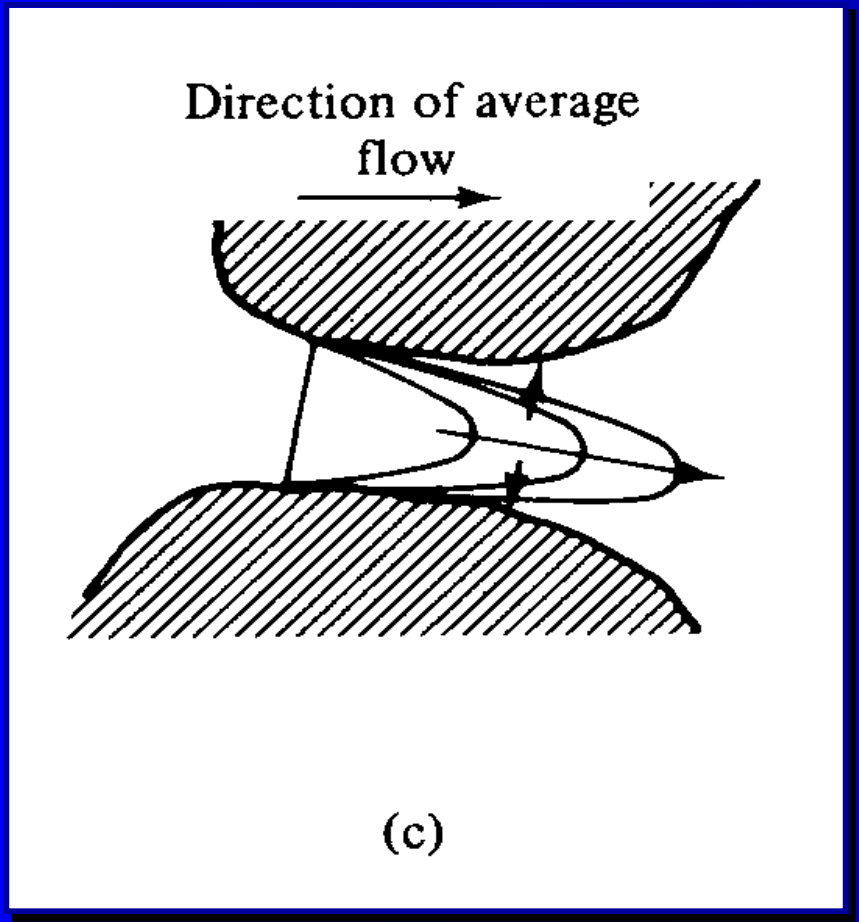
IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

➢ 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.

IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

➢ 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 ***DISPERSIONE IDRODINAMICA*** *il fenomeno associato sia alla dispersione meccanica sia alla diffusione molecolare.*
I due processi sono infatti inseparabili e la loro differenziazione è del tutto artificiale.

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****.*

IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

➢ 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:

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

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

➢ *un **FLUSSO DI ADVEZIONE**,* $\overline{c}\,\overline{V}$ *che costituisce il flusso trasportato dall'acqua alla sua velocità media, secondo la legge di Darcy;*

➢ *un **FLUSSO DI DISPERSIONE**,* $\overline{c'V'}$ *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:

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

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

In tale espressione $\bar{c}$ *indica la massa del tracciante per unità di volume d'acqua, ed il termine* $\overline{c'V'}$ *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 **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,*

Pe *è il numero di Peclet, definito come:* $Pe = L \cdot \overline{V} / D_d$

dove L è una lunghezza caratteristica dei meati,

D_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(Pe, δ) *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***

a_T [L] = ***dispersività trasversale***

- $\mathbf{a}_L$ 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, δ) = 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:*

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

in cui D_d *è il coefficiente di diffusione molecolare in un mezzo fluido (che vale circa* 10^{-5} cm^2/s*).*

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

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

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:*

$$T_{ij}^* = \frac{1}{U_{0w}} \int_{S_{ww}} (x_j - x_{0j}) v_i \mathrm{d}S$$

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:

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

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

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

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

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

L'ipotesi di considerare f(Pe, δ) = 1 equivale a supporre una relazione lineare tra il coefficiente di dispersione meccanica **D** *e la velocità media V.*
Tuttavia il termine f(Pe, δ) introduce un effetto di non linearità con la velocità (dal momento che f(Pe, δ) = LV/D_d*) che sembra essere confermato dagli studi sperimentali disponibili.*
Per tener conto di tali non-linearità, si utilizzano spesso espressioni del tipo:

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

con m_1 *ed* m_2 *costanti opportune.*