مواد وارد لایه های خاک آلوده می شوند، هیدروکربن های نفتی را در خود حل کرده و با خود به داخل سفره آب زیرزمینی منتقل می کنند. در نتیجه این امر، آلودگی های نفتی از خاک زدوده می شوند. اما استفاده از اسید هیومیک در این روش یک عیب به همراه دارد که آن است که موجب مرگ جمعیت میکروبی بومی موجود در خاک می شود. بنابراین، بهتر است از مواد دیگری برای این روش استفاده شود. برای طراحی مناسب روش مذکور لازم است مطالعات آزمایشگاهی، پایلوت و صنعتی و همچنین بررسی های اقتصادی انجام پذیرد.

مرحله نهایی برای رفع نهایی آلودگی های نفتی در منطقه، پاک سازی آلاینده های محلول از محیط آبخانه ای است. بهترین و مقرون به صرف ترین روش برای این امر به سازی بیولوژیکی است. به سازی بیولوژیکی کاربرد فرآیندهای بیولوژیکی برای تجزیه یا تبدیل آلاینده ها به شکل های کمتر سمی یا غیر سمی است. یکی از روش های به سازی بیولوژیکی، روش نترات زدایی تقویت شده است که با توجه به شرایط سایت به نظر می رسد که بتواند روش مناسبی برای رفع آلاینده های محلول باشد.

¹¹⁵. Enhanced dissolution

¹¹⁶. Humic acid

به منظور اجرای روش به‌سازی بیولوژیکی برای رفع آلودگی آب مراحل زیر باید انجام شود:

- ارزیابی اولیه سایت،
- مطالعات مقیاس آزمایشگاهی،
- مطالعات در مقیاس پایلوت،
- طراحی،
- پیاده‌سازی، ساخت و اجرا در تمام مقیاس‌ها و نظارت.

فهرست منابع

دولتی اردجانی ف، شفایی تنکابنی ض، میر حبیبی ع. ر، بدیعی خ، (۱۳۸۴)، “بیوتکنولوژی، ژئوشیمی زیست‌محیطی و مدیریت پساب ها”، جلد اول، چاپ اول، پژوهشکده صنایع رنگ ایران، تهران، ص ۱۹۱-۲۲۱.

سلوکی ک، کراچیان ر، بازرگان لاری م. ر، (۱۳۸۷)، “بهینه‌سازی مکانیابی محله‌های پایش منابع آلودگی آب زیرزمینی، هفتمین کنفرانس هیدرولیک ایران، ص ۶-۱۰، دانشگاه صنعت آب و برق (شهید عباسپور)، تهران.

صداقت م، (۱۳۷۲)، “زمین و منابع آب”، چاپ پنجم، انتشارات دانشگاه پیام نور، ص ۴۹.

قهرمانی‌تبار م، ابراهیمی ک، خلفی ح، (۱۳۸۷)، “اهمیت آلودگی‌های نفتی ناشی از MTBE و بررسی آن در ایران و جهان”، هفتمین کنفرانس هیدرولیک ایران، ص ۸-۱، دانشگاه صنعت آب و برق (شهید عباسپور)، تهران.

Agah A., Doulati Ardejani F., Ghoreishi H., (2011), “ Two-dimensional numerical finite volume modeling of processes controlling distribution and natural attenuation of BTX in the saturated zone of a simulated semi-confined aquifer ”, *Arabian Journal of Geoscience*, DOI: 10.1007/s12517-011-0467-4.

Alfnes E., Breedveld G. D., Kinzelbach W., Aagaard P., (2004), “ Investigation of hydrogeologic processes in a dipping layer structure: 2. transport and biodegradation of organics ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 69, pp 173-194.

Anid P. J., Alvarez P. J. J., Vogel T. M., (1993), “ Biodegradation of monoaromatic hydrocarbons in aquifer columns amended with hydrogen peroxide and nitrate ” *Journal of Water Research*, 27(4), pp 685–691.

Appelo C. A. J. and Rolle M., (2010), “ PHT3D: a reactive multicomponent transport model for saturated porous media ”, *Journal of Groundwater*, doi: 10.1111/j.1745-6584.2010.00732.x, pp 1-6.

Atteia O. and Guillot C., (2007), “ Factors controlling BTEX and chlorinated solvents plume length under natural attenuation conditions ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 90, pp 81-104.

Baehr A. L., (1987), “ Selective transport of hydrocarbons in the unsaturated zone due to aqueous and vapor phase partitioning ”, *Journal of Water Resources Research*, 23, pp 1926-1938.

Baehr A. L. and Corapcioglu M. Y., (1987), “ A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products, 2, Numerical solution ”, *Journal of Water Resources Research*, 23(1), pp 201-213.

Barry D. A. and Bajracharya K., (1995), “ Muskingum-Cunge solution method for solute transport with equilibrium Freundlich reactions ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 18, pp 221-238.

Barry D. A., Prommer H., Miller C. T., Engesgaard P., Brun A., Zheng C., (2002), “ modeling the fate of oxidisable organic contaminants in groundwater ”, *Journal of Advances in Water Resources*, 25, pp 899-937.

Basu N. B., Rao P. S. C., Poyer I. C., Annable M. D., Hatfield K., (2006), “ Flux-based assessment at a manufacturing site contaminated with trichloroethylene ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 86, pp 105-127.

Bekins B. A., Warren E., Godsy E. M., (1998), “ A comparison of zero-order, first-order and Monod biotransformation models ”, *Journal of Ground Water*, 36, pp 261-268.

Beyer C., Bauer S., Kolditz O., (2006), “ Uncertainty assessment of contaminant plume length estimates in heterogeneous aquifers ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 87, pp 73-95.

Borden R. C., Bedient P. B., Lee M. D., Ward C. H., Wilson J. T., (1986), “ Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen-limited biodegradation: 2. field application ”, *Journal of Water Resources Research*, 22, pp 1973-1982.

Brandes company R. J., (1999), “ Review of ground water modeling for selected aquifers underlying the Longhorn Partners Pipeline ”, Technical Memorandum, Appendix 7D, Austin, Texas, pp 1-68.

Brun A., Engesgaard P., Christensen T. H., Rosbjerg D., (2002), “ Modelling of transport and biogeochemical processes in pollution plumes: Vejen landfill, Denmark ”, *Journal of Hydrology*, 256, pp 228-247.

Brusseau M. L., (1992), “ Rate-limited mass transfer and transport of organic solutes in porous media that contain immobile immiscible organic liquid ”, *Journal of Water Resources Research*, 28, pp 33-45.

Capiro N. L., Stafford B. P., Rixey W. G., Bedient P. B., Alvarez P. J. J., (2007), “ Fuel-grad ethanol transport and impacts to groundwater in a pilot-scale aquifer tank ”, *Journal of Water Research*, 41, pp 656-664.

Cecan L. and Schneiker R. A., (2008), BIOSCREEN, AT123D and MODFLOW/MT3D, a comprehensive review of model results, In: “ Proceeding of the Annual International Conference on Soils, Sediments, Water and Energy ”, vol. 13, Article 22.

Celia M. A., Kindred J. S., Herrera I., (1989), “ Contaminant transport and biodegradation: 1. a numerical model for reactive transport in porous media ”, *Journal of Water Resources Research*, 25, pp 1141-1148.

Clement T. P., Truex M. J., Lee P., (2002), “ A case study for demonstrating the application of U.S.EPA’s monitored natural attenuation screening protocol at a hazardous waste site ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 59, pp 133-162.

a. CHAM, (2008), “ The PHOENICS On-Line information system ”,
http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/polis.htm

Chatzis I., Marrow N. R., Lim H. T., (1983), “ Magnitud and detailed structure of residual oil saturation ”, *Journal of Society Petroleum Engineering (SPE)*, 23, pp 311-326.

Choi N. C., Choi J. W., Kim S. B., Park S. J., Kim D. J., (2009), “ Two-dimensional modeling of benzene transport and biodegradation in a laboratory-scale aquifer ”, *Journal of Environmental Technology*, 30 (1), pp 53-62.

Christophersen M., Broholm M. M., Mosbaek H., Karapanagioti H. K., Burganos V. N., Kjeldsen P., (2005), “ Transport of hydrocarbons from an emplaced fuel source experiment in the vadose zone at Airbase Værløse, Denmard ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 81, pp 1-33.

Cirpka O. A. and Valocchi A. J., (2007), “ Two-dimensional concentration distribution for mixing-controlled bioreactive transport in steady state ”, *Journal of Advances in Water Resources*, 30, pp 1668-1679.

Corseuil H. X., Hunt C. S., Santos R. C. F, Alvarez P. J. J., (1998), “ The influence of the gasoline oxygenate ethanol on aerobic and anaerobic BTEX biodegradation ”, *Journal of Water Research*, 32, pp 2065-2072.

Connell L. D., (2007), “ Simple models for subsurface solute transport that combine unsaturated and saturated zone pathways ”, *Journal of Hydrology*, 332, pp 361-373.

Davis G. B., Trefry M. G., Patterson B. M., (2004), “ Petroleum and solvent vapours: quantifying their behaviour, assessment and exposure ”, CSIRO Land and Water, pp 1-52.

Doulati ardejani F., (2003), PhD. thesis, “ Hydrogeological investigations of backfilled surface coal mine sites ”, Faculty of Engineering, Mining Engineering Division, Civil and Mining Engineering Department, University of Wollongong.

Doulati ardejani F., Sing R. N., Baafi E. Y, (2004), “ Use of PHOENICS for solving one dimensional mine pollution problems ”, *Journal of PHOENICS: Computational Fluid Dynamics & its applications*, 16, CHAM, UK, p 23.

Dupont R. R., Sorensen D. L., Kemblowski M., Bertleson M., McGinnis D., Kamil I., Ma Y., (1998), “ Monitoring and assessment of in-situ biocontainment of petroleum contaminated ground-water plumes ”, EPA/600/SR-98/020, U.S.EPA, Las Vegas, pp 1-10.

Douthit T., (2003), “ The environmental characteristics of MTBE: fate, transport, remediation & comparison w/ethanol ”, Technical report, pp 1-26.

Eberhardt C. and Grathwohl P., (2002), “ Time scales of organic contaminant dissolution from complex source zones: coal tar pools vs. blobs ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 59, pp 45-66.

Edwards J. S., Ren T. X., Jozefowicz R., (1995), “ Using computational fluid dynamics (CFD) to solve mine safety and health problems ”, APCOM XXV, Technical Proceedings, Application of Computers and Operations Research in the Minerals Industries, Brisbane, Australia, pp 41-47.

Essaid H. I., Bekins B. A., Godsy E. M., Warren E., Baedecker M. J. Cozarelli I. M., (1995), “ Simulation of aerobic and anaerobic biodegradation processes at a crude-oil spill site ”, *Journal of Water Resources Research* , 31, pp 3309-3327.

Essaid H. I., Cozzarelli I. M., Eganhouse R. P., Herkelrath W. N., Bekins B. A., Delin R. P., (2003), “ Inverse modeling of BTEX dissolution and biodegradation at the Bemidji, MN crude-oil spill site ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 67, pp 269-299.

Fagerlund F. and Niemi A., (2007), “ A partially coupled, fraction-by-fraction modeling approach to the subsurface migration of gasoline spills ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 89, pp 174-198.

Falta R.W., Rao P. S., Basu N., (2005), “ Assessing impacts of partial mass depletion in DNAPL source zones: I. Analytical modeling of source strength functions and plume response ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 78, pp 259-280.

Falta R.W., Basu N., Rao P. S., (2005), “ Assessing impacts of partial mass depletion in DNAPL source zones: II. Coupling source strength functions to plume evolution ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 79, pp 45-66.

Ferguson W. J. and Kaddouri A., (2004), “ A mass conservative non-isothermal subsurface three-phase flow model: formulation and application ”, *Journal of Water, Air, and Soil Pollution*, 153, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, pp 269-291.

Fitts C. R., (2002), “ **Groundwater Science** ”, Elsevier Science Ltd, Academic Press, London, UK, pp 93-95 and 343-385.

Freeze R. A. and Cherry J. A., (1979), “ **Groundwater** ”, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, pp 47-49.

Fusione Techno Solutions Co., (2006), “ Environmental investigations in Tehran oil refinery area ”.

Geosphere and CH2M HILL, (2006), “ Three- and four-phase partitioning of petroleum hydrocarbons and human health risk calculations ”, A report prepared for the Alaska Statement of Cooperation Working Group, pp 1-50.

Ghez R., (1988), “ A primer of diffusion problems ”, John Wiley & Sons, the United States of America, pp 1-241.

Gomez D. E., Blanc P. C., Rixey W. G., Bedient P. B., Alvarez P. J. J., (2008), “ Modeling benzene plume elongation mechanisms exerted by ethanol using RT3D with a general substrate interaction module ”, *Journal of Water Resources Research*, doi:10.1029/2007WR006184, 44, pp 12.

Goudar C. T. and Strevett K. A., (1998), “ Comparison of relative rates of BTEX biodegradation using respirometry ”, *Journal of Industrial Microbiology & Biotechnology*, 21, pp 11-18.

Gribb M. M., Bene K. J., Shrader A., (2002), “ Sensitivity analysis of a soil leachability model for petroleum fate and transport in the vadose zone ”, *Journal of Advances in Environmental Research*, 7, pp 59-72.

Guarnaccia J., Pinder G., Fishman M., (1997), “ NAPL: simulator documentation ”, EPA/600/SR-97/102, U.S.EPA, pp 1-9.

Ham P. A. S., Schotting R. J., Prommer H., Davis G. B., (2004), “ Effects of hydrodynamic dispersion on plume lengths for instantaneous bimolecular reactions ”, *Journal of Advances in Water Resources*, 27, pp 803-813.

Heermann S. E. and Powers S. E., (1998), “ Modeling the partitioning of BTEX in water-reformulated gasoline systems containing ethanol ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 34, pp 315-341.

Hinkelmann R., (2003), “ Efficient numerical methods and information-processing techniques in environment water”, Institute of Hydraulic Engineering, Stuttgart University.

Hinkelmann R., (2005), “ **Efficient Numerical Methods and Information- Processing Techniques for Modeling Hydro- and Environmental Systems** ”, In: Pfeiffer F. and Wriggers P. (eds), vol. 21, Springer, Berlin, Germany, pp 1-306.

Hohener P., Dakhel N., Christophersen M., Broholm M., Kjeldsen P., (2006), “ Biodegradation of hydrocarbons vapors: Comparison of laboratory studies and field investigations in the vadose zone at the emplaced fuel source experiment, Airbase Værløse, Denmark ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 88, pp 337-358.

Idemitsu engineering Ltd, March. 2003, Site Survey Report for Reduction of Environmental Impact Project in Tehran Oil Refining Company of Iran.

Idemitsu engineering Ltd, March, 2005, Investigation concerning Exhaust Gas and Water Measures of Tehran Refinery.

Jean J. Sh., Tsai Ch. L, Ju Sh. H., Tsao Ch. W., Wang Sh. M., (2002), “ Biodegradation and transport of benzene, toluene, and xylenes in a simulated aquifer: comparison of modeled and experimental results ”, *Journal of Hydrological Processes*, 16, pp 3151-3168.

Jellali S., Benremita H., Muntzer P., Razakarisoa O., Schafer G., (2003), “ A large-scale experiment on mass transfer of trichloroethylene from the unsaturated zone of a sandy aquifer to its interfaces ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 60, pp 31-53.

Johnson, P.C., Hertz M.B., Beyers D.L., (1990), Estimates for Hydrocarbon vapour emissions resulting from service station remediation and buried gasoline-contaminated soils, “ In: **Petroleum Contaminated Soils** ”, Vol. 3, Lewis Publishers, Michigan.

Johnson, P.C. and Ettinger R.A., (1991), “ Heuristic model for predicting the intrusion rate of contaminant vapours into buildings ”. *Journal of Environmental Science Technology*, 25, pp 1445-1452.

Karapanagioti H. K., Gaganis P., Burganos V. N., (2003), “ Modeling attenuation of volatile organic mixtures in the unsaturated zone: code and usage ”, *Journal of Environmental Modelling & Software*, 18, pp 329-337.

Kemblowski M. W., Chang C-M., Kamil I., (1997), “ A mean behavior model of aerobic biodegradation in heterogeneous formation ”, *Journal of Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 11, pp 255-266.

Khachikian C. and Harmon T. C., (2000), “ Nonaqueous phase liquid dissolution in porous media: current state of knowledge and research needs ”, *Journal of Transport in Porous Media*, 38, pp 3-28.

Khan F. I, Husain T., (2003), “ Evaluation of a petroleum hydrocarbon contaminated site for natural attenuation using ' RBMNA' methodology ”, *Journal of Environmental Modelling & Software*, 18, pp 179-194.

Kim J. and Corapcioglu M. Y., (2003), “ Modeling dissolution and volatilization of LNAPL sources migrating on the groundwater table ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 65, pp 137-158.

Kindred J.S. and Celia M. A., (1989), “ Contaminant transport and biodegradation: II. Conceptual model and test simulations ”, *Journal of Water Resources Research*, 25, pp 1149-1160.

Koussis A. D., Pesmajoglou S., Syriopoulou D., (2003), “ Modelling biodegradation of hydrocarbons in aquifers: when is the use of the instantaneous reaction approximation justified? ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 60, pp 287-305.

Langevoort M., (2009), PhD. thesis, “ Multiphase flow and enhanced biodegradation of dense non-aqueous phase liquids ”, Environmental Hydrogeology research group, Geosciences Faculty, Utrecht university.

Lensing H. J., Vogt M., Herrling B., (1994), “ Modeling of biologically mediated redox processes in the subsurface ”, *Journal of Hydrology*, 159, pp 125-143.

Littlejohns J. V. and Daugulis A. J., (2008), “ Kinetics and interactions of BTEX compounds during degradation by a bacterial consortium ”, *Journal of Process Biochemistry*, 43, pp 1068-1076.

Lovanh N., Zhang Y. K., Heathcote R., C., Alvarez P. J. J., (2000), “ Guidelines to determine site-specific parameters for modeling the fate and transport of monoaromatic hydrocarbons in groundwater ”, Iowa comprehensive petroleum underground storage tank fund board, AON Risk Services, Inc, pp 1-51.

Lu G., Clement T. P., Zheng C., Wiedemeier T. H., (1999), “ Natural attenuation of BTEX compounds, model development and field-scale application ”, *Journal of Ground Water*, 37, pp 707-717.

Maier U., Grathwohl P., (2006), “ Numerical experiments and field results on the size of steady state plumes ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 85, pp 33-52.

Mankad T. and Bungay H. R., (1988), “ Models for microbial growth with more than one limiting nutrient ”, *Journal of Biotechnology*, 7, pp 161-166.

McNab W. W. and Narasimhan T. N., (1994), “ Modelling reactive transport of organic compounds in groundwater using a partial redox disequilibrium approach ”, *Journal of Water Resources Research*, 30, pp 2619-2635.

McNab W. W. and Narasimhan T. N., (1995), “ Reactive transport of petroleum hydrocarbon constituents in a shallow aquifer: Modeling geochemical interactions between organic and inorganic species ”, *Journal of Water Resources Research*, 31, pp 2027-2033.

Miller C. T. and Weber J. W. J., (1984), “ Modeling organic contaminant partitioning in ground water systems ”, *Journal of Ground Water*, 22, pp 584-592.

Miller C. T. and Weber J. W. J., (1986), “ Sorption of hydrophobic organic pollutants in saturated soil systems ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 1, pp 243-261.

Miller C. T., Poirier-McNeill M. M., Mayer A. S., (1990), “ Dissolution of trapped nonaqueous phase liquids: Mass transfer characteristics ”, *Journal of Water Resources Research*, 26, pp 2783-2796.

Mohamed M. M. A., Saleh N. E., Sherif M. M., (2010), “ Modeling in situ benzene bioremediation in the contaminated Liwa aquifer (UAE) using the slow-release oxygen source technique ”, *Journal of Environmental Earth Science*, 61, pp 1385-1399.

Molson J. W. H., Barker J., Schirmer M., (2000), “ **Modeling the impact of ethanol on the persistence of BTEX compounds in gasoline-contaminated groundwater** ”, In: Melin G. (Ed), Center for groundwater restoration and protection, National Water Research Institute (NWRI), California, pp 1-50.

Molson J. W., (2000), PhD. Thesis, “ Numerical simulation of hydrocarbon fuel dissolution and biodegradation in groundwater ”, University of Waterloo.

Molz F., Widdowson J., Benefield M. A., (1986), “ Simulation of microbial growth dynamics coupled to nutrient and oxygen transport in porous media ”, *Journal of Water Resources Research*, 22, pp 1207-1216.

Myrntinen A., Boving T., Kolditz O., (2009), “ Modeling of an MTBE plume at Pascoag, Rhode Island ”, *Journal of Environ Geol*, 57, pp 1197-1206.

Nevin J. P., Connor J. A., Newell C. J., Gustafson J. B., Lyons K. A., (1997), “ FATE 5: a natural attenuation calibration tool for groundwater fate and transport modeling ”, NGWA Petroleum Hydrocarbons Conference, pp 1-13, Houston, Texas.

Newell C. J., Acree S. D., Ross R. R., Huling S. G., (1995), “ Ground water Issue: Light Nonaqueous Phase Liquids ”, EPA/540/S-95/500, U.S.EPA, Washington, DC, pp 1-28.

Nitzsche, O. and Vereecken, H., (2002), “ Modeling sorption and exchange processes in column experiments and large scale field studies ”, *Journal of Mine Water and Environment*, 21, pp15-23.

Okpokwasili G. C. and Nweke C. O., (2005), “ Microbial growth and substrate utilization kinetics ”, *African Journal of Biotechnology*, 5(4), pp 305-317.

Oliveira L. I. and Demond A. H., (2003), “ Estimation of primary drainage three-phase relative permeability for organic liquid transport in the vadose zone ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 66, pp 261-285.

Oostrom M., Hofstee C., Lenhard R. J., Wietsma T. W., (2003), “ Flow behavior and residual saturation formation of liquid carbon tetrachloride in unsaturated heterogeneous porous media ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 64, pp 93-112.

Oreilly K. T., Magaw R. I., Rixey W. G., (2001), “ Predicting the effect of hydrocarbon and hydrocarbon-impacted soil on groundwater ”, A summary of research results from API's Soil & Groundwater Technical Task Force, American Petroleum Institute (IPA), No.14, pp 1-14.

Parcher M. A., (1999), MS. Thesis, “ Assessing various technologies to remediate a hydrocarbon contaminated aquifer ”, Virginia Polytechnic Institute, State university.

Park H. S., (1999), “ A method for assessing soil vapor intrusion from petroleum hydrocarbons release sites: Multiphase/multi-fraction equilibrium partitioning ”, *International Journal of Global Nest*, 1 (3), pp 195-204.

Park H. S. and Juan C. S., (2000), “ A method for assessing leaching potential for petroleum hydrocarbons release sites: Multiphase and multisubstance equilibrium partitioning ”, *Journal of Soil and Sediment Contamination*, 9 (6), pp 611-632.

Parker J. C., Waddill D. W., Johnson J. A., (1994), “ UST Corrective Action Technologies: Engineering Design of Free Product Recovery Systems ”, *Journal of Environmental Systems & Technologies*, pp 77.

Phophi T. S., (2004), MS. Thesis, “ The occurrence and evaluation of LNAPLs contamination in urban areas of South Africa ”, Geohydrology Department, University of the Free State.

Pickens J. F. and Lennox W. C., (1976), “ Numerical simulation of waste movement in steady groundwater flow systems ”, *Journal of Water Resources Research*, 12(2), pp. 171-180.

Pope G. A., Sepehrmoori K., Sharma M. M., McKinney D. C., Speital G. E., Jackson R. E., (1999), “ Three-dimensional NAPL fate and transport model ”, EPA/600/R-99/011, Center for Petroleum and Geosystems Engineering, The University of Texas at Austin, pp 1-361.

Powers S. E., Hunt C. S., Heermann S. E., Corseuil H. X., Rice D., Alvarez P. J. J., (2001), “ The transport and fate of ethanol and BTEX in groundwater contaminated by gasohol ”, *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, CRS Press LLC, pp 1-22.

Prechtel A., Knabner P., Schneid E., Totsche K. U., (2002), “ Simulation of carrier-facilitated transport of phenanthrene in a layered soil profile ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 56, pp 209-225.

Prommer H., Barry D. A., Chiang W-H., Zheng C., (2001), “ PHT3D - A MODFLOW/MT3DMS- based reactive multi-component transport model ”, MODFLOW 2001 and Other Modeling Odysseys, Conference Proceedings, In: Seo, Poeter, Zheng (Eds), pp 477-483.

Prommer H., (2002), “ A reactive multicomponent transport model for saturated porous media ”, User’s Manual Version 1.0, Contaminated Land Assessment and Remediation Research Centre, The University of Edinburgh, UK, pp 1-132.

Prommer H., Barry D. A., Davis G. B., (2002), “ modeling of physical and reactive processes during biodegradation of a hydrocarbon plume under transient groundwater flow conditions ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 59, pp 113-131.

Prommer H., Davis G. B., Barry D. A., Miller C. T., (2003), “ Modelling the fate of petroleum hydrocarbons in groundwater ”, Proceedings of the fifth national workshop

on the assessment of site contamination, In: Langley A., Gilbey M., Kennedy B. (Eds), pp 21-45, Adelaide, Australia. (<http://www.ephc.gov.au/>).

Rifai H. S. and Rittaler T., (2005), “ Modeling natural attenuation of benzene with analytical and numerical models ”, *Journal of Biodegradation*, 16, pp 291-304.

Rolle M, Clement T. P., Sethi R., Molfetta A. D., (2008), “ A kinetic approach for simulating redox-controlled fringe and core biodegradation processes in groundwater: model development and application to a landfill site in Piedmont, Italy ”, *Journal of Hydrological Processes*, 22, pp. 4905-4921.

Sanders P., (2002), “Microbial degradation kinetics of volatile organic hydrocarbons: effect of BTEX concentration and environment ”, Technical report, pp 1-91.

Sarioglu M. S., Coptly N. K., (2008), “ Modeling the enhanced bioremediation of organic contaminants in pyrite-containing aquifers ”, *Journal of Transport in Porous media*, 75, pp 203-221.

Schafer D., Schafer W., Kinzelbach W., (1998), “ Simulation of processes related to biodegradation of aquifers: 1. structure of the 3D transport model ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 31, pp 167-186.

Schafer D., Manconi A., Grandel S., Dahmke A., (2005), Consequence of different kinetics approaches for simulation of microbial degradation on contaminant plume development. pp 127–140, In: “ **Reactive transport in soil and groundwater: processes and models** ”, Nutzmann G., Viotti P., Aagaard P. (eds), Springer, Netherlands.

Sikkema J., de Bont J. A. M., Poolman B., (1995), “ Mechanism of membrane toxicity of Hydrocarbons ”, *Journal of Microbiological Reviews*, 59(2), pp 201-222.

Simpkins S., and Alexander M., (1984), “ Models for mineralization kinetics with the variable of substrate concentration and population density growth ”, *Journal of Applied and Environmental Microbiology*, 47(6), pp 1299-1306.

Singh V. S., (2007), Parameterization of groundwater aquifer system, pp 61-77, In: “**Groundwater : resource evaluation, augmentation, contamination, restoration, modeling and management**”, In: Thangarajan M. (Ed), Springer and Capital Publishing Company, New Delhi, India.

Soga K., Page J. W. E., Illangasekare T. H., (2004), “ A review of NAPL source zone remediation efficiency and the mass flux approach ”, *Journal of Hazardous Materials*, 110, pp 13-27.

Spalding D. B., (1981), “ A general purpose computer program for multi-dimensional one- and two-phase flow ”, *Journal of Mathematics and Computers in Simulation*, 23 (3), pp 267-276.

Suarez M. P., and Rifai H. S., (2004), “ Modeling natural attenuation of total BTEX and benzene plumes with different kinetics ”, *Journal of Ground Water Monitoring & Remediation*, 24(3), pp 53-68.

Sun Y., Petersen J. N., Buscheck T. A., Nitao J. J., (2002), “ Analytical solutions for reactive transport of multiple volatile contaminants in the vadose zone ”, *Journal of Transport in Porous Media*, 49, pp 175-190.

Todd D. K., (1980), “ **Groundwater Hydrology** ”, Second edition, John Wiley & sons, United States of America, pp 42-45.

Trigueros D. E. G., Modenes A. N., Kroumov A. D., Espinoza-Quinones F. R., (2010), “ Modeling of biodegradation process of BTEX compounds: kinetics parameters estimation by using Swarm Global Optimizer ”, *Journal of Process Biochemistry*, 45, pp 1355-1361.

Ulrich G., (1999), “ The fate and transport of ethanol-blended gasoline in the environment ”, Governors’ Ethanol Coalition, Lincoln, Nebraska, pp 1-103.

Van Geel P. J. and Roy S. D., (2002), “ A proposed model to include a residual NAPL saturation in a hysteretic capillary pressure-saturation relationship ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 58, pp 79-110.

Vencelides Z., Sracek O., Prommer H., (2007), “ Modelling of iron cycling and its impact on the electron balance at a petroleum hydrocarbon contaminated site in Hnevice, Czech Republic ”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 89, pp 270-294.

Versteeg H. K. and Malalasekera W., (1995), “ An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method ”, Prentice Hall, UK, pp 1- 257.

Wang X. S. and Qin Y., (2005), “ Equilibrium sorption isotherms for of Cu^{2+} on rice bran ”, *Journal of Process Biochemistry*, 40, pp 677-680.

Wiedemeier T. H., Rifai H. S., Newell C. J., Wilson J. T., (1999). “ Natural Attenuation of Fuels and Chlorinated Solvents in the Subsurface ”, John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, p 617 .

www.afcee.af.mil/.../background/index.asp

www.gsi.ir

Yao, Z. Y., Qi, J. H., Wang, L. H., (2010), “ Equilibrium, kinetic and thermodynamic studies on the biosorption of Cu(II) onto chestnut shell ”, *Journal of Hazardous Materials*, 174, pp 137-143.

A CFD Method for Investigation of Groundwater Aquifer Contaminated by Hydrocarbons at Tehran Oil Refining Company and Proposing an Appropriate Remediation Strategy

Abstract

Contamination of the aquifer systems by organic pollutants is a widespread environmental concern. Hence, the management of the groundwater resources has been strongly emphasized in recent years. Accurate methods are required to predict contaminants transport through porous media in order to determine contamination plumes in the subsurface aquifers and control pollution expansion. At present, oil has been revealed as a layer on the groundwater surface in the Tehran oil refinery and nearby areas. Field investigations have shown groundwater and soil pollution in a large area. Furthermore, oil has been measured in monitoring and other wells in the study area. The investigations have revealed the presence of more than 1440000 cubic meter of oil throughout the Tehran oil refinery and the Rey industrial area. In this research, comprehensive models have been developed for each zone of the contaminated area. The results of these models can be used for designing an appropriate remediation strategy. To achieve this goal, a conceptual model was first developed to consider effective mechanisms involved in the reactive transport of hydrocarbon pollutants, pollution plume expansion and hydro-chemical reactions. A two-dimensional model has been then presented by modifying a multi-purpose commercial software called PHOENICS to predict multi-species and multi-phases reactive transport of hydrocarbons through the saturated zone of groundwater flow system in the Rey industrial area. PHOENICS solves model equations numerically utilising a finite volume technique. All non-linear terms of the partial differential equations were handled using PHOENICS by coding in PIL (PHOENICS Input Language), and saving in a Q1-file with calls to the GROUND routine for all non-standard computations. The required coding was added through GROUND routine with FORTRAN99 language. The accuracy of the model was verified with analytical solutions to simplified systems and single processes together with the results obtained by different scenarios of

published numerical models by other researchers to more complicated cases. The model was then expanded to predict multi-species and multi-phases reactive transport of hydrocarbon pollutants in the study area. The proposed model was calibrated with the field data for a time period of 36 years; showing a close agreement. It was then implemented to predict reactive transport of hydrocarbons for 15 years after calibration period taking different scenarios into account. The most important characteristics of the model presented in this research are that in addition to the physical transport mechanisms, it incorporates variable source, linear adsorption process and biological zero- order kinetics models including Monod, Michaelis-Menten, first- and mathematical expressions. A sensitivity analysis was carried out to assess uncertainties of the model presented in this research and to consider the influence of parameters variability on the results of model. For this analysis, the sensitivity of the model to changes in the dispersivity, distribution coefficient, parameters of Monod, Michaelis-Menten, first- and zero- order kinetics modes on the contaminant plumes were examined by performing several simulations. It was found that the model is most sensitive to changes in dispersivities, distribution coefficient, and parameters of Michaelis-Menten, first- and zero- order kinetics model. On the other hand, the model is not sensitive to the parameters of Monod kinetics model. The reason for this insensitivity is that degradation is not limited by microbial kinetics in the simulation, but by dispersive mixing. The modeling results show that by removing LNAPL from the surface of groundwater table of the aquifer after 42 years, there will be a significant change in the distribution of dissolved hydrocarbons in the underlying aquifer. However, aquifer remains contaminated during this time. It will be necessary to develop an appropriate remediation strategy based on biological process in the study area. The results obtained from such investigations can be used to monitor the contaminated sites by hydrocarbon pollutants and design methods for controlling pollution and minimizing environmental problems in the groundwater aquifers.

Keyword: Computational fluid dynamics (CFD), Numerical modelling, Aquifer, Multi-component reactive transport, Multi-phases, Hydrocarbon pollutants, Biodegradation Kinetics models, Linear adsorption, Sensitivity analysis, .Bioremediation



Shahrood University of Technology
Faculty of Mining Engineering, Petroleum & Geophysics

PhD Thesis

A CFD Method for Investigation of Groundwater Aquifer
Contaminated by Hydrocarbons at Tehran Oil Refining Company
and Proposing an Appropriate Remediation Strategy

Azadeh Agah

Supervisor:
Professor Framarz Doulati Arde Jani

Industrial Consultant:
Hossein Ghoreishi

August 2012

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(NO REACTIVE)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL   = 1.000000E+00
ENUT   = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -5.650000E-08 ;PRNDTL(C3 ) = -5.650000E-08
PRNDTL(C5 ) = -5.650000E-08 ;PRNDTL(C7 ) = -5.650000E-08
PRNDTL(C9 ) = -5.650000E-08 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10.Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E+00, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E+00, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E+00, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E+00, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E+00, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

```

EGWF = T
*****

Group 14. Downstream Pressure For PARAB
*****

Group 15. Terminate Sweeps
LSWEEP = 500
RESFAC = 1.000000E-05
*****

Group 16. Terminate Iterations
*****

Group 17. Relaxation
RELAX(C1 ,FALS DT, 1.000000E+06)
RELAX(C3 ,FALS DT, 1.000000E+06)
RELAX(C5 ,FALS DT, 1.000000E+06)
RELAX(C7 ,FALS DT, 1.000000E+06)
RELAX(C9 ,FALS DT, 9.999000E+05)
RELAX(C11 ,FALS DT, 9.999000E+05)
RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)
*****

Group 18. Limits
VARMAX(U1 ) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1 ) = -1.000000E+06
VARMAX(V1 ) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1 ) = -1.000000E+06
VARMAX(C1 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C3 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C5 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C7 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C9 ) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C11 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11 ) = 0.000000E+00
*****

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
USEGRD = T ;USEGRX = T
POTVEL = T
ASAP = T
PARSOL = T
IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
RG( 1) = 2.017500E-05
RG( 2) = 2.017500E-06
RG( 3) = 1.000000E+00
RG( 4) = 3.460000E+01
RG( 5) = 1.077000E+02
RG( 6) = 2.292000E+02
RG( 7) = 2.500000E+02
RG( 8) = 5.690000E-05
RG( 9) = 4.770000E-01
RG(10) = 2.690000E+00
RG(11) = 1.020000E-04
RG(12) = 4.270000E-01
RG(13) = 3.252000E+00
RG(14) = 5.860000E-05

```

```

RG( 15) = 2.720000E-01
RG( 16) = 1.288000E+00
RG( 17) = 6.690000E-05
RG( 18) = 3.310000E-01
RG( 19) = 4.681000E+00
RG( 20) = 4.100000E-01
RG( 21) = 3.500000E-01
RG( 22) = 3.000000E-01
RG( 23) = 3.000000E-01
RG( 24) = 1.175000E-05
*****
Group 20. Preliminary Printout
ECHO = T
*****
Group 21. Print-out of Variables
*****
Group 22. Monitor Print-Out
IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1
*****
Group 23. Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
No PATCHes used for this Group
*****
Group 24. Dumps For Restarts
IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)
GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
> DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube3t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00

```

```

> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

```


TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(FIRST ORDER KINETICS)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL  = 1.000000E+00
ENUT  = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

INIADD = F

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND , GRND)

PATCH (FIRSTB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (FIRSTB ,C1 , 1.120000E-08, 0.000000E+00)

PATCH (FIRSTT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (FIRSTT ,C3 , 1.750000E-08, 0.000000E+00)

PATCH (FIRSTE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (FIRSTE ,C5 , 1.860000E-08, 0.000000E+00)

PATCH (FIRSTX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (FIRSTX ,C7 , 8.760000E-09, 0.000000E+00)

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C3 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C5 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C7 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C9 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00

```

VARMAX(C7 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C9 ) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C11 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11 ) = 0.000000E+00
*****

```

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

```

USEGRD = T ;USEGRX = T
POTVEL = T
ASAP = T
PARSOL = T
IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
RG( 1) = 2.017500E-05
RG( 2) = 2.017500E-06
RG( 3) = 1.000000E+00
RG( 4) = 1.340000E+00
RG( 5) = 2.060000E+00
RG( 6) = 3.310000E+00
RG( 7) = 3.510000E+00
RG( 8) = 2.845000E-05
RG( 9) = 9.540000E-01
RG(10) = 5.380000E+00
RG(11) = 5.100000E-05
RG(12) = 8.540000E-01
RG(13) = 6.506000E+00
RG(14) = 2.930000E-05
RG(15) = 5.440000E-01
RG(16) = 2.576000E+00
RG(17) = 3.345000E-05
RG(18) = 6.620000E-01
RG(19) = 9.362000E+00
RG(20) = 4.100000E-01
RG(21) = 3.500000E-01
RG(22) = 3.000000E-01
RG(23) = 3.000000E-01
RG(24) = 1.175000E-05
RG(25) = 1.000000E-08
RG(26) = 3.120000E-08
RG(27) = 2.400000E-08
RG(28) = 1.100000E-08

```

Group 20. Preliminary Printout

```
ECHO = T
```

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

```

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1

```

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
> DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube3t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(MENTEN KINETICS)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL  = 1.000000E+00
ENUT  = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10.Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND , GRND)

PATCH (MENTNB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MENTNB ,C1 , GRND4 , 0.000000E+00)

PATCH (MENTNT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MENTNT ,C3 , GRND4 , 0.000000E+00)

PATCH (MENTNE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MENTNE ,C5 , GRND4 , 0.000000E+00)

PATCH (MENTNX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MENTNX ,C7 , GRND4 , 0.000000E+00)

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C3 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C5 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C7 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C9 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00


```

VARMAX(C7 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C9 ) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9 ) = 0.000000E+00
VARMAX(C11 ) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11 ) = 0.000000E+00
*****

```

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

```

USEGRD = T ;USEGRX = T
POTVEL = T
ASAP = T
PARSOL = T
IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
RG( 1) = 2.017500E-05
RG( 2) = 2.017500E-06
RG( 3) = 1.000000E+00
RG( 4) = 1.340000E+00
RG( 5) = 2.060000E+00
RG( 6) = 3.310000E+00
RG( 7) = 3.510000E+00
RG( 8) = 5.690000E-05
RG( 9) = 4.770000E-01
RG(10) = 2.690000E+00
RG(11) = 1.020000E-04
RG(12) = 4.270000E-01
RG(13) = 3.252000E+00
RG(14) = 5.860000E-05
RG(15) = 2.720000E-01
RG(16) = 1.288000E+00
RG(17) = 6.690000E-05
RG(18) = 3.310000E-01
RG(19) = 4.681000E+00
RG(20) = 4.100000E-01
RG(21) = 3.500000E-01
RG(22) = 3.000000E-01
RG(23) = 3.000000E-01
RG(24) = 1.175000E-05
RG(25) = 3.000000E-08
RG(26) = 5.700000E-08
RG(27) = 2.400000E-08
RG(28) = 4.100000E-08

```

Group 20. Preliminary Printout

```
ECHO = T
```

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

```

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1

```

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)
GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
> DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube3t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(MONOD KINETICS)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL  = 1.000000E+00
ENUT  = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10.Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND      , GRND      )

PATCH (MONODB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODB ,C1 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODT ,C3 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODE ,C5 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODX ,C7 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGB ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGT ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGE ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGX ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRB ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRT ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRE ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRX ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

```

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALS DT, 1.000000E+06)

RELAX(C3 ,FALS DT, 1.000000E+06)

RELAX(C5 ,FALS DT, 1.000000E+06)

RELAX(C7 ,FALS DT, 1.000000E+06)

RELAX(C9 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALS DT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00

VARMAX(C7) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7) = 0.000000E+00

VARMAX(C9) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9) = 0.000000E+00

VARMAX(C11) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11) = 0.000000E+00

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

USEGRD = T ;USEGRX = T

POTVEL = T

ASAP = T

PARSOL = T

IDISPB = 1 ;IDISPC = 50

RG(1) = 2.017500E-05

RG(2) = 2.017500E-06

RG(3) = 1.000000E+00

RG(4) = 1.340000E+00

RG(5) = 2.060000E+00

RG(6) = 3.310000E+00

RG(7) = 3.510000E+00

RG(8) = 5.690000E-05

RG(9) = 4.770000E-01

RG(10) = 2.690000E+00

RG(11) = 1.020000E-04

RG(12) = 4.270000E-01

RG(13) = 3.252000E+00

RG(14) = 5.860000E-05

RG(15) = 2.720000E-01

RG(16) = 1.288000E+00
 RG(17) = 6.690000E-05
 RG(18) = 3.310000E-01
 RG(19) = 4.681000E+00
 RG(20) = 4.100000E-01
 RG(21) = 3.500000E-01
 RG(22) = 3.000000E-01
 RG(23) = 3.000000E-01
 RG(24) = 1.175000E-05

Group 20. Preliminary Printout
 ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
 NPRMON = 100000
 NPRMNT = 1
 TSTSWP = -1

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000
 NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
 ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
 CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
 > DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
 > DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
 > DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
 > OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
 > OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
 > OBJ, CLIPART, cube3t
 > OBJ, ROTATION24, 1
 > OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
 > OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
 > OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02

```

> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

```


TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(NO SOURCE)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL  = 1.000000E+00
ENUT  = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,36)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND      , GRND      )

PATCH (MONODB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODB ,C1 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODT ,C3 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODE ,C5 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODX ,C7 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGB ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGT ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGE ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGX ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRB ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRT ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRE ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRX ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

```

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C3 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C5 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C7 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C9 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00

VARMAX(C7) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7) = 0.000000E+00

VARMAX(C9) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9) = 0.000000E+00

VARMAX(C11) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11) = 0.000000E+00

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

USEGRD = T ;USEGRX = T

POTVEL = T

ASAP = T

PARSOL = T

IDISPB = 1 ;IDISPC = 50

RG(1) = 2.017500E-05

RG(2) = 2.017500E-06

RG(3) = 1.000000E+00

RG(4) = 1.340000E+00

RG(5) = 2.060000E+00

RG(6) = 3.310000E+00

RG(7) = 3.510000E+00

RG(8) = 5.690000E-05

RG(9) = 4.770000E-01

RG(10) = 2.690000E+00

RG(11) = 1.020000E-04

RG(12) = 4.270000E-01

RG(13) = 3.252000E+00

RG(14) = 5.860000E-05

RG(15) = 2.720000E-01

RG(16) = 1.288000E+00
 RG(17) = 6.690000E-05
 RG(18) = 3.310000E-01
 RG(19) = 4.681000E+00
 RG(20) = 4.100000E-01
 RG(21) = 3.500000E-01
 RG(22) = 3.000000E-01
 RG(23) = 3.000000E-01
 RG(24) = 1.175000E-05

Group 20. Preliminary Printout
 ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
 NPRMON = 100000
 NPRMNT = 1
 TSTSWP = -1

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000
 NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
 ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
 CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
 > DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
 > DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
 > DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
 > OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
 > OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
 > OBJ, CLIPART, cube3t
 > OBJ, ROTATION24, 1
 > OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
 > OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
 > OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02

```

> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

```

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(RETARD)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1  = 1.000000E+00
ENUL  = 1.000000E+00
ENUT  = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01
No PATCHes used for this Group

```

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```


PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND , GRND)

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C3 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C5 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C7 ,FALSDT, 1.000000E+06)

RELAX(C9 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00

VARMAX(C7) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7) = 0.000000E+00

VARMAX(C9) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9) = 0.000000E+00

VARMAX(C11) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11) = 0.000000E+00

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

USEGRD = T ;USEGRX = T

POTVEL = T

ASAP = T

PARSOL = T

IDISPB = 1 ;IDISPC = 50

RG(1) = 2.017500E-05

RG(2) = 2.017500E-06

```

RG( 3) = 1.000000E+00
RG( 4) = 1.340000E+00
RG( 5) = 2.060000E+00
RG( 6) = 3.310000E+00
RG( 7) = 3.510000E+00
RG( 8) = 5.690000E-05
RG( 9) = 4.770000E-01
RG(10) = 2.690000E+00
RG(11) = 1.020000E-04
RG(12) = 4.270000E-01
RG(13) = 3.252000E+00
RG(14) = 5.860000E-05
RG(15) = 2.720000E-01
RG(16) = 1.288000E+00
RG(17) = 6.690000E-05
RG(18) = 3.310000E-01
RG(19) = 4.681000E+00
RG(20) = 4.100000E-01
RG(21) = 3.500000E-01
RG(22) = 3.000000E-01
RG(23) = 3.000000E-01
RG(24) = 1.175000E-05

```

Group 20. Preliminary Printout

ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

```

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1

```

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

```

NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

```

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

```

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
CSG1 = 'B'

```

```

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)
GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

```

```

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
> DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03

```

```

> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube3t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

```

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(ZERO ORDER KINETICS)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1   = 1.000000E+00
ENUL   = 1.000000E+00
ENUT   = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10.Inter-Phase Transfer Processes

```
*****
```

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

```
INIADD = F
```

```
*****
```

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,50)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND , GRND)

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND , GRND)

PATCH (ZEROB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (ZEROB ,C1 , FIXFLU , -3.000000E-08)

PATCH (ZEROT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (ZEROT ,C3 , FIXFLU , -5.700000E-08)

PATCH (ZEROE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (ZEROE ,C5 , FIXFLU , -2.400000E-08)

PATCH (ZEROX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (ZEROX ,C7 , FIXFLU , -4.100000E-08)

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 500

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C3 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C5 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C7 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C9 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(C11 ,FALSDT, 9.999000E+05)

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

Group 18. Limits

VARMAX(U1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+06

VARMAX(V1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+06

VARMAX(C1) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C1) = 0.000000E+00

VARMAX(C3) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C3) = 0.000000E+00

VARMAX(C5) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C5) = 0.000000E+00

VARMAX(C7) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C7) = 0.000000E+00
VARMAX(C9) = 5.000000E+00 ;VARMIN(C9) = 0.000000E+00
VARMAX(C11) = 1.000000E+02 ;VARMIN(C11) = 0.000000E+00

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

USEGRD = T ;USEGRX = T
POTVEL = T
ASAP = T
PARSOL = T
IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
RG(1) = 2.017500E-05
RG(2) = 2.017500E-06
RG(3) = 1.000000E+00
RG(4) = 1.340000E+00
RG(5) = 2.060000E+00
RG(6) = 3.310000E+00
RG(7) = 3.510000E+00
RG(8) = 2.845000E-05
RG(9) = 9.540000E-01
RG(10) = 5.380000E+00
RG(11) = 5.100000E-05
RG(12) = 8.540000E-01
RG(13) = 6.506000E+00
RG(14) = 2.930000E-05
RG(15) = 5.440000E-01
RG(16) = 2.576000E+00
RG(17) = 3.345000E-05
RG(18) = 6.620000E-01
RG(19) = 9.362000E+00
RG(20) = 4.100000E-01
RG(21) = 3.500000E-01
RG(22) = 3.000000E-01
RG(23) = 3.000000E-01
RG(24) = 1.175000E-05
RG(25) = 1.000000E-08
RG(26) = 3.120000E-08
RG(27) = 2.400000E-08
RG(28) = 1.100000E-08

Group 20. Preliminary Printout

ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50
CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
> DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube3t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(NO SOURCE AFTER 36 YEARS)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,1.576800E+09,50)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,35,10,1)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(149)=R11 ; NAME(150)=POT

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,R11 ,POT)

* Stored variables list

STORE(V1 ,U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(R11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(POT ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

TERMS (R11 ,N,N,N,Y,N,Y)

TERMS (POT ,N,N,Y,N,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

```

SETPRPS(1, 67)
RHO1   = 1.000000E+00
ENUL   = 1.000000E+00
ENUT   = 0.000000E+00
DVO1DT = 1.180000E-04
PRNDTL(C1 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C3 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C5 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(C7 ) = -1.695000E-06
PRNDTL(C9 ) = -1.695000E-06 ;PRNDTL(POT ) = -8.070000E-06
*****

```

Group 10.Inter-Phase Transfer Processes

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(C1 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C3 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C5 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(C7 ) = 0.000000E+00
FIINIT(C9 ) = 5.000000E+00 ;FIINIT(C11 ) = 1.700000E+00
FIINIT(R11 ) = 0.000000E+00 ;FIINIT(POT ) = 3.450000E+01

```

No PATCHes used for this Group

INIADD = F

Group 12. Convection and diffusion adjustments

```

PATCH (GP12DFNT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (GP12DFNT,C1 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C3 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C5 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C7 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,C9 , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
COVAL (GP12DFNT,POT , 1.000000E-01, 0.000000E+00)
*****

```

Group 13. Boundary & Special Sources

```

PATCH (EAST ,EAST ,2,0,0,0,0,1,50)
COVAL (EAST ,POT , FIXVAL , 3.140000E+01)

```

```

PATCH (WEST ,WEST ,1,0,0,0,0,1,50)
COVAL (WEST ,C9 , FIXVAL , 5.000000E+00)
COVAL (WEST ,POT , FIXVAL , 3.450000E+01)

```

```

PATCH (INLTNO ,NORTH ,3,0,0,0,0,1,50)
COVAL (INLTNO ,POT , FIXFLU , 7.820000E-09)

```

```

PATCH (SOUR ,VOLUME,5,28,7,9,1,1,36)
COVAL (SOUR ,C1 , 4.860000E-08, 1.424000E+01)
COVAL (SOUR ,C3 , 1.157000E-08, 5.096000E+01)
COVAL (SOUR ,C5 , 6.360000E-08, 4.560000E+00)
COVAL (SOUR ,C7 , 5.670000E-08, 2.574000E+01)

```

```

PATCH (RETARDB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDB ,C1 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDT ,C3 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDE ,C5 , GRND      , GRND      )

PATCH (RETARDX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (RETARDX ,C7 , GRND      , GRND      )

PATCH (MONODB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODB ,C1 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODT ,C3 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODE ,C5 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (MONODX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (MONODX ,C7 , GRND1      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGB ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGT ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGE ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (OXYGX ,C9 , GRND2      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRB ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRB ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRT ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRE ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRE ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (BACTRX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,50)
COVAL (BACTRX ,C11 , GRND3      , 0.000000E+00)

PATCH (SOUR2 ,VOLUME,4,0,0,0,0,37,50)

```

```

COVAL(SOUR2 ,C1 ,FIXVAL , 0.000000E+00)
COVAL(SOUR2 ,C3 ,FIXVAL , 0.000000E+00)
COVAL(SOUR2 ,C5 ,FIXVAL , 0.000000E+00)
COVAL(SOUR2 ,C7 ,FIXVAL , 0.000000E+00)

```

```

EGWF = T

```

```

*****

```

```

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

```

```

*****

```

```

Group 15. Terminate Sweeps

```

```

LSWEEP = 500

```

```

RESFAC = 1.000000E-05

```

```

*****

```

```

Group 16. Terminate Iterations

```

```

*****

```

```

Group 17. Relaxation

```

```

RELAX(C1 ,FALS DT, 1.000000E+06)

```

```

RELAX(C3 ,FALS DT, 1.000000E+06)

```

```

RELAX(C5 ,FALS DT, 1.000000E+06)

```

```

RELAX(C7 ,FALS DT, 1.000000E+06)

```

```

RELAX(C9 ,FALS DT, 9.999000E+05)

```

```

RELAX(C11 ,FALS DT, 9.999000E+05)

```

```

RELAX(POT ,LINRLX, 7.000000E-01)

```

```

*****

```

```

Group 18. Limits

```

```

VARMAX(U1 )= 1.000000E+06 ;VARMIN(U1 )=-1.000000E+06

```

```

VARMAX(V1 )= 1.000000E+06 ;VARMIN(V1 )=-1.000000E+06

```

```

VARMAX(C1 )= 1.000000E+02 ;VARMIN(C1 )= 0.000000E+00

```

```

VARMAX(C3 )= 1.000000E+02 ;VARMIN(C3 )= 0.000000E+00

```

```

VARMAX(C5 )= 1.000000E+02 ;VARMIN(C5 )= 0.000000E+00

```

```

VARMAX(C7 )= 1.000000E+02 ;VARMIN(C7 )= 0.000000E+00

```

```

VARMAX(C9 )= 5.000000E+00 ;VARMIN(C9 )= 0.000000E+00

```

```

VARMAX(C11 )= 1.000000E+02 ;VARMIN(C11 )= 0.000000E+00

```

```

*****

```

```

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

```

```

USEGRD = T ;USEGRX = T

```

```

POTVEL = T

```

```

ASAP = T

```

```

PARSOL = T

```

```

IDISPB = 1 ;IDISPC = 50

```

```

RG( 1)= 2.017500E-05

```

```

RG( 2)= 2.017500E-06

```

```

RG( 3)= 1.000000E+00

```

```

RG( 4)= 1.340000E+00

```

```

RG( 5)= 2.060000E+00

```

```

RG( 6)= 3.310000E+00

```

```

RG( 7)= 3.510000E+00

```

```

RG( 8)= 5.690000E-05

```

```

RG( 9)= 4.770000E-01

```

RG(10) = 2.690000E+00
 RG(11) = 1.020000E-04
 RG(12) = 4.270000E-01
 RG(13) = 3.252000E+00
 RG(14) = 5.860000E-05
 RG(15) = 2.720000E-01
 RG(16) = 1.288000E+00
 RG(17) = 6.690000E-05
 RG(18) = 3.310000E-01
 RG(19) = 4.681000E+00
 RG(20) = 4.100000E-01
 RG(21) = 3.500000E-01
 RG(22) = 3.000000E-01
 RG(23) = 3.000000E-01
 RG(24) = 1.175000E-05

Group 20. Preliminary Printout

ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 28 ;IYMON = 10 ;IZMON = 1

NPRMON = 100000

NPRMNT = 1

TSTSWP = -1

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000

NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 10000

ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 50

CSG1 ='B'

GVIEW(P,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM, SIZE, 7.500000E+02, 4.000000E+01, 1.000000E-02
 > DOM, MONIT, 6.000000E+02, 3.800000E+01, 5.000000E-03
 > DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
 > DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET
 > OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
 > OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
 > OBJ, CLIPART, cube3t

```

> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 2.800000E+01, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, cube12t
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, INLTNO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.000000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 7.500000E+02, 0.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.000000E+02, 2.800000E+01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 4.900000E+02, 8.000000E+00, 1.000000E-02
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
STOP

```

TALK=T;RUN(1, 1)

Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 20/10/03

CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title

TEXT(BIODEGRADATION)

Group 2. Transience

STEADY=F

* Set overall time and no. of steps

RSET(U,0.000000E+00,8.640000E+07,11)

* Modify regions

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,204,4,124)

Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS = T

* Non-default variable names

NAME(145)=RCH4 ; NAME(146)=RSO4

NAME(147)=RFE ; NAME(148)=RMN

NAME(149)=RNO3 ; NAME(150)=RO2

* Solved variables list

SOLVE(C1 ,C3 ,C5 ,C7 ,C9 ,C11 ,C13 ,C15)

SOLVE(C17 ,C19)

* Stored variables list

STORE(RO2 ,RNO3,RMN ,RFE ,RSO4,RCH4,W1 ,V1)

STORE(U1 ,P1)

* Additional solver options

SOLUTN(C1 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C3 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C5 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C7 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C9 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C11 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C13 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C15 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C17 ,Y,Y,Y,N,N,N)

SOLUTN(C19 ,Y,Y,Y,N,N,N)

Group 8. Terms & Devices

TERMS (C7 ,N,N,N,Y,Y,Y)
TERMS (C11 ,N,N,N,Y,Y,Y)

Group 9. Properties

PRESS0 = 1.000000E+05 ;TEMP0 = 2.730000E+02

SETPRPS(1, 67)

RHO1 = 1.000000E+00

ENUL = 1.000000E+00

ENUT = 0.000000E+00

DVO1DT = 1.180000E-04

PRNDTL(C1)= -3.870000E-05 ;PRNDTL(C3)= -3.870000E-05

PRNDTL(C5)= -3.870000E-05 ;PRNDTL(C9)= -3.870000E-05

PRNDTL(C13)= -3.870000E-05 ;PRNDTL(C15)= -3.870000E-05

PRNDTL(C17)= -3.870000E-05 ;PRNDTL(C19)= -3.870000E-05

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

FIINIT(U1)= 3.870000E-06 ;FIINIT(V1)= 0.000000E+00

FIINIT(W1)= 0.000000E+00 ;FIINIT(C1)= 0.000000E+00

FIINIT(C3)= 3.000000E+00 ;FIINIT(C5)= 8.000000E+00

FIINIT(C7)= 1.424000E+01 ;FIINIT(C9)= 1.000000E-01

FIINIT(C11)= 3.821000E+01 ;FIINIT(C13)= 1.000000E-01

FIINIT(C15)= 5.000000E+00 ;FIINIT(C17)= 1.000000E-02

FIINIT(C19)= 0.000000E+00 ;FIINIT(RCH4)= 0.000000E+00

FIINIT(RSO4)= 0.000000E+00 ;FIINIT(RFE)= 0.000000E+00

FIINIT(RMN)= 0.000000E+00 ;FIINIT(RNO3)= 0.000000E+00

FIINIT(RO2)= 0.000000E+00

No PATCHes used for this Group

INIADD = F

Group 12. Convection and diffusion adjustments

PATCH (GP12DFHT,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)

COVAL (GP12DFHT,C1 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C3 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C5 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C7 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C9 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C11 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C13 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C15 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C17 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

COVAL (GP12DFHT,C19 , 3.000000E-01, 0.000000E+00)

Group 13. Boundary & Special Sources

PATCH (SOUR ,VOLUME,3,0,0,0,0,1,11)
COVAL (SOUR ,C1 ,FIXVAL , 1.000000E+02)
COVAL (SOUR ,C19 ,FIXVAL , 1.000000E+02)

PATCH (ORGAN ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (ORGAN ,C1 ,GRND , 0.000000E+00)

PATCH (OXYGEN ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (OXYGEN ,C3 ,GRND1 , 0.000000E+00)

PATCH (NITRAT ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (NITRAT ,C5 ,GRND1 , 0.000000E+00)

PATCH (PYROLU ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (PYROLU ,C7 ,GRND1 , 0.000000E+00)

PATCH (HYDROX ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (HYDROX ,C11 ,GRND1 , 0.000000E+00)

PATCH (SULFA ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (SULFA ,C15 ,GRND1 , 0.000000E+00)

PATCH (MANGA ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (MANGA ,C9 ,FIXFLU ,GRND1)

PATCH (IRON ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (IRON ,C13 ,FIXFLU ,GRND1)

PATCH (METHAN ,VOLUME,0,0,0,0,0,1,11)
COVAL (METHAN ,C17 ,FIXFLU ,GRND1)

EGWF = T

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 200

RESFAC = 1.000000E-05

Group 16. Terminate Iterations

Group 17. Relaxation

RELAX(C1 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C3 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C5 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C7 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C11 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C15 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C17 ,FALSDT, 3.000000E+06)

RELAX(C19 ,FALSDT, 2.000000E+06)

Group 18. Limits

VARMAX(U1)= 1.000000E+06 ;VARMIN(U1)=-1.000000E+06
VARMAX(V1)= 1.000000E+06 ;VARMIN(V1)=-1.000000E+06
VARMAX(W1)= 1.000000E+06 ;VARMIN(W1)=-1.000000E+06
VARMAX(C1)= 1.000000E+02 ;VARMIN(C1)= 0.000000E+00
VARMAX(C3)= 3.000000E+00 ;VARMIN(C3)= 0.000000E+00
VARMAX(C5)= 8.000000E+00 ;VARMIN(C5)= 0.000000E+00
VARMAX(C7)= 1.424000E+01 ;VARMIN(C7)= 0.000000E+00
VARMAX(C11)= 3.821000E+01 ;VARMIN(C11)= 0.000000E+00
VARMAX(C15)= 5.000000E+00 ;VARMIN(C15)= 0.000000E+00
VARMAX(C17)= 1.000000E+10 ;VARMIN(C17)= 1.000000E-02
VARMAX(C19)= 1.000000E+02 ;VARMIN(C19)= 0.000000E+00

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

USEGRD = T ;USEGRX = T

ASAP = T

PARSOL = T

IDISPB = 1 ;IDISPC = 11

RG(1)= 2.083000E-06

RG(2)= 5.000000E-01

RG(3)= 1.070000E+00

RG(4)= 1.273000E-06

RG(5)= 5.000000E-01

RG(6)= 1.000000E-01

RG(7)= 1.650000E+00

RG(8)= 8.102000E-07

RG(9)= 5.000000E-01

RG(10)= 1.000000E-01

RG(11)= 3.670000E+00

RG(12)= 1.157000E-07

RG(13)= 5.000000E-01

RG(14)= 1.000000E-01

RG(15)= 7.470000E+00

RG(16)= 1.157000E-07

RG(17)= 5.000000E-01

RG(18)= 1.000000E-01

RG(19)= 1.600000E+00

RG(20)= 1.042000E-07

RG(21)= 5.000000E-01

RG(22)= 1.000000E-01

RG(23)= 1.000000E-01

RG(24)= 5.800000E+00

RG(25)= 1.427000E+01

Group 20. Preliminary Printout

ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 5 ; IYMON = 1 ; IZMON = 6

NPRMON = 100000

NPRMNT = 1

TSTSWP = -1

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000

NTPRIN = 100000 ; ISTPRF = 1 ; ISTPRL = 10000

ISWPRF = 1 ; ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

IDISPA = 1 ; IDISPB = 1 ; IDISPC = 11

CSG1 = 'L'

GVIEW(P,0.000000E+00,-1.000000E+00,0.000000E+00)

GVIEW(UP,0.000000E+00,0.000000E+00,1.000000E+00)

> DOM, SIZE, 5.100000E+02, 1.000000E+01, 3.100000E+02

> DOM, MONIT, 1.125000E+01, 1.250000E+00, 1.375000E+01

> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00

> DOM, SNAPSIZ, 1.000000E-02

> OBJ, NAME, INLET

> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00

> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 1.000000E+01, 3.100000E+02

> OBJ, CLIPART, cube3t

> OBJ, ROTATION24, 1

> OBJ, TYPE, INLET

> OBJ, PRESSURE, 0.000000E+00

> OBJ, VELOCITY, 3.870000E-06, 0.000000E+00, 0.000000E+00

> OBJ, TEMPERATURE, 0.000000E+00

> OBJ, INLET_C3, 3.000000E+00

> OBJ, INLET_C5, 8.000000E+00

> OBJ, INLET_C11, 3.821000E+01

> OBJ, INLET_C15, 5.000000E+00

> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

> OBJ, NAME, OUTLET

> OBJ, POSITION, 5.100000E+02, 0.000000E+00, 0.000000E+00

> OBJ, SIZE, 0.000000E+00, 1.000000E+01, 3.100000E+02

> OBJ, CLIPART, cube12t

> OBJ, ROTATION24, 1

> OBJ, TYPE, OUTLET

> OBJ, PRESSURE, 0.000000E+00

> OBJ, TEMPERATURE, SAME

```
> OBJ, COEFFICIENT, 1.000000E+03
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

> OBJ, NAME, SOUR
> OBJ, POSITION, 1.400000E+02, 0.000000E+00, 1.550000E+02
> OBJ, SIZE, 1.650000E+01, 1.000000E+01, 1.650000E+01
> OBJ, CLIPART, default
> OBJ, ROTATION24, 1
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
> OBJ, COLOR-MODE, 2
> OBJ, COLOR-VAL, 15
> OBJ, OPAQUE, 50
STOP
```

c<html><body><pre><!-- -->

C.... FILE NAME GROUND.FTN-----240802

SUBROUTINE GROUND

INCLUDE '/phoenics/d_includ/satear'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdloc'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/satgrd'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdear'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdbfc'

COMMON/IDATA/IDFL(118)

COMMON/GENI/NXNY,IGFIL(59)

COMMON/LDATA/LFIL1(7),LFIL2(76)

COMMON /NAMFN/NAMFUN,NAMSUB

CHARACTER*6 NAMFUN,NAMSUB

LOGICAL EF,NF,HF,EF0,NF0,HF0

C LOGICAL BFC,EF,NF,HF,EF0,NF0,HF0

COMMON/IDATA/NFM,IGF(21),IPRL,IBTAU,ILTLS,IGFIL(15),

1ITEM1,ITEM2,ISPH1,ISPH2,ICON1,ICON2,IPRPS,IRADX,IRADY,IRADZ,IVFOL

COMMON/NXNY/DRHODP/ITEMP/IDEN/DVMOD/IDVCGR

CXXX USER

SECTION STARTS:

C 1 Set dimensions of data-for-GROUND arrays here. WARNING: the

C corresponding arrays in the MAIN program of the satellite

C and EARTH must have the same dimensions.

PARAMETER (NLG=100, NIG=200, NRG=200, NCG=100)

COMMON/LGRND/LG(NLG)/IGRND/IG(NIG)/RGRND/RG(NRG)/CGRND/CG(NC
G)

LOGICAL LG

CHARACTER*4 CG

C 2 User dimensions own arrays here, for example:

C DIMENSION GUH(10,10),GUC(10,10),GUX(10,10),GUZ(10)

c DIMENSION UUGV1(20,30),UUGPOT(20,30)

c DATA NXDIM,NYDIM/30,20/

DIMENSION UUGV1(10,35),UUGPOT(10,35)

DATA NXDIM,NYDIM/35,10/

C 3 User places his data statements here, for example:

C DATA NXDIM,NYDIM/10,10/

C

C 4 Insert own coding below as desired, guided by GREX examples.

C Note that the satellite-to-GREX special data in the labelled

C COMMONs /RSG/, /ISG/, /LSG/ and /CSG/ can be included and

C used below but the user must check GREX for any conflicting

C uses. The same comment applies to the EARTH-spare working

C arrays EASP1, EASP2,...EASP20. In addition to the EASPs,

C there are 10 GRound-earth SPare arrays, GRSP1,...,GRSP10,

C supplied solely for the user, which are not used by GREX. If

C the call to GREX has been deactivated then all of the arrays

C may be used without reservation.

```

C
C*****
**
c
  IXL=IABS(IXL)
  IF(IGR.EQ.13) GO TO 13
  IF(IGR.EQ.19) GO TO 19
  GO TO (1,2,3,4,5,6,25,8,9,10,11,12,13,14,25,25,25,25,19,20,25,
  121,23,24),IGR
  25 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 1. Run title and other preliminaries
C
  1 GO TO (1001,1002,1003),ISC
C
  1001 CONTINUE
C
C * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via MAKE, GXMAKE etc which it is
C   essential to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C   User may here change message transmitted to the VDU screen
  IF(.NOT.NULLPR.AND.IDVCGR.EQ.0)
    1 CALL WRYT40('GROUND file is GROUND.F of: 240802 ')
C
  RETURN
C * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via GXMAKE which it is not
C   necessary to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C
  1003 CONTINUE
  GO TO 25
  1002 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 2. Transience; time-step specification
C
  2 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 3. X-direction grid specification
C
  3 CONTINUE
  RETURN
C*****
C

```

```

C--- GROUP 4. Y-direction grid specification
C
  4 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 5. Z-direction grid specification
C
  5 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion
C
  6 CONTINUE
  RETURN
C*****
C * Make changes for this group only in group 19.
C--- GROUP 7. Variables stored, solved & named
C*****
C
C--- GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices
C
  8 GO TO (81,82,83,84,85,86,87,88,89,810,811,812,813,814,815,816)
  1,ISC
  81 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For U1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  82 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For U2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  83 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For V1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  84 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For V2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  85 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C For W1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  86 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For W2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN

```

```

87 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Volumetric source for gala
  RETURN
88 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Convection fluxes
C--- Entered when UCONV =.TRUE.; block-location indices are:
C  LD11 for east and north (accessible at the same time),
C  LD12 for west and south (accessible at the same time),
C  LD2  for high (which becomes low for the next slab).
C  User should provide INDVAR and NDIREC IF's as appropriate.
  RETURN
89 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Diffusion coefficients
C--- Entered when UDIFF =.TRUE.; block-location indices are LAE
C  for east, LAW for west, LAN for north, LAS for
C  south, LD11 for high, and LD11 for low.
C  User should provide INDVAR and NDIREC IF's as above.
C  EARTH will apply the DIFCUT and GP12 modifications after the user
C  has made his settings.
  RETURN
90 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 --- Convection neighbours
  RETURN
91 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 --- Diffusion neighbours
  RETURN
92 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 --- Linearised sources
  RETURN
93 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 --- Correction coefficients
  RETURN
94 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 --- User's own solver
  RETURN
95 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 --- Change solution
  RETURN
96 CONTINUE
C * ----- SECTION 16 --- Change DVEL/DPs
  RETURN
C
C * See the equivalent section in GREX for the indices to be
C  used in sections 7 - 16
C
C * Make all other group-8 changes in GROUP 19.
C*****
C

```



```

C--- GROUP 9. Properties of the medium (or media)
C
C The sections in this group are arranged sequentially in their
C order of calling from EARTH. Thus, as can be seen from below,
C the temperature sections (10 and 11) precede the density
C sections (1 and 3); so, density formulae can refer to
C temperature stores already set.
  9 GO TO (91,92,93,94,95,96,97,98,99,900,901,902,903,904,905),ISC
C*****
900 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 -----
C For TMP1.LE.GRND----- phase-1 temperature Index TEMP1
  RETURN
901 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 -----
C For TMP2.LE.GRND----- phase-2 temperature Index TEMP2
  RETURN
902 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 -----
C For EL1.LE.GRND----- phase-1 length scale Index LEN1
  RETURN
903 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 -----
C For EL2.LE.GRND----- phase-2 length scale Index LEN2
  RETURN
904 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 -----
C For SOLVE(TEM1)----- phase-1 specific heat
  RETURN
905 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 -----
C For SOLVE(TEM2)----- phase-2 specific heat
  RETURN
91 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1      Index DEN1
  RETURN
92 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For DRH1DP.LE.GRND---  $D(\ln(DEN))/DP$  for phase 1
C                               Index D1DP
  RETURN
93 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For RHO2.LE.GRND--- density for phase 2      Index DEN2
  RETURN
94 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For DRH2DP.LE.GRND---  $D(\ln(DEN))/DP$  for phase 2

```

```

C                                     Index D2DP
  RETURN
95 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C   For ENUT.LE.GRND--- reference turbulent kinematic viscosity
C                                     Index VIST
  RETURN
96 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C   For ENUL.LE.GRND--- reference laminar kinematic viscosity
C                                     Index VISL
  RETURN
97 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 -----
C   For PRNDTL( ).LE.GRND--- laminar PRANDTL nos., or diffusivity
C                                     Index LAMPR
  RETURN
98 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 -----
C   For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of first phase
C                                     Index FII1
  RETURN
99 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 -----
C   For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of second phase
C                                     Index FII2
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
C
  10 GO TO (101,102,103,104,105),ISC
101 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C   For CFIPS.LE.GRND--- inter-phase friction coeff.
C                                     Index INTFRC
  RETURN
c<a name="10.2"></a>
102 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C   For CMDOT.EQ.GRND- inter-phase mass transfer Index INTMDT
  RETURN
103 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C   For CINT( ).EQ.GRND--- phase1-to-interface transfer coefficients
C                                     Index COI1
  RETURN
104 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----

```

```

C   For CINT( ).EQ.GRND--- phase2-to-interface transfer coefficients
C                               Index COI2
      RETURN
105 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C   For CVM.EQ.GRND--- virtual mass coefficient
C                               Index LD12
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
C                               Index VAL
      11 CONTINUE
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 12. Convection and diffusion adjustments
C
      12 CONTINUE
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 13. Boundary conditions and special sources
C                               Index for Coefficient - CO
C                               Index for Value      - VAL
      13 CONTINUE
      GO TO (130,131,132,133,134,135,136,137,138,139,1310,
      11311,1312,1313,1314,1315,1316,1317,1318,1319,1320,1321),ISC
130 CONTINUE
C----- SECTION 1 ----- coefficient = GRND
      IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDB'))THEN
LFCO = L0F(CO)
      DO 1301 IY = IYF,IYL
      DO 1301 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY
      F(LFCO+ICELL)=(RG(4)-1)/DT
1301 CONTINUE
      ENDIF

      IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDT'))THEN
LFCO = L0F(CO)
      DO 1302 IY = IYF,IYL
      DO 1302 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY
      F(LFCO+ICELL)=(RG(5)-1)/DT
1302 CONTINUE
      ENDIF

      IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDE'))THEN

```

```

LFCO = L0F(CO)
  DO 1303 IY = IYF,IYL
  DO 1303 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
  F(LFCO+ICELL)=(RG(6)-1)/DT
1303 CONTINUE
  ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDX'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 1304 IY = IYF,IYL
  DO 1304 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
  F(LFCO+ICELL)=(RG(7)-1)/DT
1304 CONTINUE
  ENDIF
  RETURN
131 CONTINUE
C----- SECTION 2 ----- coefficient = GRND1
  IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'MONODB'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13101 IY = IYF,IYL
  DO 13101 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC1K1=RG(8)/RG(9)

GQC1K2=(1.0)/(RG(10)+VARYX(C1))

GQC1K3=VARYX(C9)/(RG(10)+VARYX(C9))
GQC1K4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC1K1*GQC1K2*GQC1K3*GQC1K4
13101 CONTINUE
  ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'MONODT'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13102 IY = IYF,IYL
  DO 13102 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC3K1=RG(11)/RG(12)

GQC3K2=(1.0)/(RG(13)+VARYX(C3))

GQC3K3=VARYX(C9)/(RG(13)+VARYX(C9))
GQC3K4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC3K1*GQC3K2*GQC3K3*GQC3K4
13102 CONTINUE
  ENDIF

```

```

IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'MONODE'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13103 IY = IYF,IYL
  DO 13103 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC5K1=RG(14)/RG(15)

GQC5K2=(1.0)/(RG(16)+VARYX(C5))

GQC5K3=VARYX(C9)/(RG(16)+VARYX(C9))
GQC5K4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC5K1*GQC5K2*GQC5K3*GQC5K4
13103 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'MONODX'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13104 IY = IYF,IYL
  DO 13104 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC7K1=RG(17)/RG(18)

GQC7K2=(1.0)/(RG(19)+VARYX(C7))

GQC7K3=VARYX(C9)/(RG(19)+VARYX(C9))
GQC7K4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC7K1*GQC7K2*GQC7K3*GQC7K4
13104 CONTINUE
ENDIF
RETURN
132 CONTINUE
C----- SECTION 3 ----- coefficient = GRND2
IF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGB'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13201 IY = IYF,IYL
  DO 13201 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9B1=(RG(8)/RG(9))*RG(20)

GQC9B2=VARYX(C1)/(RG(10)+VARYX(C1))

GQC9B3=(1.0)/(RG(10)+VARYX(C9))
GQC9B4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC9B1*GQC9B2*GQC9B3*GQC9B4
13201 CONTINUE
ENDIF

```

```

IF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGT'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13202 IY = IYF,IYL
  DO 13202 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9T1=(RG(11)/RG(12))*RG(21)

GQC9T2=VARYX(C3)/(RG(13)+VARYX(C3))

GQC9T3=(1.0)/(RG(13)+VARYX(C9))
GQC9T4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC9T1*GQC9T2*GQC9T3*GQC9T4
13202 CONTINUE
ENDIF

```

```

IF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGE'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13203 IY = IYF,IYL
  DO 13203 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9E1=(RG(14)/RG(15))*RG(22)

GQC9E2=VARYX(C5)/(RG(16)+VARYX(C5))

GQC9E3=(1.0)/(RG(16)+VARYX(C9))
GQC9E4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC9E1*GQC9E2*GQC9E3*GQC9E4
13203 CONTINUE
ENDIF

```

```

IF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGX'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13204 IY = IYF,IYL
  DO 13204 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9X1=(RG(17)/RG(18))*RG(23)

GQC9X2=VARYX(C7)/(RG(19)+VARYX(C7))

GQC9X3=(1.0)/(RG(19)+VARYX(C9))
GQC9X4=VARYX(C11)
  F(LFCO+ICELL)=GQC9X1*GQC9X2*GQC9X3*GQC9X4
13204 CONTINUE
ENDIF
RETURN

```

```

133 CONTINUE
C----- SECTION 4 ----- coefficient = GRND3
  IF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'BACTRB'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13301 IY = IYF,IYL
  DO 13301 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC11B1=RG(8)

GQC11B2=VARYX(C1)/(RG(10)+VARYX(C1))

GQC11B3=VARYX(C9)/(RG(10)+VARYX(C9))

GQC11B4=GQC11B1*GQC11B2*GQC11B3
GQC11B5=GQC11B4
  F(LFCO+ICELL)=(GQC11B5)*(-1.0)
13301 CONTINUE
  ENDIF

  IF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'BACTRT'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13302 IY = IYF,IYL
  DO 13302 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC11T1=RG(11)

GQC11T2=VARYX(C3)/(RG(13)+VARYX(C3))

GQC11T3=VARYX(C9)/(RG(13)+VARYX(C9))

GQC11T4=GQC11T1*GQC11T2*GQC11T3
GQC11T5=GQC11T4
  F(LFCO+ICELL)=(GQC11T5)*(-1.0)
13302 CONTINUE
  ENDIF
  IF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'BACTRE'))THEN
LFCO = L0F(CO)
  DO 13303 IY = IYF,IYL
  DO 13303 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC11E1=RG(14)

GQC11E2=VARYX(C5)/(RG(16)+VARYX(C5))

GQC11E3=VARYX(C9)/(RG(16)+VARYX(C9))

GQC11E4=GQC11E1*GQC11E2*GQC11E3
GQC11E5=GQC11E4
  F(LFCO+ICELL)=(GQC11E5)*(-1.0)

```

13303 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'BACTRX'))THEN
LFCO = L0F(CO)
DO 13304 IY = IYF,IYL
DO 13304 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC11X1=RG(17)

GQC11X2=VARYX(C7)/(RG(19)+VARYX(C7))

GQC11X3=VARYX(C9)/(RG(19)+VARYX(C9))

GQC11X4=GQC11X1*GQC11X2*GQC11X3
GQC11X5=GQC11X4

F(LFCO+ICELL)=(GQC11X5)*(-1.0)

13304 CONTINUE
ENDIF
RETURN

134 CONTINUE

C----- SECTION 5 ----- coefficient = GRND4

IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'MENTNB'))THEN
LFCO = L0F(CO)
DO 13401 IY = IYF,IYL
DO 13401 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC1K1=RG(25)

GQC1K2=(1.0)/(RG(10)+VARYX(C1))

F(LFCO+ICELL)=GQC1K1*GQC1K2
13401 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'MENTNT'))THEN
LFCO = L0F(CO)
DO 13402 IY = IYF,IYL
DO 13402 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC3K1=RG(26)

GQC3K2=(1.0)/(RG(13)+VARYX(C3))
F(LFCO+ICELL)=GQC3K1*GQC3K2
13402 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'MENTNE'))THEN
LFCO = L0F(CO)


```

DO 13403 IY = IYF,IYL
DO 13403 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC5K1=RG(27)

GQC5K2=(1.0)/(RG(16)+VARYX(C5))
F(LFCO+ICELL)=GQC5K1*GQC5K2
13403 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'MENTNX'))THEN
LFCO = L0F(CO)
DO 13404 IY = IYF,IYL
DO 13404 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC7K1=RG(28)

GQC7K2=(1.0)/(RG(19)+VARYX(C7))
F(LFCO+ICELL)=GQC7K1*GQC7K2
13404 CONTINUE
ENDIF
RETURN
135 CONTINUE
C----- SECTION 6 ----- coefficient = GRND5
RETURN
136 CONTINUE
C----- SECTION 7 ----- coefficient = GRND6
RETURN
137 CONTINUE
C----- SECTION 8 ----- coefficient = GRND7
RETURN
138 CONTINUE
C----- SECTION 9 ----- coefficient = GRND8
RETURN
139 CONTINUE
C----- SECTION 10 ----- coefficient = GRND9
RETURN
1310 CONTINUE
C----- SECTION 11 ----- coefficient = GRND10
RETURN
1311 CONTINUE
C----- SECTION 12 ----- value = GRND
IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDB'))THEN
LFVAL = L0F(VAL)
DO 13111 IY = IYF,IYL
DO 13111 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY
F(LFVAL+ICELL)=VARYX(OLD(C1))
13111 CONTINUE

```

```

ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDT'))THEN
  LFVAL = L0F(VAL)
  DO 13112 IY = IYF,IYL
  DO 13112 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
  F(LFVAL+ICELL)=VARYX(OLD(C3))
13112 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDE'))THEN
  LFVAL = L0F(VAL)
  DO 13113 IY = IYF,IYL
  DO 13113 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
  F(LFVAL+ICELL)=VARYX(OLD(C5))
13113 CONTINUE
ENDIF

IF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'RETARDX'))THEN
  LFVAL = L0F(VAL)
  DO 13114 IY = IYF,IYL
  DO 13114 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY
  F(LFVAL+ICELL)=VARYX(OLD(C7))
13114 CONTINUE
ENDIF
RETURN
1312 CONTINUE
C----- SECTION 13 ----- value = GRND1
  RETURN
1313 CONTINUE
C----- SECTION 14 ----- value = GRND2
  RETURN
1314 CONTINUE
C----- SECTION 15 ----- value = GRND3
  RETURN
1315 CONTINUE
C----- SECTION 16 ----- value = GRND4
  RETURN
1316 CONTINUE
C----- SECTION 17 ----- value = GRND5
  RETURN
1317 CONTINUE
C----- SECTION 18 ----- value = GRND6
  RETURN
1318 CONTINUE
C----- SECTION 19 ----- value = GRND7

```

```

    RETURN
1319 CONTINUE
C----- SECTION 20 ----- value = GRND8
    RETURN
1320 CONTINUE
C----- SECTION 21 ----- value = GRND9
    RETURN
1321 CONTINUE
C----- SECTION 22 ----- value = GRND10
    RETURN
C*****
C
C--- GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.
C
    14 CONTINUE
    RETURN
C*****
C* Make changes to data for GROUPS 15, 16, 17, 18 GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH
C
    19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),ISC
191 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 ---- Start of time step.
    RETURN
192 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 ---- Start of sweep.
    RETURN
193 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 ---- Start of iz slab.
    RETURN
194 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 ---- Start of iterations over slab.
    RETURN
1911 CONTINUE
C * ----- SECTION 11---- After calculation of convection
C             fluxes for scalars, and of volume
C             fractions, but before calculation of
C             scalars or velocities
    RETURN
199 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Start of solution sequence for
C                         a variable
    RETURN
1910 CONTINUE
C * ----- SECTION 10---- Finish of solution sequence for
C                         a variable
    RETURN

```

```

195 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 ---- Finish of iterations over slab.
C  RG(1)=KX/Ne
C  RG(2)=KY/Ne
C  RG(3)=KZ/Ne
C
C  MPOT = LBNAME('POT')
C  L0POT= L0F(MPOT)
C.....calculation of U1 based on sub. ptvl.....
C  IF(STORE(U1) .AND. NX.GT.1) THEN
C    L0U1=L0F(U1)
C    IF(BFC) THEN
C      NXNY = NX*NY
C      L0DXG=L0B(DXGPE) + (IZ-1)*NXNY
C    ELSE
C      L0DXG=L0F(DXG2D)
C    ENDIF
C    DO 1961 IX=IXF,IXL
C      IPLUS=NY
C      IF(IX.EQ.IXL) IPLUS=IPLUS-NXNY
C      DO 1961 IY=IYF,IYL
C        ICELL=IY+(IX-1)*NY
C        IF(EF(ICELL).OR.EF0(ICELL)) THEN
C          F(L0U1+ICELL) =0.0
C        ELSE
C          IE=ICELL+IPLUS
C          F(L0U1+ICELL)=RG(1)*((F(L0POT+ICELL)-F(L0POT+IE))/F(L0DXG+ICELL))
C        ENDIF
C      DO 1962 IY=8,IYL
C        ICELL=IY+(IX-1)*NY
C        F(L0U1+ICELL) =1.0e-9
C      1962 continue
C    ENDIF
C.....calculation of v1
C  CALL GETYX(LBNAME('POT'),UUGPOT,NYDIM,NXDIM)
C  IF(STORE(V1) .AND. NY.GT.1) THEN
C    L0V1=L0F(V1)
C    IF(BFC) THEN
C      L0DYG=L0B(DYGPN) + (IZ-1)*NXNY
C    ELSE
C      L0DYG=L0F(DYG2D)
C    ENDIF
C    DO 1963 IX=IXF,IXL
C      DO 1963 IY=IYF,IYL
C        I=IY+(IX-1)*NY
C        IF(IY.EQ.NY.OR.NF(IY).OR.NF0(IY)) THEN
C          F(L0V1+I)=0.0

```

```

        UUGV1(IY,IX)=0.0
    ELSE
        IN=IY+1
        UUGV1(IY,IX)=RG(2)*((UUGPOT(IY,IX)-UUGPOT(IN,IX))/F(L0DYG+IY))
c    F(L0V1+I)=RG(2)*((F(L0POT+I)-F(L0POT+IN))/F(L0DYG+I))
        ENDIF
1963 CONTINUE
C    DO 1964 IX=IXF,IXL
C    DO 1964 IY=18,NY
C    UUGV1(IY,IX)=-1.0e-010
C 1964 continue
        CALL SETYX(LBNAME('V1'),UUGV1,NYDIM,NXDIM)
        ENDIF
C.....calculation of w1
    IF(STORE(W1) .AND. NZ.GT.1 .AND. IZ.NE.NZ) THEN
        L0POTH = L0F(HIGH(MPOT))
        L0W1=L0F(W1)
        IF(BFC) L0DZG=L0B(DZGPH) + (IZ-1)*NXNY
        DO 1965 I=1,NXNY
            IF(HF(I).OR.HF0(I)) THEN
                F(L0W1+I)=0.0
            ELSE
                IF(BFC) THEN
                    DELZ=F(L0DZG+I)
                ELSE
                    DELZ=DZG
                ENDIF
                F(L0W1+I)=RG(3)*((F(L0POT+I)-F(L0POTH+I))/DELZ)
            ENDIF
        ENDIF
1965 CONTINUE
        ENDIF
        IF(BFC) THEN
C..... the cartesian components
            CALL GETCAR
            ENDIF

LFR11=L0F(LBNAME('R11'))
LFC11=L0F(C11)
DO 1966 IX=1,NX
IADD=NY*(IX-1)
DO 1966 IY=1,NY
I=IY+IADD
L0R11=LFR11+I
L0C11=LFC11+I
F(L0R11)=F(L0C11)-
(RG(24)*F(L0C11))
1966 CONTINUE
        RETURN
196 CONTINUE

```

```

C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.
  RETURN
197 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Finish of sweep.
  RETURN
198 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Finish of time step.
C
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 20. Preliminary print-out
C
  20 CONTINUE
  RETURN
C*****
C--- GROUP 21. Special print-out to screen
  21 CONTINUE
  GO TO 25
C*****
C* Make changes to data for GROUP 22 only in GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 23. Field print-out and plot control
  23 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 24. Dumps for restarts
C
  24 CONTINUE
  END
c</pre></strong></body></html>

```

c<html><body><pre><!-- -->

C.... FILE NAME GROUND.FTN-----240802

SUBROUTINE GROUND

INCLUDE '/phoenics/d_includ/satear'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdloc'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/satgrd'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdear'

INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdbfc'

COMMON/IDATA/IDFL(118)

COMMON/GENI/NXNY,IGFIL1(59)

COMMON/LDATA/LFIL1(7),LFIL2(76)

COMMON /NAMFN/NAMFUN,NAMSUB

CHARACTER*6 NAMFUN,NAMSUB

LOGICAL EF,NF,HF,EF0,NF0,HF0

COMMON/IDATA/NFM,IGF(21),IPRL,IBTAU,ILTLS,IGFIL(15),

1ITEM1,ITEM2,ISPH1,ISPH2,ICON1,ICON2,IPRPS,IRADX,IRADY,IRADZ,IVFOL

COMMON/NXNY/DRHODP/ITEMP/IDEN/DVMOD/IDVCGR

CXXX USER

SECTION STARTS:

C 1 Set dimensions of data-for-GROUND arrays here. WARNING: the

C corresponding arrays in the MAIN program of the satellite

C and EARTH must have the same dimensions.

PARAMETER (NLG=100, NIG=200, NRG=200, NCG=100)

COMMON/LGRND/LG(NLG)/IGRND/IG(NIG)/RGRND/RG(NRG)/CGRND/CG(NC
G)

LOGICAL LG

CHARACTER*4 CG

C 2 User dimensions own arrays here, for example:

C DIMENSION GUH(10,10),GUC(10,10),GUX(10,10),GUZ(10)

c DIMENSION UUGV1(20,30),UUGPOT(20,30)

c DATA NXDIM,NYDIM/30,20/

DIMENSION UUGV1(20,40),UUGPOT(20,40)

DATA NXDIM,NYDIM/40,20/

C 3 User places his data statements here, for example:

C DATA NXDIM,NYDIM/10,10/

C

C 4 Insert own coding below as desired, guided by GREX examples.

C Note that the satellite-to-GREX special data in the labelled

```

C  COMMONs /RSG/, /ISG/, /LSG/ and /CSG/ can be included and
C  used below but the user must check GREX for any conflicting
C  uses. The same comment applies to the EARTH-spare working
C  arrays EASP1, EASP2,...EASP20. In addition to the EASPs,
C  there are 10 GRound-earth SPare arrays, GRSP1,...,GRSP10,
C  supplied solely for the user, which are not used by GREX. If
C  the call to GREX has been deactivated then all of the arrays
C  may be used without reservation.
C*****
C**
C
C  IXL=IABS(IXL)
C  IF(IGR.EQ.13) GO TO 13
C  IF(IGR.EQ.19) GO TO 19
C  GO TO (1,2,3,4,5,6,25,8,9,10,11,12,13,14,25,25,25,25,19,20,25,
C  121,23,24),IGR
C  25 CONTINUE
C  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 1. Run title and other preliminaries
C
C  1 GO TO (1001,1002,1003),ISC
C
C  1001 CONTINUE
C
C  * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via MAKE, GXMAKE etc which it is
C  essential to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C  User may here change message transmitted to the VDU screen
C  IF(.NOT.NULLPR.AND.IDVCGR.EQ.0)
C  1 CALL WRYT40('GROUND file is GROUND.F of: 240802 ')
C
C  RETURN
C  * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via GXMAKE which it is not
C  necessary to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C
C  1003 CONTINUE
C  GO TO 25
C  1002 CONTINUE
C  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 2. Transience; time-step specification
C
C  2 CONTINUE
C  RETURN
C*****

```



```

C
C--- GROUP 3. X-direction grid specification
C
  3 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 4. Y-direction grid specification
C
  4 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 5. Z-direction grid specification
C
  5 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion
C
  6 CONTINUE
  RETURN
C*****
C * Make changes for this group only in group 19.
C--- GROUP 7. Variables stored, solved & named
C*****
C
C--- GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices
C
  8 GO TO (81,82,83,84,85,86,87,88,89,810,811,812,813,814,815,816)
  1,ISC
  81 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For U1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  82 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For U2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  83 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For V1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  84 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For V2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
  85 CONTINUE

```

```

C * ----- SECTION 5 -----
C For W1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
86 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For W2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
  RETURN
87 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Volumetric source for gala
  RETURN
88 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Convection fluxes
C--- Entered when UCONV =.TRUE.; block-location indices are:
C LD11 for east and north (accessible at the same time),
C LD12 for west and south (accessible at the same time),
C LD2 for high (which becomes low for the next slab).
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as appropriate.
  RETURN
89 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Diffusion coefficients
C--- Entered when UDIFF =.TRUE.; block-location indices are LAE
C for east, LAW for west, LAN for north, LAS for
C south, LD11 for high, and LD11 for low.
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as above.
C EARTH will apply the DIFCUT and GP12 modifications after the user
C has made his settings.
C
  RETURN
810 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 --- Convection neighbours
  RETURN
811 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 --- Diffusion neighbours
  RETURN
812 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 --- Linearised sources
  RETURN
813 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 --- Correction coefficients
  RETURN
814 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 --- User's own solver
  RETURN
815 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 --- Change solution
  RETURN
816 CONTINUE
C * ----- SECTION 16 --- Change DVEL/DPs
  RETURN

```

```

C
C * See the equivalent section in GREX for the indices to be
C   used in sections 7 - 16
C
C * Make all other group-8 changes in GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 9. Properties of the medium (or media)
C
C The sections in this group are arranged sequentially in their
C order of calling from EARTH. Thus, as can be seen from below,
C the temperature sections (10 and 11) precede the density
C sections (1 and 3); so, density formulae can refer to
C temperature stores already set.
C   9 GO TO (91,92,93,94,95,96,97,98,99,900,901,902,903,904,905),ISC
C*****
C 900 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 -----
C For TMP1.LE.GRND----- phase-1 temperature Index TEMP1
C   RETURN
C 901 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 -----
C For TMP2.LE.GRND----- phase-2 temperature Index TEMP2
C   RETURN
C 902 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 -----
C For EL1.LE.GRND----- phase-1 length scale Index LEN1
C   RETURN
C 903 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 -----
C For EL2.LE.GRND----- phase-2 length scale Index LEN2
C   RETURN
C 904 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 -----
C For SOLVE(TEM1)----- phase-1 specific heat
C   RETURN
C 905 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 -----
C For SOLVE(TEM2)----- phase-2 specific heat
C   RETURN
C 91 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1      Index DEN1
C   RETURN
C 92 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For DRH1DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 1
C                        Index D1DP
C   RETURN

```

```

93 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For RHO2.LE.GRND--- density for phase 2      Index DEN2
  RETURN
94 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For DRH2DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 2
C                               Index D2DP
  RETURN
95 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C For ENUT.LE.GRND--- reference turbulent kinematic viscosity
C                               Index VIST
  RETURN
96 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For ENUL.LE.GRND--- reference laminar kinematic viscosity
C                               Index VISL
  RETURN
97 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 -----
C For PRNDTL( ).LE.GRND--- laminar PRANDTL nos., or diffusivity
C                               Index LAMPR
  RETURN
98 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 -----
C For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of first phase
C                               Index FII1
  RETURN
99 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 -----
C For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of second phase
C                               Index FII2
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
C
  10 GO TO (101,102,103,104,105),ISC
  101 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For CFIPS.LE.GRND--- inter-phase friction coeff.
C                               Index INTFRC
  RETURN
c<a name="10.2"></a>
  102 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For CMDOT.EQ.GRND- inter-phase mass transfer Index INTMDT
  RETURN

```

```

103 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C   For CINT( ).EQ.GRND--- phase1-to-interface transfer coefficients
C                               Index COI1
      RETURN
104 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C   For CINT( ).EQ.GRND--- phase2-to-interface transfer coefficients
C                               Index COI2
      RETURN
105 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C   For CVM.EQ.GRND--- virtual mass coefficient
C                               Index LD12
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
C                               Index VAL
11 CONTINUE
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 12. Convection and diffusion adjustments
C
12 CONTINUE
      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 13. Boundary conditions and special sources
C                               Index for Coefficient - CO
C                               Index for Value      - VAL
13 CONTINUE
      GO TO (130,131,132,133,134,135,136,137,138,139,1310,
            11311,1312,1313,1314,1315,1316,1317,1318,1319,1320,1321),ISC
130 CONTINUE
C----- SECTION 1 ----- coefficient = GRND
C.....Seting For Consumption of ORGANIC
C   RG(1)=kO2
C   RG(2)=KO2
C   RG(4)=kNO3
C   RG(5)=KNO3
C   RG(6)=KiO2
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3

```

```

C   RG(12)=kFe
C   RG(13)=KFe(OH)3
C   RG(14)=KiMnO2
C   RG(16)=kSO4
C   RG(17)=KSO4
C   RG(18)=KiFe(OH)3
C   RG(20)=kCH4
C   RG(21)=KCH4
C   RG(22)=KiSO4
      IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'ORGAN'))THEN
        L0CO = L0F(CO)
L0C1=L0F(C1)
        L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
L0C15=L0F(C15)
L0C17=L0F(C17)
        DO 13001 IY = IYF,IYL
        DO 13001 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY
GQC1R1=RG(1)

GQC1R2=F(L0C3+ICELL)/(RG(2)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R3=GQC1R1*GQC1R2
        GQC1R4=RG(4)

GQC1R5=F(L0C5+ICELL)/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R6=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R7=GQC1R4*GQC1R5*GQC1R6
        GQC1R8=RG(8)

GQC1R9=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R10=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R11=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R12=GQC1R8*GQC1R9*GQC1R10*GQC1R11
        GQC1R13=RG(12)

GQC1R14=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC1R15=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R16=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

```

C

GQC1R17=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R18=GQC1R13*GQC1R14*GQC1R15*GQC1R16*GQC1R17
GQC1R19=RG(16)

GQC1R20=F(L0C15+ICELL)/(RG(17)+F(L0C15+ICELL))

GQC1R21=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R22=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R23=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R24=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))

GQC1R25=GQC1R19*GQC1R20*GQC1R21*GQC1R22*GQC1R23*GQC1R24
GQC1R26=RG(20)

C

GQC1R27=F(L0C13+ICELL)/RG(21)+F(L0C13+ICELL)

GQC1R28=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R29=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R30=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R31=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))
GQC1R32=RG(22)/(RG(22)+F(L0C15+ICELL))

GQC1R33=GQC1R26*GQC1R28*GQC1R29*GQC1R30*GQC1R31*GQC1R32

F(L0CO+ICELL)=GQC1R3+GQC1R7+GQC1R12+GQC1R18+GQC1R25+GQC1R33

13001 CONTINUE

ENDIF

RETURN

131 CONTINUE

C----- SECTION 2 ----- coefficient = GRND1

C.....Seting For Consumption of Oxygen

C RG(1)=kO2

C RG(2)=KO2

C RG(3)=YO2

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGEN'))THEN

L0CO = L0F(CO)

L0C1=L0F(C1)

L0C3 = L0F(C3)

```

DO 13101 IY = IYF,IYL
DO 13101 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC3R1=RG(1)*F(L0C1+ICELL)

GQC3R2=1.0/(RG(2)+F(L0C3+ICELL))

GQC3R3=GQC3R1*GQC3R2

F(L0CO+ICELL)=GQC3R3*RG(3)
13101 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Nitrat
C   RG(4)=kNO3
C   RG(5)=KNO3
C   RG(6)=KiO2
C   RG(7)=YNO3
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'NITRAT'))THEN
          L0CO = L0F(CO)
L0C1=L0F(C1)
  L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
  DO 13102 IY = IYF,IYL
  DO 13102 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC5R1=RG(4)*F(L0C1+ICELL)

GQC5R2=1.0/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

GQC5R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC5R4=GQC5R1*GQC5R2*GQC5R3

F(L0CO+ICELL)=RG(7)*GQC5R4
13102 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Manganese
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(24)=YMnO2
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'PYROLU'))THEN
          L0CO = L0F(CO)
L0C1=L0F(C1)
L0C3=L0F(C3)
  L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
DO 13103 IY = IYF,IYL
  DO 13103 IX = IXF,IXL

```



```

        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC7R1=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC7R2=1.0/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC7R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC7R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC7R5=GQC7R1*GQC7R2*GQC7R3*GQC7R4

F(L0CO+ICELL)=RG(24)*GQC7R5
13103 CONTINUE
C.....Seting For Production of Manganese
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(11)=YMn+2
        ELSEIF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'MANGA'))THEN
        L0CO = L0F(CO)
L0C1=L0F(C1)
        L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C9=L0F(C9)
        DO 13104 IY = IYF,IYL
        DO 13104 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9R1=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC9R2=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC9R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC9R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC9R5=GQC9R1*GQC9R2*GQC9R3*GQC9R4

F(L0CO+ICELL)=RG(11)*GQC9R5
13104 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Iron
C   RG(12)=kFe
C   RG(13)=KFe(OH)3
C   RG(14)=KiMnO2
C   RG(25)=YFe(OH)3
        ELSEIF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'HYDROX'))THEN
        L0CO = L0F(CO)

```

C

```

L0C1=L0F(C1)
  L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C9=L0F(C9)
L0C11=L0F(C11)
L0C17=L0F(C17)
DO 13105 IY = IYF,IYL
  DO 13105 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC11R1=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC11R2=1.0/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC11R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC11R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC11R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC11R6=GQC11R1*GQC11R2*GQC11R3*GQC11R4*GQC11R5

F(L0CO+ICELL)=RG(25)*GQC11R6
13105 CONTINUE
C.....Seting For Production of Iron
C  RG(12)=kFe
C  RG(13)=KFe(OH)3
C  RG(14)=KiMnO2
C  RG(15)=YFe+2
  ELSEIF((INDVAR.EQ.C13).AND.(NPATCH.EQ.'IRON'))THEN
    L0CO = L0F(CO)
L0C1=L0F(C1)
  L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C9=L0F(C9)
L0C11=L0F(C11)
L0C17=L0F(C17)
  DO 13106 IY = IYF,IYL
  DO 13106 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC13R1=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC13R2=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC13R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

```

C

C

C

C

GQC13R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC13R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC13R6=GQC13R1*GQC13R2*GQC13R3*GQC13R4*GQC13R5

F(L0CO+ICELL)=RG(15)*GQC13R6

13106 CONTINUE

C.....Seting For Consumption of Sulfate

C RG(16)=kSO4

C RG(17)=KSO4-2

C RG(18)=KiFe(OH)3

C RG(19)=YSO4

ELSEIF((INDVAR.EQ.C15).AND.(NPATCH.EQ.'SULFA'))THEN

L0CO = L0F(CO)

L0C1=L0F(C1)

L0C3=L0F(C3)

L0C5=L0F(C5)

L0C7=L0F(C7)

L0C11=L0F(C11)

L0C15=L0F(C15)

DO 13107 IY = IYF,IYL

DO 13107 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC15R1=RG(16)*F(L0C1+ICELL)

GQC15R2=1.0/(RG(17)+F(L0C15+ICELL))

GQC15R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC15R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC15R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC15R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))

GQC15R7=GQC15R1*GQC15R2*GQC15R3*GQC15R4*GQC15R5*GQC15R6

F(L0CO+ICELL)=RG(19)*GQC15R7

13107 CONTINUE

C.....Seting For Consumption of Methan

C RG(20)=kCH4

C RG(21)=KiSO4

C RG(23)=YCH4

ELSEIF((INDVAR.EQ.C17).AND.(NPATCH.EQ.'METHAN'))THEN

L0CO = L0F(CO)

L0C1=L0F(C1)

```

      L0C3=L0F(C3)
      L0C5=L0F(C5)
      L0C7=L0F(C7)
      L0C11=L0F(C11)
      L0C15=L0F(C15)
      DO 13108 IY = IYF,IYL
      DO 13108 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY

      GQC17R1=RG(20)*F(L0C1+ICELL)
C
      GQC17R2=F(L0C13+ICELL)/RG(21)+F(L0C13+ICELL)

      GQC17R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

      GQC17R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

      GQC17R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

      GQC17R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))
      GQC17R7=RG(22)/(RG(22)+F(L0C15+ICELL))

      GQC17R8=GQC17R1*GQC17R3*GQC17R4*GQC17R5*GQC17R6*GQC17R7

      F(L0CO+ICELL)=RG(23)*GQC17R8
      13108 CONTINUE
      ENDIF
      RETURN
      132 CONTINUE
C----- SECTION 3 ----- coefficient = GRND2
      IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'NITRAT'))THEN
          LFCO = L0F(CO)

      L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
      L0C5=L0F(C5)
      DO 13201 IY = IYF,IYL
      DO 13201 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY

      GQC5R1=RG(4)*F(L0C1+ICELL)

      GQC5R2=1.0/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

      GQC5R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

      GQC5R4=GQC5R1*GQC5R2*GQC5R3

      F(LFCO+ICELL)=RG(7)*GQC5R4

```

```

13201 CONTINUE
      ENDIF
      RETURN
133 CONTINUE
C----- SECTION 4 ----- coefficient = GRND3
C.....Seting For Consumption of Oxygen
C   RG(100)=U
C   RG(101)=F
C   RG(102)=YO2

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGEN'))THEN
  LFCO = L0F(CO)
DO 13301 IY = IYF,IYL
  DO 13301 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC3K1=(RG(100)*RG(101))/RG(102)

GQC3K2=VARYX(C1)/(RG(103)+VARYX(C1)+(VARYX(C1)**2/RG(104)))

GQC3K3=1.0/(RG(105)+VARYX(C3))

GQC3K4=VARYX(C21)+((RG(106)*VARYX(C23))/RG(107))

GQC3K5=GQC3K1*GQC3K2*GQC3K3*GQC3K4

GQC3K6=R(108)*VARYX(C1)

F(LFCO+ICELL)=GQC3K6-GQC3K5
13301 CONTINUE
      END IF
C.....Seting For Consumption of Nitrat
C   RG(109)=kNO3
C   RG(110)=KNO3
C   RG(111)=KiO2
C   RG(112)=YNO3
      IF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'NITRAT'))THEN
        LFCO = L0F(CO)
DO 13302 IY = IYF,IYL
  DO 13302 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC5K1=(RG(100)*RG(109))/RG(112)

GQC5K2=1.0/(RG(110)+VARYX(C5))

GQC5K3=RG(111)/(RG(111)+VARYX(C3))

GQC5K4=VARYX(C1)/(RG(103)+VARYX(C1)+(VARYX(C1)**2/RG(104)))

```

GQC5K5=VARYX(C21)+((RG(106)*VARYX(C23))/RG(107))

GQC5K6=GQC5K1*GQC5K2*GQC5K3*GQC5K4*GQC5K5

GQC5K7=R(108)*VARYX(C1)

F(LFCO+ICELL)=GQC5K7-GQC5K6

13302 CONTINUE

END IF

C.....Seting For MOBILE MICROB

C RG(109)=kNO3

C RG(110)=KNO3

C RG(111)=KiO2

C RG(112)=YNO3

IF((INDVAR.EQ.C21).AND.(NPATCH.EQ.'MICROB'))THEN
LFCO = L0F(CO)

DO 13303 IY = IYF,IYL

DO 13303 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC21K1=((RG(106)*RG(113))/RG(107))*VARYX(C23)

C

GQC21K2=1.0/(RG(110)+VARYX(C5))

GQC21K3=VARYX(C3)/(RG(105)+VARYX(C3))

GQC21K4=VARYX(C1)/(RG(103)+VARYX(C1)+(VARYX(C1)**2/RG(104)))

GQC21K5=VARYX(C21)*RG(100)

GQC21K6=GQC21K3*GQC21K4*GQC21K5

F(LFCO+ICELL)=GQC21K6+GQC21K1

13303 CONTINUE

END IF

C.....Seting For IMMOBILE MICROB

C RG(109)=kNO3

C RG(110)=KNO3

C RG(111)=KiO2

C RG(112)=YNO3

IF((INDVAR.EQ.C23).AND.(NPATCH.EQ.'IMMICR'))THEN
LFCO = L0F(CO)

DO 13304 IY = IYF,IYL

DO 13304 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC23K1=((RG(107)*RG(114))/RG(106))*VARYX(C21)

C

GQC23K2=1.0/(RG(110)+VARYX(C5))

GQC23K3=VARYX(C3)/(RG(105)+VARYX(C3))

GQC23K4=VARYX(C1)/(RG(103)+VARYX(C1)+(VARYX(C1)**2/RG(104)))

GQC23K5=VARYX(C23)*RG(100)

GQC23K6=GQC23K3*GQC23K4*GQC23K5

F(LFCO+ICELL)=GQC23K6+GQC23K1

13304 CONTINUE

END IF

RETURN

134 CONTINUE

C----- SECTION 5 ----- coefficient = GRND4

C.....Seting For Consumption of ORGANIC

IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'ORGAN'))THEN

LFCO = L0F(CO)

DO 13401 IY = IYF,IYL

DO 13401 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC1K1=RG(100)/RG(102)

GQC1K2=1.0/(RG(103)+VARYX(C1)+(VARYX(C1)**2/RG(104)))

GQC1K3=VARYX(C3)/(RG(105)+VARYX(C3))

GQC1K4=VARYX(C21)+((RG(106)*VARYX(C23))/RG(107))

GQC1K5=GQC1K1*GQC1K2*GQC1K3*GQC1K4

F(LFCO+ICELL)=GQC1K5

13401 CONTINUE

ENDIF

RETURN

135 CONTINUE

C----- SECTION 6 ----- coefficient = GRND5

IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'RETARD'))THEN

LFCO = L0F(CO)

DO 13501 IY = IYF,IYL

DO 13501 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

F(LFCO+ICELL)=(RG(115)-1)/DT

13501 CONTINUE

END IF

```

    RETURN
136 CONTINUE
C----- SECTION 7 ----- coefficient = GRND6
    RETURN
137 CONTINUE
C----- SECTION 8 ----- coefficient = GRND7
    RETURN
138 CONTINUE
C----- SECTION 9 ----- coefficient = GRND8
    RETURN
139 CONTINUE
C----- SECTION 10 ----- coefficient = GRND9
    RETURN
1310 CONTINUE
C----- SECTION 11 ----- coefficient = GRND10
    RETURN
1311 CONTINUE
C----- SECTION 12 ----- value = GRND
C.....Seting For Consumption of ORGANIC
C   RG(1)=kO2
C   RG(2)=KO2
C   RG(4)=kNO3
C   RG(5)=KNO3
C   RG(6)=KiO2
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(12)=kFe
C   RG(13)=KFe(OH)3
C   RG(14)=KiMnO2
C   RG(16)=kSO4
C   RG(17)=KSO4
C   RG(18)=KiFe(OH)3
C   RG(20)=kCH4
C   RG(21)=KCH4
C   RG(22)=KiSO4
    IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'ORGAN'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
        L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
L0C15=L0F(C15)
L0C17=L0F(C17)
        DO 13111 IY = IYF,IYL

```

C

DO 13111 IX = IXF,IXL
ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC1R1=RG(1)*F(L0C1+ICELL)

GQC1R2=F(L0C3+ICELL)/(RG(2)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R3=GQC1R1*GQC1R2*(-1.0)
GQC1R4=RG(4)*F(L0C1+ICELL)

GQC1R5=F(L0C5+ICELL)/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R6=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R7=GQC1R4*GQC1R5*GQC1R6*(-1.0)
GQC1R8=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC1R9=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R10=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R11=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R12=GQC1R8*GQC1R9*GQC1R10*GQC1R11*(-1.0)
GQC1R13=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC1R14=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC1R15=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R16=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R17=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R18=GQC1R13*GQC1R14*GQC1R15*GQC1R16*GQC1R17*(-1.0)
GQC1R19=RG(16)*F(L0C1+ICELL)

GQC1R20=F(L0C15+ICELL)/(RG(17)+F(L0C15+ICELL))

GQC1R21=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC1R22=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC1R23=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC1R24=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))

GQC1R25=GQC1R19*GQC1R20*GQC1R21*GQC1R22*GQC1R23*GQC1R24*(-1.0)

```

      GQC1R26=RG(20)*F(L0C1+ICELL)
C
      GQC1R27=F(L0C13+ICELL)/RG(21)+F(L0C13+ICELL)

      GQC1R28=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

      GQC1R29=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

      GQC1R30=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

      GQC1R31=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))
      GQC1R32=RG(22)/(RG(22)+F(L0C15+ICELL))

      GQC1R33=GQC1R26*GQC1R28*GQC1R29*GQC1R30*GQC1R31*GQC1R32*(-
1.0)

      F(L0VAL+ICELL)=GQC1R3+GQC1R7+GQC1R12+GQC1R18+GQC1R25+GQC1R3
3
13111 CONTINUE
ENDIF
      RETURN
1312 CONTINUE
C----- SECTION 13 ----- value = GRND1
C.....Seting For Consumption of Oxygen
C   RG(1)=kO2
C   RG(2)=KO2
C   RG(3)=YO2

IF((INDVAR.EQ.C3).AND.(NPATCH.EQ.'OXYGEN'))THEN
      L0VAL = L0F(VAL)
      L0C1=L0F(C1)
      L0C3 = L0F(C3)
      DO 13121 IY = IYF,IYL
      DO 13121 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY

      GQC3R1=RG(1)*F(L0C1+ICELL)

      GQC3R2=F(L0C3+ICELL)/(RG(2)+F(L0C3+ICELL))

      GQC3R3=GQC3R1*GQC3R2*(-1.0)

      F(L0VAL+ICELL)=GQC3R3*RG(3)
13121 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Nitrat
C   RG(4)=kNO3
C   RG(5)=KNO3
C   RG(6)=KiO2

```

```

C   RG(7)=YNO3
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C5).AND.(NPATCH.EQ.'NITRAT'))THEN
          L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
      DO 13122 IY = IYF,IYL
      DO 13122 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC5R1=RG(4)*F(L0C1+ICELL)

GQC5R2=F(L0C5+ICELL)/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

GQC5R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC5R4=GQC5R1*GQC5R2*GQC5R3*(-1.0)

F(L0VAL+ICELL)=RG(7)*GQC5R4
13122 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Manganese
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(24)=YMnO2
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C7).AND.(NPATCH.EQ.'PYROLU'))THEN
          L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
      L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
      DO 13123 IY = IYF,IYL
      DO 13123 IX = IXF,IXL
      ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC7R1=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC7R2=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC7R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC7R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC7R5=GQC7R1*GQC7R2*GQC7R3*GQC7R4
F(L0VAL+ICELL)=(-
1.0)*RG(24)*GQC7R5
13123 CONTINUE
C.....Seting For Production of Manganese
C   RG(8)=kMn

```

```

C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
C   RG(11)=YMn+2
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C9).AND.(NPATCH.EQ.'MANGA'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C9=L0F(C9)
      DO 13124 IY = IYF,IYL
      DO 13124 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC9R1=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC9R2=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC9R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC9R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC9R5=GQC9R1*GQC9R2*GQC9R3*GQC9R4

F(L0VAL+ICELL)=RG(11)*GQC9R5
13124 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Iron
C   RG(12)=kFe
C   RG(13)=KFe(OH)3
C   RG(14)=KiMnO2
C   RG(25)=YFe(OH)3
      ELSEIF((INDVAR.EQ.C11).AND.(NPATCH.EQ.'HYDROX'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C9=L0F(C9)
L0C11=L0F(C11)
L0C17=L0F(C17)
      DO 13125 IY = IYF,IYL
      DO 13125 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC11R1=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC11R2=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC11R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

```

C

C

C

GQC11R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC11R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC11R6=GQC11R1*GQC11R2*GQC11R3*GQC11R4*GQC11R5
F(L0VAL+ICELL)=(-
1.0)*RG(25)*GQC11R6
13125 CONTINUE

C.....Seting For Production of Iron

C RG(12)=kFe

C RG(13)=KFe(OH)3

C RG(14)=KiMnO2

C RG(15)=YFe+2

ELSEIF((INDVAR.EQ.C13).AND.(NPATCH.EQ.'IRON'))THEN

L0VAL = L0F(VAL)

L0C1=L0F(C1)

L0C3=L0F(C3)

L0C5=L0F(C5)

L0C7=L0F(C7)

L0C9=L0F(C9)

C

L0C11=L0F(C11)

L0C17=L0F(C17)

C

DO 13126 IY = IYF,IYL

DO 13126 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC13R1=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC13R2=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC13R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC13R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC13R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC13R6=GQC13R1*GQC13R2*GQC13R3*GQC13R4*GQC13R5

F(L0VAL+ICELL)=RG(15)*GQC13R6

13126 CONTINUE

C.....Seting For Consumption of Sulfate

C RG(16)=kSO4

C RG(17)=KSO4-2

C RG(18)=KiFe(OH)3

C RG(19)=YSO4

ELSEIF((INDVAR.EQ.C15).AND.(NPATCH.EQ.'SULFA'))THEN

L0VAL = L0F(VAL)

L0C1=L0F(C1)

```

L0C3=L0F(C3)
  L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
L0C15=L0F(C15)
DO 13127 IY = IYF,IYL
  DO 13127 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC15R1=RG(16)*F(L0C1+ICELL)

GQC15R2=F(L0C15+ICELL)/(RG(17)+F(L0C15+ICELL))

GQC15R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC15R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC15R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC15R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))

GQC15R7=GQC15R1*GQC15R2*GQC15R3*GQC15R4*GQC15R5*GQC15R6
F(L0VAL+ICELL)=(-
1.0)*RG(19)*GQC15R7
13127 CONTINUE
C.....Seting For Consumption of Methan
C  RG(20)=kCH4
C  RG(21)=KiSO4
C  RG(23)=YCH4
  ELSEIF((INDVAR.EQ.C17).AND.(NPATCH.EQ.'METHAN'))THEN
    L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
  L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
L0C15=L0F(C15)
  DO 13128 IY = IYF,IYL
  DO 13128 IX = IXF,IXL
  ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC17R1=RG(20)*F(L0C1+ICELL)
C

GQC17R2=F(L0C13+ICELL)/RG(21)+F(L0C13+ICELL)

GQC17R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC17R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

```

```

GQC17R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC17R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))
  GQC17R7=RG(22)/(RG(22)+F(L0C15+ICELL))

GQC17R8=GQC17R1*GQC17R3*GQC17R4*GQC17R5*GQC17R6*GQC17R7

F(L0VAL+ICELL)=RG(23)*GQC17R8
13128 CONTINUE
  ENDIF
  RETURN
1313 CONTINUE
C----- SECTION 14 ----- value = GRND2
C.....Seting For Aerobic Respiration
C  RG(1)=kO2
C  RG(2)=KO2
  IF((INDVAR.EQ.C19).AND.(NPATCH.EQ.'AEROBI'))THEN
    L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
    L0C3 = L0F(C3)
    DO 13131 IY = IYF,IYL
    DO 13131 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC19R1=RG(1)*F(L0C1+ICELL)

GQC19R2=F(L0C3+ICELL)/(RG(2)+F(L0C3+ICELL))

GQC19R3=GQC19R1*GQC19R2*(-1.0)

F(L0VAL+ICELL)=GQC19R3
13131 CONTINUE
  ENDIF
C.....Seting For Denitrification
C  RG(4)=kNO3
C  RG(5)=KNO3
C  RG(6)=KiO2
  IF((INDVAR.EQ.C21).AND.(NPATCH.EQ.'DENITR'))THEN
    L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
    L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
    DO 13132 IY = IYF,IYL
    DO 13132 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC21R1=RG(4)*F(L0C1+ICELL)

```

```

GQC21R2=F(L0C5+ICELL)/(RG(5)+F(L0C5+ICELL))

GQC21R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC21R4=GQC21R1*GQC21R2*GQC21R3

F(L0VAL+ICELL)=GQC21R4
13132 CONTINUE
ENDIF
C.....Seting For Manganese Reduction
C   RG(8)=kMn
C   RG(9)=KMnO2
C   RG(10)=KiNO3
      IF((INDVAR.EQ.C23).AND.(NPATCH.EQ.'REDMN'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
      DO 13133 IY = IYF,IYL
      DO 13133 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC23R1=RG(8)*F(L0C1+ICELL)

GQC23R2=F(L0C7+ICELL)/(RG(9)+F(L0C7+ICELL))

GQC23R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC23R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC23R5=GQC23R1*GQC23R2*GQC23R3*GQC23R4

F(L0VAL+ICELL)=GQC23R5
13133 CONTINUE
ENDIF
C.....Seting For Iron Reduction
C   RG(12)=kFe
C   RG(13)=KFe(OH)3
C   RG(14)=KiMnO2
      IF((INDVAR.EQ.C25).AND.(NPATCH.EQ.'REDFE'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
      L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
      DO 13134 IY = IYF,IYL

```


DO 13134 IX = IXF,IXL
 ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC25R1=RG(12)*F(L0C1+ICELL)

GQC25R2=F(L0C11+ICELL)/(RG(13)+F(L0C11+ICELL))

GQC25R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC25R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC25R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC25R6=GQC25R1*GQC25R2*GQC25R3*GQC25R4*GQC25R5

F(L0VAL+ICELL)=GQC25R6

13134 CONTINUE

ENDIF

C.....Seting For Sulfate Reduction

C RG(16)=kSO4

C RG(17)=KSO4-2

C RG(18)=KiFe(OH)3

IF((INDVAR.EQ.C27).AND.(NPATCH.EQ.'REDSUL'))THEN

L0VAL = L0F(VAL)

L0C1=L0F(C1)

L0C3=L0F(C3)

L0C5=L0F(C5)

L0C7=L0F(C7)

L0C11=L0F(C11)

L0C15=L0F(C15)

DO 13135 IY = IYF,IYL

DO 13135 IX = IXF,IXL

ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC27R1=RG(16)*F(L0C1+ICELL)

GQC27R2=F(L0C15+ICELL)/(RG(17)+F(L0C15+ICELL))

GQC27R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC27R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC27R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC27R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))

GQC27R7=GQC27R1*GQC27R2*GQC27R3*GQC27R4*GQC27R5*GQC27R6

F(L0VAL+ICELL)=GQC27R7

```

13135 CONTINUE
    ENDIF
C.....Seting For Methanogenesis
C   RG(20)=kCH4
C   RG(21)=KCH4
C   RG(22)=KiSO4
    IF((INDVAR.EQ.C29).AND.(NPATCH.EQ.'METHANO'))THEN
        L0VAL = L0F(VAL)
L0C1=L0F(C1)
        L0C3=L0F(C3)
L0C5=L0F(C5)
L0C7=L0F(C7)
L0C11=L0F(C11)
L0C15=L0F(C15)
        DO 13136 IY = IYF,IYL
        DO 13136 IX = IXF,IXL
        ICELL = IY + (IX-1)*NY

GQC29R1=RG(20)*F(L0C1+ICELL)
C

GQC29R2=F(L0C13+ICELL)/RG(21)+F(L0C13+ICELL)

GQC29R3=RG(6)/(RG(6)+F(L0C3+ICELL))

GQC29R4=RG(10)/(RG(10)+F(L0C5+ICELL))

GQC29R5=RG(14)/(RG(14)+F(L0C7+ICELL))

GQC29R6=RG(18)/(RG(18)+F(L0C11+ICELL))
    GQC29R7=RG(22)/(RG(22)+F(L0C15+ICELL))

GQC29R8=GQC29R1*GQC29R3*GQC29R4*GQC29R5*GQC29R6*GQC29R7

F(L0VAL+ICELL)=GQC29R8
13136 CONTINUE
    ENDIF
    RETURN
1314 CONTINUE
C----- SECTION 15 ----- value = GRND3

    RETURN
1315 CONTINUE
C----- SECTION 16 ----- value = GRND4

    RETURN
1316 CONTINUE
C----- SECTION 17 ----- value = GRND5
    IF((INDVAR.EQ.C1).AND.(NPATCH.EQ.'RETARD'))THEN

```

```

    LFVAL = L0F(VAL)
DO 13161 IY = IYF,IYL
    DO 13161 IX = IXF,IXL
    ICELL = IY + (IX-1)*NY
    F(LFVAL+ICELL)=VARYX(OLD(C1))
CONTINUE                                     13161
    END IF
    RETURN
1317 CONTINUE
C----- SECTION 18 ----- value = GRND6

    RETURN
1318 CONTINUE
C----- SECTION 19 ----- value = GRND7

    RETURN
1319 CONTINUE
C----- SECTION 20 ----- value = GRND8
    RETURN
1320 CONTINUE
C----- SECTION 21 ----- value = GRND9
    RETURN
1321 CONTINUE
C----- SECTION 22 ----- value = GRND10
    RETURN
C*****
C
C--- GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.
C
14 CONTINUE
    RETURN
C*****
C* Make changes to data for GROUPS 15, 16, 17, 18 GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH
C
19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),ISC
191 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 ---- Start of time step.

    RETURN
192 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 ---- Start of sweep.
    RETURN
193 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 ---- Start of iz slab.
    RETURN
194 CONTINUE

```

```

C * ----- SECTION 4 ---- Start of iterations over slab.
  RETURN
1911 CONTINUE
C * ----- SECTION 11---- After calculation of convection
C           fluxes for scalars, and of volume
C           fractions, but before calculation of
C           scalars or velocities
  RETURN
199 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Start of solution sequence for
C                           a variable
  RETURN
1910 CONTINUE
C * ----- SECTION 10---- Finish of solution sequence for
C                           a variable
  RETURN
195 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 ---- Finish of iterations over slab.
  RETURN
196 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.
C.....Seting For Aerobic Respiration
C  RG(1)=kO2
C  RG(2)=KO2
  LFRO2=L0F(LBNAME('RO2'))
LFC1=L0F(C1)
LFC3=L0F(C3)
DO 1961 IX=1,NX
IADD=NY*(IX-1)
DO 1961 IY=1,NY
I=IY+IADD
L0RO2=LFRO2+I
L0C1=LFC1+I
  L0C3=LFC3+I

F(L0RO2)=(RG(1)*F(L0C1))*(F(L0C3)/(RG(2)+F(L0C3)))*86400
1961 CONTINUE
C.....Seting For Denitrification
C  RG(4)=kNO3
C  RG(5)=KNO3
C  RG(6)=KiO2
  LFRNO3=L0F(LBNAME('RNO3'))
LFC1=L0F(C1)
LFC3=L0F(C3)
LFC5=L0F(C5)
DO 1962 IX=1,NX
IADD=NY*(IX-1)
DO 1962 IY=1,NY
I=IY+IADD

```

L0RNO3=LFRNO3+I

L0C1=LFC1+I

L0C3=LFC3+I

L0C5=LFC5+I

$$F(L0RNO3) = (RG(4) * F(L0C1)) * (F(L0C5) / (RG(5) + F(L0C5))) * \\ \&(RG(6) / (RG(6) + F(L0C3))) * 86400$$

1962 CONTINUE

C.....Seting For Manganese Reduction

C RG(8)=kMn

C RG(9)=KMnO2

C RG(10)=KiNO3

LFRMN=L0F(LBNAME('RMN'))

LFC1=L0F(C1)

LFC3=L0F(C3)

LFC5=L0F(C5)

LFC7=L0F(C7)

DO 1963 IX=1,NX

IADD=NY*(IX-1)

DO 1963 IY=1,NY

I=IY+IADD

L0RMN=LFRMN+I

L0C1=LFC1+I

L0C3=LFC3+I

L0C5=LFC5+I

L0C7=LFC7+I

$$F(L0RMN) = (RG(8) * F(L0C1)) * \\ \&(F(L0C7) / (RG(9) + F(L0C7))) * \\ \&(RG(6) / (RG(6) + F(L0C3))) * \\ \&(RG(10) / (RG(10) + F(L0C5))) * 86400$$

1963 CONTINUE

C.....Seting For Iron Reduction

C RG(12)=kFe

C RG(13)=KFe(OH)3

C RG(14)=KiMnO2

LFRFE=L0F(LBNAME('RFE'))

LFC1=L0F(C1)

LFC3=L0F(C3)

LFC5=L0F(C5)

LFC7=L0F(C7)

LFC11=L0F(C11)

DO 1964 IX=1,NX

IADD=NY*(IX-1)

DO 1964 IY=1,NY

I=IY+IADD

L0RFE=LFRFE+I

L0C1=LFC1+I

L0C3=LFC3+I

L0C5=LFC5+I
 L0C7=LFC7+I
 L0C11=LFC11+I

F(L0RFE)=(RG(12)*F(L0C1))*
 &(F(L0C11)/(RG(13)+F(L0C11)))*
 &(RG(6)/(RG(6)+F(L0C3)))*
 &(RG(10)/(RG(10)+F(L0C5)))*
 &(RG(14)/(RG(14)+F(L0C7)))*86400

1964 CONTINUE

C.....Seting For Sulfate Reduction

C RG(16)=kSO4

C RG(17)=KSO4-2

C RG(18)=KiFe(OH)3

LFRSO4=L0F(LBNAME('RSO4'))

LFC1=L0F(C1)

LFC3=L0F(C3)

LFC5=L0F(C5)

LFC7=L0F(C7)

LFC11=L0F(C11)

LFC15=L0F(C15)

DO 1965 IX=1,NX

IADD=NY*(IX-1)

DO 1965 IY=1,NY

I=IY+IADD

L0RSO4=LFRSO4+I

L0C1=LFC1+I

L0C3=LFC3+I

L0C5=LFC5+I

L0C7=LFC7+I

L0C11=LFC11+I

L0C15=LFC15+I

F(L0RSO4)=(RG(16)*F(L0C1))*
 &(F(L0C15)/(RG(17)+F(L0C15)))*
 &(RG(6)/(RG(6)+F(L0C3)))*
 &(RG(10)/(RG(10)+F(L0C5)))*
 &(RG(14)/(RG(14)+F(L0C7)))*
 &(RG(18)/(RG(18)+F(L0C11)))*86400

1965 CONTINUE

C.....Seting For Methanogenesis

C RG(20)=kCH4

C RG(21)=KCH4

C RG(22)=KiSO4

LFRCH4=L0F(LBNAME('RCH4'))

LFC1=L0F(C1)

LFC3=L0F(C3)

LFC5=L0F(C5)

LFC7=L0F(C7)

```

LFC11=L0F(C11)
  LFC15=L0F(C15)
DO 1966 IX=1,NX
IADD=NY*(IX-1)
DO 1966 IY=1,NY
I=IY+IADD
L0RCH4=LFRCH4+I
L0C1=LFC1+I
  L0C3=LFC3+I
L0C5=LFC5+I
L0C7=LFC7+I
  L0C11=LFC11+I
  L0C15=LFC15+I

F(L0RCH4)=(RG(20)*F(L0C1))*
&(RG(6)/(RG(6)+F(L0C3)))*
&(RG(10)/(RG(10)+F(L0C5)))*
&(RG(14)/(RG(14)+F(L0C7)))*
&(RG(18)/(RG(18)+F(L0C11)))*
&(RG(22)/(RG(22)+F(L0C15)))*86400
1966 CONTINUE

  RETURN
197 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Finish of sweep.
  RETURN
198 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Finish of time step.
C
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 20. Preliminary print-out
C
  20 CONTINUE
  RETURN
C*****
C--- GROUP 21. Special print-out to screen
  21 CONTINUE
  GO TO 25
C*****
C* Make changes to data for GROUP 22 only in GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 23. Field print-out and plot control
  23 CONTINUE
  RETURN
C*****
C

```

```
C--- GROUP 24. Dumps for restarts
C
  24 CONTINUE
  END
c</pre></strong></body></html>
```