

การสร้างแบบจำลองคอมพิวเตอร์เพื่อทำนายการเคลื่อนที่  
ของสารเคมีที่ไม่ละลายน้ำผ่านตัวกลางที่มีรูพรุน



นายยุทธ มโนกุล

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาสาขาการจัดการสิ่งแวดล้อม (สหสาขาวิชา)

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2546

ISBN 974-17-4848-5

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

**MODELING DENSE NON-AQUEOUS PHASE LIQUID TRANSPORT  
THROUGH SATURATED POROUS MEDIA**

Mr.Ayuth Manonukul

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements  
for the Degree of Master of Science in Environmental Management (Inter-Departmental)

Graduate School

Chulalongkorn University

Academic Year 2003

ISBN 974-17-4848-5

Copyright of Chulalongkorn University



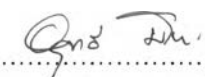

อยุธยา มโนกุล : การสร้างแบบจำลองคอมพิวเตอร์เพื่อทำนายการไหลของสารเคมีที่ไม่ละลายน้ำผ่านตัวกลางที่มีรูพรุน (MODELING DENSE NON-AQUEOUS PHASE LIQUID TRANSPORT THROUGH SATURATED POROUS MEDIA) อ.ที่ปรึกษา ASSOC. PROF. K.K. MURALEE MURALEETHARAN, Ph.D., อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม อ.ดร.เขมรัฐ โอสถาปนีย์ จำนวนหน้า 43 หน้า, ISBN 974-17-4848-5

ในปัจจุบัน ของเหลวจำพวก DNAPLs หรือ Dense Non-Aqueous Phase Liquids ยกตัวอย่างเช่นสารในกลุ่ม chlorinated hydrocarbon เป็นหนึ่งในตัวการหลักที่ทำให้เกิดปัญหา การปนเปื้อนในชั้นดินและน้ำใต้ดิน สารเหล่านี้ยากที่กำจัดออกจากบริเวณพื้นที่ที่ถูกปนเปื้อนเพราะ มีความหนาแน่นที่มากกว่าน้ำและความสามารถในการละลายน้ำต่ำ ความหนาแน่นที่สูงทำให้สาร เหล่านี้เคลื่อนตัวลึกลงไปได้พื้นดินในระยะและทิศทางที่ไม่เท่ากันตามคุณสมบัติของสารแต่ละชนิด และสภาพทางกายภาพของดินในบริเวณนั้น ดังนั้นในการเพิ่มประสิทธิภาพในการบำบัดและกำจัด จึงสำคัญมากที่จะมีเครื่องมือที่แม่นยำสำหรับทำนายการเคลื่อนที่และการกระจายตัวของสาร เหล่านี้

งานวิจัยชิ้นนี้เป็นการพัฒนาแบบจำลองคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการทำนายการเคลื่อนที่ ของสารปนเปื้อนภายใต้พื้นดิน โดยการดัดแปลงรหัสคอมพิวเตอร์ U\_DYSAC2 ที่ถูกพัฒนาขึ้นเพื่อ ใช้ในการทำนายพฤติกรรมของดินที่ไม่อิ่มตัวด้วยน้ำในสภาวะคงที่และไม่คงที่ ส่วนของอากาศและ สมการความสัมพันธ์ของการไหลของสารในน้ำถูกแทนที่โดย DNAPL และสมการใหม่ที่เหมาะสม

จากการทดสอบผลกระทบของคุณสมบัติทางกายภาพต่อการเคลื่อนที่ของสารปนเปื้อน โดยเลือกศึกษาในส่วนของผลกระทบของการเปลี่ยนความหนาแน่นและความหนืดของสารปนเปื้อน และผลกระทบจากการไหลของน้ำใต้ดิน โดยได้ผลสอดคล้องกับความรู้ทางทฤษฎี รหัสคอมพิวเตอร์ ที่ถูกดัดแปลงได้ถูกพิสูจน์โดยสร้างแบบจำลองเปรียบเทียบเชิงคุณภาพกับผลการทดลองใน ห้องทดลองและการทดลองโดยอุปกรณ์เพิ่มแรงเหวี่ยง (Centrifuge model test) โดย กรณีศึกษาได้ ถูกจำลองขึ้น และได้ผลเป็นที่น่ายอมรับเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงทั้ง 2 กรณี การศึกษา การไหลของสารปนเปื้อนที่มีความหนาแน่นต่ำและความหนืดสูงผ่านตัวกลางอิ่มตัวด้วยน้ำที่มีรูพรุน และการศึกษาการไหลของสารปนเปื้อนผ่านตัวกลางที่มีโครงสร้างแตกต่างกัน

สาขาวิชาการจัดการสิ่งแวดล้อม  
ปีการศึกษา 2546

ลายมือชื่อนิสิต .....  .....  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา..... K.K. M.....  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....  .....

# # 4589483820 : MAJOR ENVIRONMENTAL MANAGEMENT

KEY WORD: DNAPL / FINITE ELEMENT/ CONTAMINANT TRANSPORT

AYUTH MANONUKUL : THESIS TITLE : MODELING DENSE NON-AQUEOUS PHASE LIQUID TRANSPORT THROUGH SATURATED POROUS MEDIA.

THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. K.K. MURALEE MURALEETHARAN, Ph.D.,

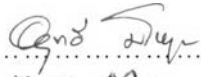
THESIS CO-ADVISOR : KHEMARATH OSATHAPHAN, Ph.D., 43 pp. ISBN 974-17-4848-5.

DNAPLs (dense non-aqueous phase liquids), such as certain chlorinated hydrocarbons, are some of the prevalent substances contaminating the groundwater and subsurface soils. The high density and low solubility of DNAPLs make it difficult to remediate a DNAPL contaminated site. High density makes the DNAPLs migrate downward below water table and low solubility makes the remediation difficult. For effective remediation, it's important to accurately know the extent of a DNAPL at a contaminated site.


This thesis presents computational modeling of DNAPL transport through subsurface. A finite element computer code, U\_DYSAC2, developed for predicting static and dynamic behavior of unsaturated soils is modified to predict the DNAPL transport through subsurface. The air-phase and related constitutive relationships governing multiphase flow in U\_DYSAC2 are replaced with DNAPL and corresponding relationships.

A parametric study is conducted using the modified U\_DYSAC2 to see the influence of DNAPL density and viscosity and the groundwater flow on the subsurface transport of DNAPL and qualitatively reasonable results are obtained. Quantitative validation of U\_DYSAC2 is conducted by comparing the predictions against a centrifuge model test and a laboratory test results. The centrifuge test involved low density high viscosity DNAPL transport and the laboratory test was done on a heterogeneous stratified soil stratum. Reasonable comparisons between the U\_DYSAC2 predictions and the tests results are obtained.

Field of study Environmental Management  
Academic year 2003

Student's signature.....

Advisor's signature.....

Co-advisor's signature.....

## **ACKNOWLEDGEMENT**

First of all, I wish to express my great appreciation to my thesis advisor, Assoc. Prof. Dr. K.K. Muralee Muraleetharan (Department of Civil Engineering and Environmental Science, University of Oklahoma), for his time, valuable guidance, support and patience throughout my graduate study. I would like to thank Dr.Khemarath Osathapun, my thesis co-advisor for his guidance and support.

I also thank Asst.Prof.Dr.Sutha Khaodhiar, Dr.Manaskorn Rachakornkij and Dr.Pichaya Rachadawong, member of this thesis committee for thesis interest and their comments to my thesis.

I would like to thank Changfu Wei for his help and patience to support me on U\_DYSAC2 computer code and also thanks Nadarajah Ravichandran and Tulasi, my labmates, for their kindness and help all the time I stayed in Norman, Oklahoma. Sincere thanks are extended to Ampira, Arunya, Itti, Jittipong and all Thai students in Norman, Oklahoma, for their continuing friendships and supports.

# CONTENTS

	<b>PAGE</b>
<b>ABSTRACT (IN THAI)</b> .....	iv
<b>ABSTRACT (IN ENGLISH)</b> .....	v
<b>ACKNOWLEDGEMENT</b> .....	vi
<b>CONTENTS</b> .....	vii
<b>LIST OF TABLES</b> .....	ix
<b>LIST OF FIGURES</b> .....	x
<b>CHAPTER 1 Introduction</b>	
1.1 Introduction.....	1
1.2 Objectives.....	2
1.3 Hypothesis.....	2
1.4 Scope of study.....	3
<b>CHAPTER 2 Literature Review and Theoretical Background</b>	
2.1 NAPL model development.....	4
2.2 Experimental investigation of DNAPL transport through subsurface.....	6
2.3 Constitutive relation of NAPL-water.....	8
<b>CHAPTER 3 Methodology</b>	
3.1 U_DYSAC2 computer code.....	14
3.2 Modification of U_DYSAC2.....	14
3.3 Validation procedure.....	15

## CONTENTS (Continued)

	<b>PAGE</b>
<b>CHAPTER 4 Results and Discussion</b>	
4.1 Parametric study .....	18
4.1.1 DNAPL movement in static saturated porous media .....	18
4.1.2 Effects of DNAPL density and viscosity on DNAPL movement .....	21
4.1.3 Effect of water flow in saturated porous media .....	25
4.1.4 LNAPL movement in confined saturated porous media .....	28
4.2 Comparison with experimental cases .....	30
4.2.1 Centrifuge study of low density high viscosity DNAPL in saturated porous media .....	30
4.2.2 DNAPL transport in heterogeneous soil structure .....	36
 <b>CHAPTER 5 Conclusions and recommendations for further study</b>	
5.1 Summary .....	41
5.2 Conclusions .....	41
5.3 Recommendation for further studies .....	42
 <b>REFERENCES</b> .....	44
<b>APPENDIX</b> .....	47
<b>BIOGRAPHY</b> .....	49



## LIST OF TABLES

	PAGE
<b>Table 2.1:</b> Parameter of multi phase saturation pressure function of sandy and clayey porous media.....	10
<b>Table 3.1:</b> The values of fluid density and viscosity used in the parametric study.....	16
<b>Table 4.1:</b> Material parameter of static saturated porous media case.....	20
<b>Table 4.2:</b> Fluid properties assigned for studying the effect of fluids density and viscosity.....	21
<b>Table 4.3:</b> Material parameter for studying the effect of water flow in saturated porous media.....	27
<b>Table 4.4:</b> Scaling van Genuchten parameter for BP-water system.....	33
<b>Table 4.5:</b> Hydraulic properties of sand in parallel lab experiment.....	36
<b>Table 4.6:</b> Scaling van Genuchten parameter for PCE-water system.....	38
<b>Table 4.7:</b> Material parameters for simulation DNAPL flow through heterogeneous soil structure.....	39

## LIST OF FIGURES

	PAGE
<b>Figure 1.1:</b> Subsurface distribution of an LNAPL spill .....	1
<b>Figure 2.1:</b> Capillary pressure-wetting fluid saturation curve for a two fluid system .....	8
<b>Figure 2.2:</b> Capillary pressure versus effective water saturation curve .....	11
<b>Figure 2.3:</b> Relative permeability versus effective water saturation curve .....	13
<b>Figure 4.1:</b> Solution domain for DNAPL movement in static saturated porous media .....	19
<b>Figure 4.2:</b> Water saturation contour: DNAPL movement in a static saturated porous media .....	20
<b>Figure 4.3:</b> Water saturation contour: show distribution of DNAPL at time of 50 second, compare various DNAPL density .....	22
<b>Figure 4.4:</b> Water saturation contours: show distribution of DNAPL at time of 50 second, compare with various viscosity .....	23
<b>Figure 4.5:</b> Solution domain for studying the effect of water flow in saturated porous media .....	25
<b>Figure 4.6:</b> Water saturation contours at various times for studying the effect of water flow in saturated porous media .....	26
<b>Figure 4.7:</b> water saturation contours, LNAPL movement in confined saturated porous media .....	28
<b>Figure 4.8:</b> Front view of the test model for centrifuge experiment .....	30
<b>Figure 4.9:</b> Experimental result of low density high viscosity DNAPL flow in saturated porous media (Panntazidou (2000)) .....	31
<b>Figure 4.10:</b> Finite element mesh for centrifuge study .....	32
<b>Figure 4.11:</b> Water saturation contour: show distribution of BP versus times .....	33
<b>Figure 4.12:</b> Water saturation contour compares between numerical simulation result and experimental result .....	34
<b>Figure 4.13:</b> Capillary pressure and water saturation relation curves with different parameter (at $n = 1.84$ ) .....	35

**LIST OF FIGURES (CONTINUED)**

	<b>PAGE</b>
<b>Figure 4.14:</b> Water saturation contour: compare between different capillary saturation curves.....	35
<b>Figure 4.15:</b> Configuration of packed sand in parallel-plate cell.....	36
<b>Figure 4.16:</b> Observed distribution of PCE in parallel-plate cell (Kueper and Frind (1991))......	37
<b>Figure 4.17:</b> Simulation result of DNAPL flow through heterogeneous soil structure.....	40