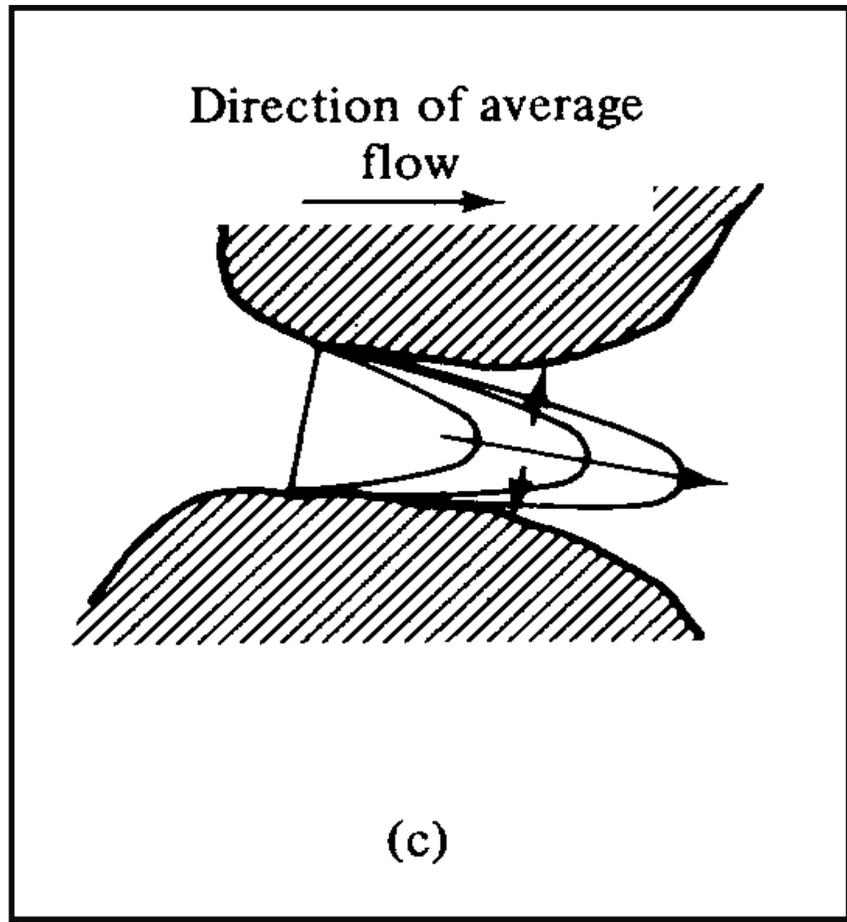


## ➤ La diffusione molecolare

*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 **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:

$$\begin{aligned} V(x, t) &= \bar{V}(x, t) + V'(x, t) \\ c(x, t) &= \bar{c}(x, t) + c'(x, t) \end{aligned}$$

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

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

Il trasporto medio sarà:

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

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

➤ un **FLUSSO DI ADVEZIONE**,  $\overline{c\bar{V}}$  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 TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

## ➤ 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:*

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

*in cui  $\mathbf{D}$  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 TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

## ➤ Il coefficiente di dispersione

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

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

in cui  $\bar{V}$  è la velocità media,  
Pe è il numero di Peclet, definito come:  $Pe = L \cdot \bar{V} / D_d$

dove  $L$  è una lunghezza caratteristica dei meati,

$D_d$  è il coefficiente di diffusione molecolare del soluto nella fase liquida;

$\delta$  è il rapporto tra la lunghezza caratteristica dei singoli meati e la lunghezza caratteristica della loro sezione trasversale;

$f(Pe, \delta)$  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**

$a_T$  [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  $\delta_{ij}$  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)*

# IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

## ➤ 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  $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ ).

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:

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.

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

# IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

## ➤ 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  $f(\text{Pe}, \delta) = 1$  equivale a supporre una relazione lineare tra il coefficiente di dispersione meccanica  $\mathbf{D}$  e la velocità media  $V$ .*

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

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

$$\underline{D_{11} = a_L V (\text{Pe})^{m_1}, \quad D_{22} = a_T V (\text{Pe})^{m_2}} \quad \text{con } m_1 \text{ ed } m_2 \text{ costanti opportune.}$$