Corso di laurea specialistica in Ingegneria delle Acque e della Difesa del Suolo

Corso di

GESTIONE delle RISORSE IDRICHE a.a. 2003-2004



Prof. Luca Lanza

Dipartimento di Ingegneria Ambientale - DIAM

L'inquinamento delle falde acquifere

A seguito della crescente domanda d'acqua dolce e con l'intensificazione dell'uso dell'acqua, il problema della qualità delle acque diviene un fattore spesso decisivo per lo sviluppo e l'uso delle risorse idriche.

In particolare l'inquinamento delle falde acquifere richiede grande attenzione per

- > le basse velocità dell'acqua
- > il rischio di interazione con la matrice solida.

Una volta che le acque di falda sono state inquinate, il ripristino delle condizioni originali di assenza di inquinamento è un processo normalmente molto lento e difficile.

Acqua INQUINATA > situazione in cui la qualità dell'acqua si è deteriorata fino al punto di risultare pericolosa per il consumo umano.

Tuttavia ... anche in condizioni indisturbate o senza l'intervento dell'uomo, l'acqua di falda contiene di per sé una certa quantità di sostanze in soluzione, che talvolta raggiungono valori tali da renderla inutilizzabile per alcune tipologie d'uso.

INQUINANTE = sostanza disciolta trasportata dall'acqua e/o accumulata nella falda, indipendentemente dal fatto che la sua concentrazione raggiunga livelli di pericolo per il consumo umano.

> Le fonti di inquinamento

✓ AMBIENTALE

Inquinamento dovuto all'ambiente in cui si realizza il flusso delle acque sotterranee. (ad es., nell'attraversare rocce di tipo particolare, l'acqua può disciogliere piccole ma talvolta significative quantità di minerale).

✓ CIVILE

Inquinamento dovuto alla rottura accidentale di fognature, al percolamento dalle fosse settiche, alla ricarica dell'acquifero con acqua di scarico della depurazione.

(normalmente a questo tipo di inquinamento sono dovute le contaminazioni di carattere biologico – batteri e virus).

✓ INDUSTRIALE

Inquinamento dovuto agli scarichi dei processi industriali e/o degli insediamenti produttivi, infrastrutture, ecc.

(non è facile separare questo tipo di inquinamento dal precedente, poiché spesso si verificano nello stesso sistema di scarico, tuttavia in questo caso gli inquinanti sono anche costituiti da metalli pesanti, idrocarburi, sostanze altamente tossiche o radioattive).

✓ AGRICOLO

Inquinamento dovuto all'acqua di irrigazione ed all'acqua di pioggia che dilava i fertilizzanti, gli erbicidi/pesticidi, ecc., e giunge alla falda attraverso la zona insatura.

> I processi di trasporto nelle acque sotterranee

Si tratta di processi di trasporto di massa, dove la massa considerata è quella di una certa sostanza, ad es. un soluto, che viene trasportata dall'acqua attraverso gli spazi interstiziali di un mezzo poroso, sia nella zona satura sia nella zona insatura.

I meccanismi che consentono il trasporto di un inquinante in un mezzo poroso sono:



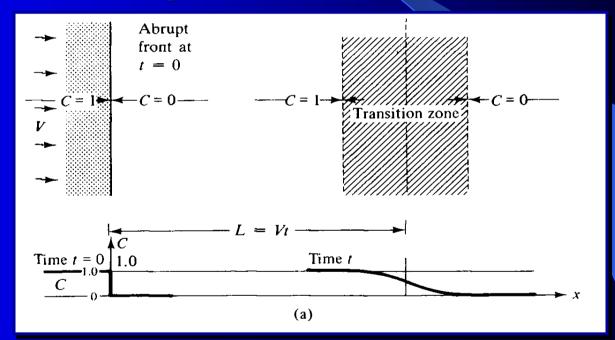
Solo in alcune situazioni la zona di transizione tra due porzioni dell'acquifero caratterizzate da diverse condizioni di qualità può essere schematizzata come un fronte netto.

La dispersione idrodinamica

Si consid<mark>eri una situazione di flusso saturo in un mezzo poroso, con una porzione del dominio fluido che contiene una certa massa di soluto (detto anche **tracciante**).</mark>

Il tracciante, ovvero una porzione identificabile dello stesso fluido, può essere determinata in base alla sua densità, concentrazione di un certo inquinante, colore, conducibilità elettrica,ecc.

Primo esperimento:



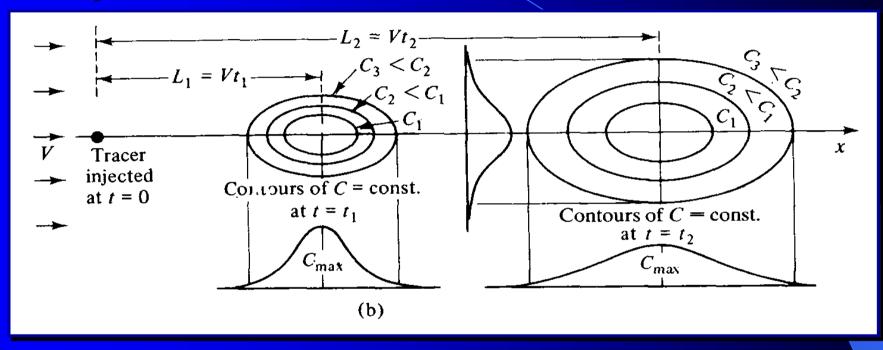
Un fronte netto separa al tempo t=0 la porzione occupata dal tracciante (C=1) da quella occupata da acqua pulita (C=0). In caso di flusso uniforme con velocità V, normale al fronte iniziale, la legge di Darcy consente di calcolare la nuova posizione del fronte come x=Vt.

Tuttavia, se si misura la concentrazione in un certo numero di pozzi di osservazione, si osserva che tale fronte non esiste, ma si verifica una transizione graduale dalla zona con C = I a C = 0.

L'esperienza dimostra che al passare del tempo l'ampiezza della zona di transizione aumenta, e tale ampliamento non può essere spiegato dal movimento medio dell'acqua.

La dispersione idrodinamica

Secondo esperimento:



Consideriamo l'iniezione di una certa quantità di soluto nel punto x = 0 al tempo t = 0.

Utilizzando la velocità media e quindi l'equazione di Darcy, ci si aspetta che il tracciante si sposti come un volume di forma fissa, che raggiunge il punto x = Vt all'istante t.

Anche in questo caso le osservazioni sperimentali mostrano che il tracciante si espande non soltanto nella direzione del flusso (medio) uniforme ma anche in direzione normale ad essa.

L'area occupata dal tracciante ha forma ellittica (curve di uguale concentrazione).

Anche tale comportamento non può essere spiegato con il moto medio uniforme.

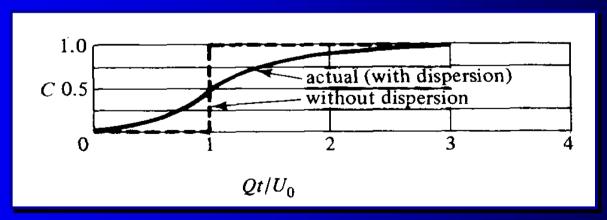
> La dispersione idrodinamica

Tale fenomeno di dispersione in un mezzo poroso è detto DISPERSIONE IDRODINAMICA.

Il fenomeno è non permanente ed irreversibile > non è possibile ripristinare la distribuzione iniziale del tracciante invertendo la direzione del moto uniforme.

Il fenomeno della dispersione può essere dimostrato anche con un semplice esperimento. Si consideri il moto permanente di filtrazione satura in una colonna omogenea di sabbia, in cui ad un certo istante t = 0 viene immesso del NaCl nella colonna.

Si misuri al termine della colonna la concentrazione C = C(t) del tracciante immesso e la si rappresenti in un grafico, in termini della cosiddetta curva di breakthrough.



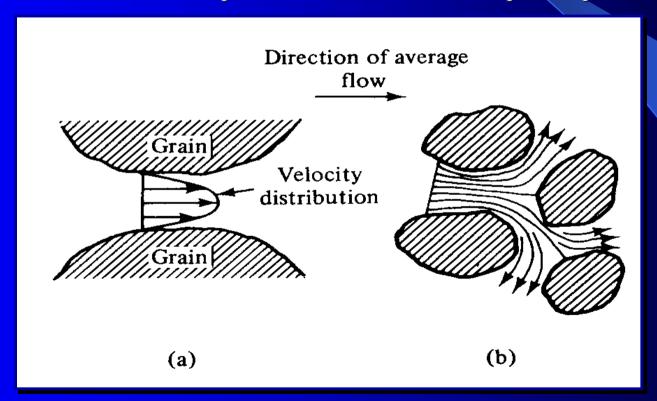
 U_0 è il volume dei meati e Q è la portata costante.

In assenza di dispersione la curva dovrebbe avere la forma di uno scalino (linea tratteggiata). In realtà assume una conformazione ad S come illustrato in figura.

La dispersione idrodinamica

Per spiegare tali fenomeni bisogna ragionare <mark>a livello microscopico</mark>, ovvero all'interno dei meati.

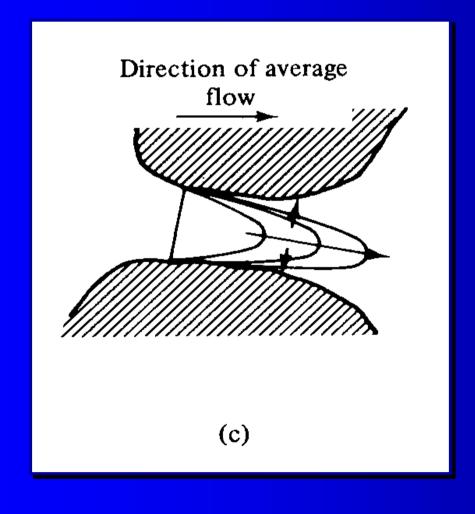
La velocità varia in effetti in direzione e modulo nella sezione di ciascun meato. Normalmente si assume velocità zero a contatto con la parete e velocità massima in qualche punto interno.



A causa della forma degli spazi interstiziali, le linee di corrente variano nello spazio rispetto alla direzione media del flusso. Questo fenomeno provoca la dispersione delle particelle di tracciante che occupano una porzione sempre più estesa del dominio fluido.

La diffusione molecolare

La dispersione avviene principalmente in direzione longitudinale rispetto al flusso medio, e le variazioni di velocità non spiegano l'aumento di ampiezza in direzione normale al moto medio che è invece dovuto alla DIFFUSIONE MOLECOLARE.



La diffusione molecolare è dovuta ai movimenti aleatori delle molecole del fluido e produce un flusso aggiuntivo di tracciante da zone di maggiore concentrazione a zone di concentrazione più bassa, e derivanti anch'esse dalla dispersione del soluto.

L'effetto microscopico si ripercuote a livello macroscopico, come si può evidenziare lasciando tendere a zero la velocità.

> La dispersione idrodinamica

La dispersione dovuta alle variazioni di velocità a livello microscopico, specialmente nella direzione del flusso, si dice DISPERSIONE MECCANICA.

Si dice invece <u>DISPERSIONE IDRODINAMICA</u> il fenomeno associato sia alla dispersione meccanica sia alla diffusione molecolare.

<mark>I due processi sono infatti inseparabili e la loro differenziazione è del tutto artificiale.</mark>

Oltre ad advezione (flusso medio), dispersione meccanica e diffusione molecolare, molti altri fattori possono influenzare la distribuzione della concentrazione di un soluto in un mezzo poroso:

- ✓ Interazione con la matrice solida (assorbimento, deposizione, scioglimento della matrice solida, scambio ionico, ecc.)
- ✓ Reazioni chimiche
- ✓ Decadimento radioattivo

Le variazioni di concentrazione del tracciante provocano variazioni della densità e viscosità del liquido, che possono influenzare lo stesso regime di moto (distribuzione delle velocità). Quando la concentrazione non influenza la densità e viscosità del liquido che lo trasporta si parla di TRACCIANTE PASSIVO.

> Flusso di advezione e dispersione

Sia V(x, t) la velocità del fluido e c la sua concentrazione:

$$V(x,t) = \overline{V}(x,t) + V'(x,t)$$
$$c(x,t) = \overline{c}(x,t) + c'(x,t)$$

con $\overline{V}(x,t)$ la velocità media del liquido e V' la sua deviazione rispetto alla media;

 $\overline{c}(x,t)$ la concentrazione media del liquido e c' la sua deviazione rispetto alla media.

Il trasporto medio sarà:

$$\overline{cV} = \overline{cV} + \overline{c'V'}$$

ovvero il flusso medio della sostanza considerata è uguale alla somma di due flussi a livello macroscopico:

- \triangleright un **FLUSSO DI ADVEZIONE**, cV che costituisce il flusso trasportato dall'acqua alla sua velocità media, secondo la legge di Darcy;
- > un FLUSSO DI DISPERSIONE, c'V' che costituisce il flusso addizionale dovuto alle fluttuazioni della velocità nell'intorno del punto considerato.

> Il coefficiente di dispersione

Il flusso di dispersione può essere espresso in termini di grandezze medie (e misurabili) quali la velocità e la concentrazione media.

L'ipotesi di lavoro è che tale flusso possa essere espresso nella forma della legge di Fick:

$$\overline{c'V'} = -\mathbf{D} \cdot \nabla \overline{c} \qquad \overline{c'V'}_i = -D_{ij} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_j}$$

in cui D è un tensore simmetrico detto COEFFICIENTE DI DISPERSIONE (meccanica).

In tale espressione $\begin{bmatrix} \overline{c} \\ c \end{bmatrix}$ indica la massa del tracciante per unità di volume d'acqua, ed il

termine c'V' rappresenta il flusso per unità di area dell'acqua.

L'equazione indica che il flusso di dispersione è linearmente proporzionale al gradiente di concentrazione media e che tale flusso si realizza da zone di alta concentrazione a zone di bassa concentrazione.

> Il coefficiente di dispersione

Diversi autori hanno ricavato la seguente espressione per la relazione tra ${f D}$ e la configurazione microscopica della matrice porosa, la velocità del fluido e la diffusione molecolare:

$$D_{ij} = a_{ijkm} \frac{\overline{V}_k \overline{V}_m}{\overline{V}} f(Pe, \delta)$$

in cui

 \overline{V}

è la velocità media, è il numero di Peclet, definito come:

$$Pe = L \cdot \overline{V} / D_d$$

dove L è una lunghezza caratteristica dei meati,

 $D_{\rm d}$ è il coefficiente di diffusione molecolare del soluto nella fase liquida; δ è il rapporto tra la lunghezza caratteristica dei singoli meati e la lunghezza caratteristica della loro sezione trasversale;

 $f(\text{Pe}, \delta)$ è una funzione che introduce l'effetto di trasporto del tracciante per diffusione molecolare tra linee di corrente contigue a livello microscopico.

In questo modo la diffusione molecolare influenza la dispersione meccanica. Bear e Bachmat (1967) suggeriscono la relazione $f(Pe, \delta) = Pe/(Pe + 2 + 4 \delta^2)$, ma nella maggior parte dei casi si assume $f(Pe, \delta) = 1$.

> Il coefficiente di dispersione

Il coefficiente a_{ijkm} [L] — chiamato **dispersività del mezzo poroso** — è un tensore del quarto ordine che esprime la configurazione microscopica dell'interfaccia solido-liquido.

Nel caso di mezzo poroso ISOTROPO, le componenti diverse da zero del tensore sono legate a due parametri:

 $a_L[L] = dispersività longitudinale$ $<math>a_T[L] = dispersività trasversale$

- a_L misura l'eterogeneità del mezzo poroso a scala microscopica, ovvero dovuta alla presenza dei meati e della matrice solida. È dell'ordine di grandezza della dimensione media dei grani.
- a_T è di un ordine di grandezza 10 o 20 volte più piccolo di a_L .

Il coefficiente a_{ijkm} assume la seguente espressione:

$$a_{ijkm} = a_T \delta_{ij} \delta_{km} + \frac{a_L - a_T}{2} (\delta_{ik} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jk})$$

in cui δ_{ij} indica il delta di Kronecker ($\delta_{ij} = 0$ per $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ per i = j).

Utilizzando tale espressione, con $f(Pe, \delta) = 1$, si ottiene il coefficiente di dispersione meccanica nella forma:

$$D_{ij} = a_T V \delta_{ij} + (a_L - a_T) V_i V_j / V$$

(si omette il segno di media per le velocità)

La diffusione molecolare

A livello microscopico, il vettore di flusso $\mathbf{J}^{(d)}$ dovuto alla diffusione molecolare è espresso dalla legge di Fick:

$$\mathbf{J}^{(d)} = -D_d \cdot \nabla c \qquad \qquad J_i^{(d)} = -D_d \frac{\partial c}{\partial x_i}$$

in cui D_d è il coefficiente di diffusione molecolare in un mezzo fluido (che vale circa 10^{-5} cm²/s).

Integrando tale espressione sul REV, con opportune ipotesi semplificative, Bear e Bachmat (1986) hanno ottenuto la seguente espressione per il flusso macroscopico:

$$\overline{\mathbf{J}^{(d)}} = -D_d \mathbf{T}^* \cdot \nabla \overline{c} = -D_d^* \cdot \nabla \overline{c}$$

in cui $\mathbf{D}_d^* = \mathbf{T}^*D_d$ è il coefficiente di diffusione molecolare in un mezzo poroso e \mathbf{T}^* è un tensore simmetrico del secondo ordine che esprime l'effetto della configurazione della parte del REV occupata dall'acqua.

Il coefficiente \mathbf{T}^* , spesso chiamato tortuosità, è definito come: $T_{ij}^* = \frac{1}{U_{0w}} \int_{S_{ww}} (x_j - x_{0j}) v_i \mathrm{d}S$

Il coefficiente T^* , spesso chiamato **tortuosità**, è definito come: con S_{ww} la porzione di confine acqua-acqua del REV v la normale alla superficie U_{0w} il volume del REV occupato dall'acqua.

> Il coefficiente di dispersione idrodinamica

Sommando i contributi del flusso dispersivo e diffusivo si ottiene:

$$\overline{c'\mathbf{V'}} + \overline{\mathbf{J}^{(d)}} = -(\mathbf{D} + \mathbf{D}_d) \cdot \nabla \overline{c} = -\mathbf{D}_h \cdot \nabla \overline{c}$$

in cui il coefficiente $\mathbf{D}_h = \mathbf{D} + \mathbf{D}_d^*$ è chiamato coefficiente di dispersione idrodinamica.

Il **flusso totale q_{c, tot} di un inquinante, trasportato per advezione, dispersione e diffusione può essere** dunque scritto nella forma:

$$\mathbf{q}_{c,tot} = \theta_w (\overline{c} \overline{\mathbf{V}} - \mathbf{D}_h \cdot \nabla \overline{c})$$

che rappresenta la quantità di inquinante trasportato per unità d'area di un mezzo poroso.

L'ipotesi di considerare $f(Pe, \delta) = 1$ equivale a supporre una relazione lineare tra il coefficiente di dispersione meccanica **D** e la velocità media V.

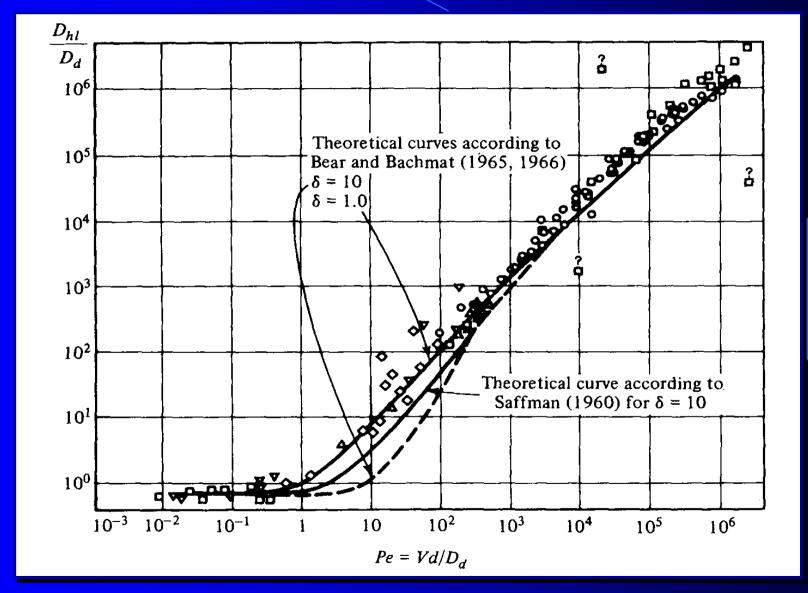
Tuttavia il termine $f(Pe, \delta)$ introduce un effetto di non linearità con la velocità (dal momento che $f(Pe, \delta) = LV/D_d$) che sembra essere confermato dagli studi sperimentali disponibili.

Per tener conto di tali non-linearità, si utilizzano spesso espressioni del tipo:

$$D_{11} = a_L V(\text{Pe})^{m_1}, \quad D_{22} = a_T V(\text{Pe})^{m_2}$$

con m_1 ed m_2 costanti opportune.

> Il coefficiente di dispersione idrodinamica

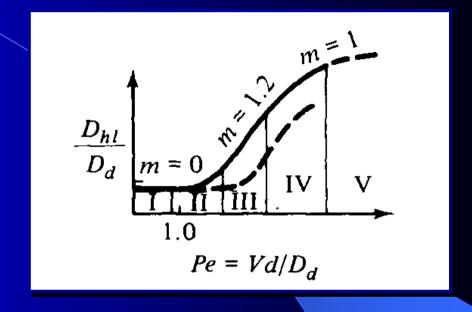


> Il coefficiente di dispersione idrodinamica

La curva della dispersione idrodinamica definisce diverse zone a diverso comportamento:

ZONA I: In questa zona predomina la diffusione molecolare, poiché la velocità del flusso è molto piccola $(a_L V << D_d T^*)$;

ZONA II: Corrisponde a valori di Pe compresi tra 0.4 e 5. In questa zona gli effetti della dispersione meccanica e della diffusione molecolare sono dello stesso ordine;



ZONA III: In questa zona la dispersione è in gran parte meccanica. Si ha infatti:

$$D_{hL}/D_d = \alpha \cdot (Pe)^m$$
 con $\alpha \approx 0.5$ ed $1 < m < 1.2$;

ZONA IV: In questa zona predomina nettamente l'effetto della dispersione meccanica. Si ha infatti:

$$D_{hL}/D_d = \beta \cdot Pe$$
 con $\beta \approx 1.8$;

(in pratica, sia in zona III sia in zona IV, il coefficiente di dispersione D_{hL} è assunto proporzionale alla velocità);

ZONA V: Anche questa è una zona di pura dispersione meccanica, ma oltre il limite di validità della legge di Darcy, e gli effetti inerziali e turbolenti non possono essere trascurati.

Si hanno meno informazioni sulla dispersione trasversale (in letteratura si trovano rapporti a_L/a_T da 5:1 a 24:1 ed anche fino a 100:1). Spesso si utilizza una relazione D_{hT}/D_d simile alle precedenti ma con valori diversi di α ed m.

L'equazione di continuità per l'inquinante

L'equazione di continuità a livello macroscopico assume la forma di un'equazione alle derivate parziali del secondo ordine che esprime il bilancio di massa nell'intorno di un punto all'interno del mezzo poroso.

Flusso in mezzo insaturo

Si consideri il caso più generale di flusso in mezzo insaturo, in cui θ rappresenta il contenuto di umidità. In caso di flusso in mezzo saturo, θ sarà sostituito dalla porosità n del mezzo. In mezzo insaturo la dispersività ed il coefficiente di diffusione molecolare sono funzione del contenuto di umidità θ .

Per scrivere l'equazione di bilancio di massa di una sostanza inquinante è necessario tener conto di cinque diversi contributi:

1. La quantità di inquinante in ingresso ed in uscita dal volume di controllo a seguito dei processi di advezione, dispersione e diffusione, ovvero il flusso totale:

 $\mathbf{q}_{c,tot} = \theta_w (c\mathbf{V} - \mathbf{D}_h \cdot \nabla c)$

Nel derivare le equazioni del moto di filtrazione abbiamo visto che la divergenza del flusso di una certa quantità indica, a meno del segno, la differenza tra ingresso ed uscita di tale quantità per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo.

Pertanto, - div q_{c, tot} rappresenta il bilancio tra ingresso ed uscita di una certa sostanza inquinante, per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo.

L'equazione di continuità per l'inquinante

2. L'inquinante che viene trattenuto o rilasciato a causa dell'interazione all'interfaccia tra fase liquida e fase solida dovuta a reazioni chimiche o elettriche tra l'inquinante e la superficie solida.

(a titolo di esempio si possono immaginare fenomeni di scambio ionico ed adsorbimento)

Indichiamo con il simbolo f la quantità di inquinante che viene trattenuto da tale meccanismo, per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo.

3. L'inquinante che viene trattenuto o rilasciato a causa delle interazioni chimiche che avvengono all'interno della fase liquida o per fenomeni di decadimento.

Indichiamo con il simbolo Γ la velocità con la quale l'inquinante viene rilasciato in acqua per unità di massa del fluido.

In questo modo $\theta \rho \cdot \Gamma$ rappresenta la quantità di massa rilasciata da tale fenomeno per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo.

L'equazione di continuità per l'inquinante

4. L'inquinante che può essere immesso nel dominio di moto per iniezione di acqua inquinata, o rimosso dal dominio di moto per estrazione di acqua inquinata.

(ad esempio nel primo caso a seguito di ricarica artificiale o percolamento da discarica di rifiuti, nel secondo caso a seguito di emungimenti).
Se:

 $P(\mathbf{x}, t)$ ed $R(\mathbf{x}, t)$ indicano rispettivamente le portate di emungimento o di ricarica, per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo, e

c(x, t) e $c_R(x, t)$ indicano rispettivamente la concentrazioni di inquinante contenuto nell'acqua all'interno del mezzo poroso e nelle acque di ricarica,

la quantità $(Rc_R - Pc)$ sarà la quantità di inquinante complessivamente immesso per unità di volume del mezzo poroso e per unità di tempo.

5. La variazione della quantità di inquinante all'interno del volume di controllo dovuta a tutti i precedenti contributi. Se con θ_c si indica la massa di inquinante per unità di volume del mezzo poroso, il tasso di variazione di tale quantità sarà:

L'equazione di continuità per l'inquinante

Tenendo conto di tutti i contributi, si ottiene:

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_{c,tot} - f + \theta \rho \cdot \Gamma - Pc + Rc_R$$

oppure, esplicitando il flusso totale di inquinante:

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} = -\nabla \cdot (c\mathbf{q} - \theta \mathbf{D} \cdot \nabla c - \theta \mathbf{D}_d^* \cdot \nabla c) - f + \theta \rho \cdot \Gamma - Pc + Rc_R$$

che esprime il bilancio di massa macroscopico di un inquinante in termini di concentrazione. Tale espressione è spesso indicata come equazione della dispersione idrodinamica, oppure **EQUAZIONE di ADVEZIONE-DISPERSIONE.**

In caso di flusso in mezzo saturo, con $\theta = n = cost$, ed utilizzando l'equazione di continuità del flusso in *mezzo insaturo con* $\rho = 1$ *e sostituendo* P *con* P - R, *tale equazione diventa:*

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla c) + \left[\theta \rho \cdot \Gamma - f - R(c_R - c)\right] / n$$

in cui:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla c$$

$$\grave{e} \ la \ derivata \ sostanziale \ della \ concentrazione \ c.$$

Le condizioni iniziali ed al contorno

La condizione iniziale specifica la distribuzione della concentrazione nel dominio del mezzo poroso R all'istante t = 0:

$$c = c(\mathbf{x}, \theta)$$
 in **R**

Si indichi con F = F(x, y, z, t) l'equazione che descrive la superficie di contorno, e quindi con $v = \nabla F / |\nabla F|$ il versore normale alla superficie stessa.

Condizione al contorno generalizzata

La condizione di continuità del flusso dell'inquinante considerato attraverso la superficie di contorno (assunta priva di pozzi o sorgenti di inquinante), assume la forma:

$$[c\mathbf{q} - \theta \ \mathbf{D}_h \cdot \nabla c]_{1,2} \cdot \mathbf{v} = 0$$

dove:

 $[(\dots)]_{1,2} = (\dots)|_1 - (\dots)|_2$, ovvero la variazione della quantità (\dots) nell'attraversare il contorno dal lato 1 al lato 2.

I casi di particolare interesse riguardano:

- concentrazione imposta sulla superficie di contorno;
- flusso di inquinante imposto attraverso la superficie di contorno;
- superficie di separazione tra due diversi mezzi porosi.

Le condizioni iniziali ed al contorno

Concentrazione imposta sulla superficie di contorno

Se la concentrazione $c = c(\mathbf{x}, t)$ su tutti i punti di una superficie di contorno è nota in funzione del tempo, ad esempio data da una funzione $g_1(\mathbf{x}, t)$, a causa di fenomeni esterni al dominio di moto ed indipendentemente da ciò che accade nel dominio \mathbf{R} , la condizione al contorno diviene:

$$c(\mathbf{x}, t) = g_I(\mathbf{x}, t) \qquad su S_I;$$

in cui le funzioni c e g sono riferite rispettivamente al lato interno ed esterno della superficie di contorno. Si tratta di una condizione al contorno del primo tipo, o di Dirichlet.

Flusso di inquinante imposto attraverso la superficie di contorno

Se i fenomeni esterni al dominio di moto impongono un flusso noto, ad esempio dato da una funzione $g_2(\mathbf{x}, t)$, la condizione al contorno diviene:

$$[c\mathbf{q} - \theta \ \mathbf{D}_h \cdot \nabla c] \cdot \mathbf{v} = g_2(\mathbf{x}, t) \quad \text{su } S_2$$

Poiché tale condizione contiene sia c che Vc, si tratta di una condizione al contorno del terzo tipo, o di Cauchy.

Un caso importante è quello di contorno impermeabile, in cui $g_2(\mathbf{x}, t) = 0$ e $\mathbf{q} \cdot \mathbf{v} = 0$, per cui:

$$\mathbf{D}_h \cdot \nabla c = 0 \qquad \qquad su \ S_2;$$

che rappresenta una condizione al contorno del secondo tipo, o di Neumann;

Definizione completa di un problema di inquinamento

- 1. Definizione della configurazione geometrica del dominio di moto;
- 2. Identificazione della variabile dipendente del problema di inquinamento, ovvero la concentrazione delle sostanze inquinanti di interesse per il problema specifico;

Se le sostanze inquinanti interagiscono tra loro, la concentrazione di ciascuna di esse è una variabile di stato e sono necessarie informazioni sulle rispettive modalità di interazione.

Poiché nell'equazione della dispersione la velocità V compare sia nel flusso di advezione sia come componente del coefficiente di dispersione D, è necessario conoscere $V(\mathbf{x}, t)$. Tale informazione può essere un dato di input del modello di inquinamento (tracciante passivo), oppure, se le variazioni di concentrazione influenzano la densità del fluido $\rho(\mathbf{x}, t)$, la velocità rappresenta una variabile di stato ed un'incognita del problema.

Analogamente in un problema di flusso insaturo, il contenuto di umidità $\theta(\mathbf{x}, t)$ può essere noto come input del modello oppure viene considerato una variabile dipendente del problema.

- 3. Definizione delle equazioni di bilancio di massa per ciascun inquinante considerato;
- 4. Identificazione del valore dei coefficienti che compaiono in tali equazioni; (in particolare la dispersività e la diffusione molecolare nel mezzo poroso considerato)
- 5. Definizione dei diversi termini di pozzo e/o sorgente che compaiono in tali equazioni;
- 6. Definizione delle condizioni iniziali ed al contorno cui sono soggette le variabili di stato del problema.

> Il trasporto di inquinanti per sola advezione

Il trasporto di inquinanti in un mezzo poroso è dovuto ad advezione, dispersione e diffusione. Tuttavia in molti casi, o in prima approssimazione, il trasporto di inquinante dovuto alla dispersione idrodinamica è molto più piccolo di quello dovuto all'advezione.
In tal caso, per mezzo saturo:

$$|c\mathbf{q}| >> |n\mathbf{D}_h \cdot \nabla c|$$

In tali condizioni, le sostanze inquinanti presenti nell'acquifero si spostano lungo le linee di corrente del fluido ed alla stessa velocità del fluido.

Approssimazione del fronte netto di interfaccia

Talvolta la zona di transizione che si sviluppa a causa della dispersione idrodinamica tra due zone occupate l'una da acqua inquinata e l'altra da acqua non inquinata, è sottile rispetto alle dimensioni di tali zone di fluido.

In tali condizioni è possibile introdurre un'approssimazione per cui la zona di transizione viene sostituita da un fronte netto di interfaccia.

Il fronte, spostandosi con la velocità dell'acqua secondo il campo di moto, separa continuamente le due zone occupate dall'acqua con diversa concentrazione di un dato inquinante.

Water

> Approssimazione del fronte netto di interfaccia

In figura è illustrato un fronte netto che separa due domini fluidi R_1 ed R_2 a diverse concentrazioni dello stesso inquinante. Se il fluido è lo stesso ed il tracciante è supposto passivo, $\rho_1 = \rho_2$ e $\mu_1 = \mu_2$ e pertanto $K_1 = K_2$.

Poiché il fluido non attraversa l'interfaccia, si ha:

$$V|_{I} \cdot v = V|_{2} \cdot v = 0$$

dove v è il versore normale alla superficie e V_1 e V_2 sono le velocità dell'acqua sui lati 1 e 2 del fronte.

Per la condizione al contorno generalizzata all'interfaccia, dovrà essere:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{V}_1 \cdot \nabla F = 0 \qquad \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{V}_2 \cdot \nabla F = 0$$

in cui V_1 e V_2 sono definite dalla legge di Darcy come:

$$\mathbf{V}_1 = -\frac{K}{n} \nabla \phi_1 \qquad \mathbf{V}_2 = -\frac{K}{n} \nabla \phi_2$$

Water

Abrupt front F(x, y, z, t) = 0

 $e \phi_1 e \phi_2$ sono i carichi piezometrici rispettivamente nel dominio R_1 ed R_2 .

> Advezione dell'inquinante

Quando la situazione giustifica l'ipotesi di sola advezione, l'equazione di bilancio per flusso in mezzo saturo ed in assenza di termini pozzo/sorgente, si riduce alla:

$$\frac{\partial nc}{\partial t} = -\nabla \cdot c\mathbf{q}, \qquad \mathbf{q} = n\mathbf{V}$$

che nel caso più semplice di mezzo poroso omogeneo indeformabile ($\nabla n=0$ e $\partial n/\partial t=0$), diventa:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla c - c \nabla \cdot \mathbf{V}$$

Per moto permanente di un fluido incomprimibile $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$. *In tali condizioni si ha ancora:*

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla c$$

Per moto permanente di un fluido incomprimibile $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$. In tali condizioni si ha ancora:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -V_x \frac{\partial c}{\partial x} - V_y \frac{\partial c}{\partial y}$$

> Macrodispersione

L'equazione della dispersione idrodinamica in un punto dell'acquifero si riduce ad esempio in caso di flusso di moto saturo, alla:

 $\frac{\partial(nc)}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ c\mathbf{q} + \mathbf{J}_c^* \right\} - \tau_c^* = 0$

in cui $J_c^* = -n\mathbf{D}_h \cdot \nabla c$ è la somma dei flussi dispersivo e diffusivo, $\mathbf{D}_h = \mathbf{D} + \mathbf{D}_d^*$, e $\tau_c^* = -f + n\rho \Gamma - Pc + \mathbf{R} \mathbf{C}_R$ indica i termini sorgente relativi ai fenomeni superficiali che si verificano all'interfaccia tra il solido ed il liquido, alle reazioni chimiche ed al fenomeno di decadimento, ed alle immissioni ed estrazioni di acqua inquinata.

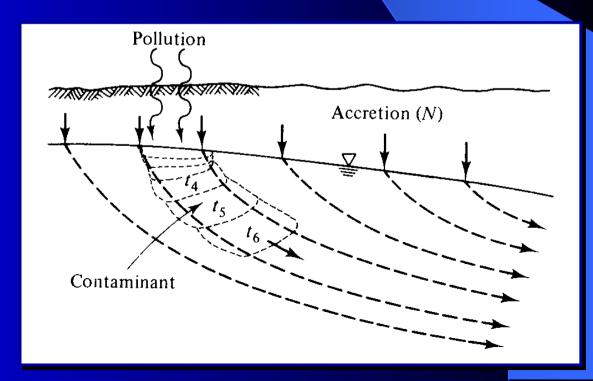
In tale espressione
$$c = c(x, y, z, t)$$

 $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x, y, z, t)$.

Tuttavia, in certe condizioni, l'approccio "idraulico" di considerare il problema di dispersione come un problema di flusso bidimensionale nel piano x-y è giustificato.

Nell'esempio in figura una fonte localizzata di inquinante raggiunge la falda freatica.

A breve distanza e dopo breve tempo il fenomeno è tri-dimensionale.



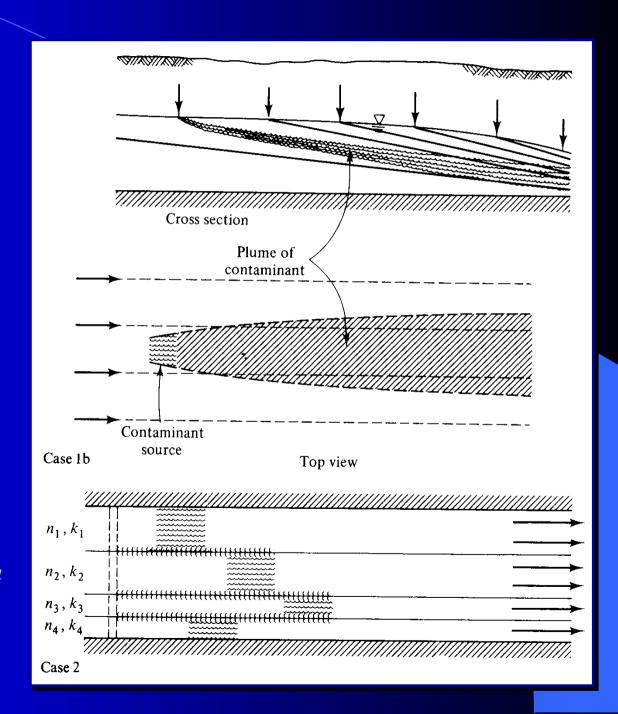
> Macrodispersione

Nel secondo caso la situazione è la stessa ma il tempo è più lungo e la distanza è maggiore.

Il fenomeno può essere considerato bidimensionale nel piano orizzontale ad una distanza sufficiente (circa 10-15 volte lo spessore del dominio fluido) dalla fonte di inquinamento locale.

Nel terzo caso un pozzo completamente penetrante immette acqua di qualità diversa in un acquifero confinato e stratificato [K = K(z)].

A causa della dispersione trasversale, ad una certa distanza dal pozzo di immissione, la qualità media dell'acqua dipenderà solamente da x e da y.



> Macrodispersione

Pertanto, in certe condizioni, può essere giustificato un approccio basato sull'ipotesi di flusso e trasporto di inquinante essenzialmente orizzontale. Tale modello si ottiene integrando l'equazione precedente sull'intera profondità B dell'acquifero.

Per un acquifero confinato si ottiene:

$$\int_{b_{1}}^{b_{2}} \left(\frac{\partial (nc)}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ c\mathbf{q} + \mathbf{J}_{c}^{*} \right\} - \tau_{c}^{*} \right) dz = \frac{\partial}{\partial t} B nc + \nabla \cdot B (c\mathbf{q} + \mathbf{J}_{c}^{*}) - B \tau_{c}^{*} + \left. \left(c\mathbf{q} + \mathbf{J}_{c}^{*} \right) \right|_{b_{2}} \cdot \nabla (z - b_{2}) - (c\mathbf{q} + \mathbf{J}_{c}^{*}) \right|_{b_{1}} \cdot \nabla (z - b_{1}) = 0$$

Gli ultimi due termini rappresentano il flusso di inquinante normale alle superfici superiore ed inferiore dell'acquifero. Per un acquifero confinato tali termini si annullano e si ha:

$$\frac{\partial}{\partial t}B\overline{nc} + \nabla \cdot B(\overline{c}\overline{\mathbf{q}} + \overline{\mathbf{J}_{c}^{*}}) - B\overline{\tau_{c}^{*}} = 0$$

Tutte le variabili sono ora solamente funzione di x, y e t.

Macrodispersione

Analizziamo ora il flusso totale di inquinante contenuto in tale equazione,

 $B(c\mathbf{q})$

Poiché:

$$\overline{c}\mathbf{q} \equiv (nc)V$$

si può scrivere:

$$\mathbf{q} = \mathbf{q} + \mathbf{\hat{q}},$$

$$c = c + \hat{c}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q} + \mathbf{\hat{q}}, \qquad c = c + \hat{c}, \qquad c\mathbf{q} = c\mathbf{q} + \overline{\hat{c}}\mathbf{\hat{q}}$$

Il termine

$$\frac{\overline{\hat{c}}\hat{\mathbf{q}}}{$$

in cui il cappello indica le deviazioni lungo la verticale.

detto MACRODISPERSIONE è dovuto alle fluttuazioni di q lungo la verticale.

Per proseguire l'analogia tra dispersione e macrodispersione è possibile definire, quale ipotesi di lavoro, $\overline{\mathbf{D}}_{ij}$ (i, j = 1,2) ed una macrodispersività A_{ijkm} , correlato ad un coefficiente di macrodispersione una macrodispersività longitudinale A_L ed una macrodispersività trasversale A_T dell'acquifero. *Il flusso di macrodispersione è dunque dato dalle:*

$$\overline{\hat{c}} \hat{\mathbf{q}} = -\overline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \overline{c}, \qquad \overline{D}_{ij} = \frac{\overline{\hat{q}_i \hat{q}_j}}{\overline{q}} \overline{L} = A_{ijkm} \frac{\overline{\hat{q}_k \hat{q}_m}}{\overline{q}} f(Pe^*, \delta^*)$$

$$A_{ijkm} \frac{\widehat{K}_{in} \widehat{K}_{jl}}{\overline{K}_{nk} \overline{K}_{lm}} \overline{L}, \qquad i, j, k, m = 1, 2 \ (\equiv x, y)$$