

Diss. ETH No. 11277

Experimental and Numerical Investigation of Soil Vapor Extraction

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH
for the degree of
DOCTOR OF NATURAL SCIENCES

presented by

ULRICH FISCHER
Dipl. Geoökologe, University of Bayreuth (FRG)
born December 4, 1962
in Cologne (FRG)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Rainer Schulin, examiner
Prof. Dr. Themistocles Dracos, co-examiner
Dr. Fritz Stauffer, co-examiner

1995

SUMMARY

In recent years soil vapor extraction (SVE) has been used extensively to remove volatile organic compounds (VOCs) from the vadose zone. In order to investigate processes limiting the removal of VOCs in the late stage of SVE operations, multicomponent soil venting experiments were performed at different water contents in a sand tank ($80 \times 66 \times 5$ cm) in the absence of a liquid organic phase. Four chlorinated VOCs were used as model compounds. A homogeneous packing of quartz sand was used as model soil. Gas phase concentrations were measured at several locations with different water saturation during each experiment.

The compounds did not adsorb on the sand. Volatilization was the key process for VOC removal. Gas concentrations decreased more slowly at locations with high water saturation and for compounds with small Henry's law constant. Gas concentrations observed in experiments conducted at low water content were found to be a function of dimensionless time. Tailing of gas concentrations was attributed solely to diffusion in interparticle water and suggested that local nonequilibrium conditions prevailed at large dimensionless times.

This hypothesis was examined by comparison of experimental results and numerical simulations obtained with two mathematical models which differ in the description of gas-water mass transfer: the local equilibrium approach and first-order kinetics. All parameters used in the simulations, except for the mass transfer coefficients between the aqueous phase and the gas phase, were determined independently.

The degree of nonequilibrium in the experiments was found to be a function of dimensionless time. For compounds with a large Henry's law constant the equilibrium model matched the gas concentrations measured at early times during experiments conducted at low water saturation but failed to describe the observed tailing. The kinetics model described these experimental data quite well if calibrated mass transfer coefficients were used. It was shown

that the gas-water mass transfer coefficient in the kinetics model cannot be expected to be a constant under the conditions of soil vapor extraction. The results of the numerical simulations confirm the hypothesis that mass transfer from the aqueous phase into the gas phase can be limited by diffusion within the interparticle water.

ZUSAMMENFASSUNG

Bodenluftabsaugung ist ein in den letzten Jahren häufig eingesetztes Verfahren, um leichtflüchtige Verbindungen (VOC) aus der ungesättigten Bodenzone zu entfernen. Um die bei einer Bodenluftabsaugung limitierenden Prozesse zu untersuchen, wurde das Verfahren in einem Sandtank (80 x 66 x 5 cm) nachgestellt. Die Versuche wurden ohne flüssige organische Phase durchgeführt, um das Endstadium einer Bodenluftabsaugung zu simulieren. Es wurden Mehrkomponenten-Versuche bei verschiedenen Wassergehalten durchgeführt, um den Einfluss der physiko-chemischen Parameter der Verbindungen und des Wassergehaltes auf die Entfernung der Schadstoffe zu untersuchen. Vier leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe wurden als Modellsubstanzen eingesetzt. Als Modellboden diente eine homogene Quarzsandpackung. In jedem Versuch wurden die Gaskonzentrationen der VOC an mehreren Meßstellen mit unterschiedlichem Wassergehalt gemessen.

Die untersuchten Verbindungen adsorbierten nicht an dem Quarzsand, so daß die Verflüchtigung aus dem Wasser den für die Entfernung der Verbindungen bestimmenden Prozess darstellte. Meßstellen mit hohem Wassergehalt und Verbindungen mit niedriger Henry-Konstante zeigten geringere Konzentrationsabnahmen als Meßstellen mit niedrigem Wassergehalt und Verbindungen mit hoher Henry-Konstante. Die in Experimenten mit niedrigem Wassergehalt gemessenen Gaskonzentrationen konnten als Funktion einer dimensionslosen Zeit beschrieben werden. Das beobachtete Tailing der Gaskonzentrationen wurde alleine dem limitierenden Effekt der Diffusion in interpartikulärem Wasser zugeschrieben. Das Tailing ließ darauf schließen, daß zu großen dimensionslosen Zeiten ein lokales Ungleichgewicht zwischen der Gas- und der Wasserphase bestand.

Diese Hypothese wurde anhand des Vergleichs gemessener Konzentrationen und numerischer Simulationen geprüft. Die numerischen Simulationen wurden mit zwei mathematischen Modellen durchgeführt, die sich in der Beschreibung des Übergangs der Verbindungen von der Wasser- in die

Gasphase unterscheiden: der Annahme lokalen Gleichgewichts, sowie Kinetik erster Ordnung. Bis auf den Massentransferkoeffizient, der im kinetischen Modell den Übergang von der Wasser- in die Gasphase beschreibt, wurden die für die Simulationen verwendeten Parameter unabhängig von den simulierten Daten bestimmt.

Das Ausmaß des Ungleichgewichts zwischen Wasser- und Gasphase entwickelte sich als Funktion der dimensionslosen Zeit. Die für Verbindungen mit hoher Henry-Konstante in Experimenten mit niedrigem Wassergehalt gemessenen Konzentrationen konnten nur zu Beginn mit dem Gleichgewichtsmodell beschrieben werden. Dieses Modell konnte die im weiteren Verlauf der Experimente gemessenen Konzentrationen nicht beschreiben. Das kinetische Modell konnte diese Daten nachvollziehen, wenn kalibrierte Massentransferkoeffizienten benutzt wurden. Es wurde gezeigt, daß der Gas-Wasser-Massentransferkoeffizient im kinetischen Modell für die Beschreibung der Bodenluftabsaugung nicht unbedingt als Konstante angenommen werden kann, sondern ebenfalls eine Funktion der dimensionslosen Zeit ist. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen bestätigen die Hypothese, daß der Massentransfer von der Wasser- in die Gasphase durch Diffusion in interpartikulärem Wasser limitiert werden kann.