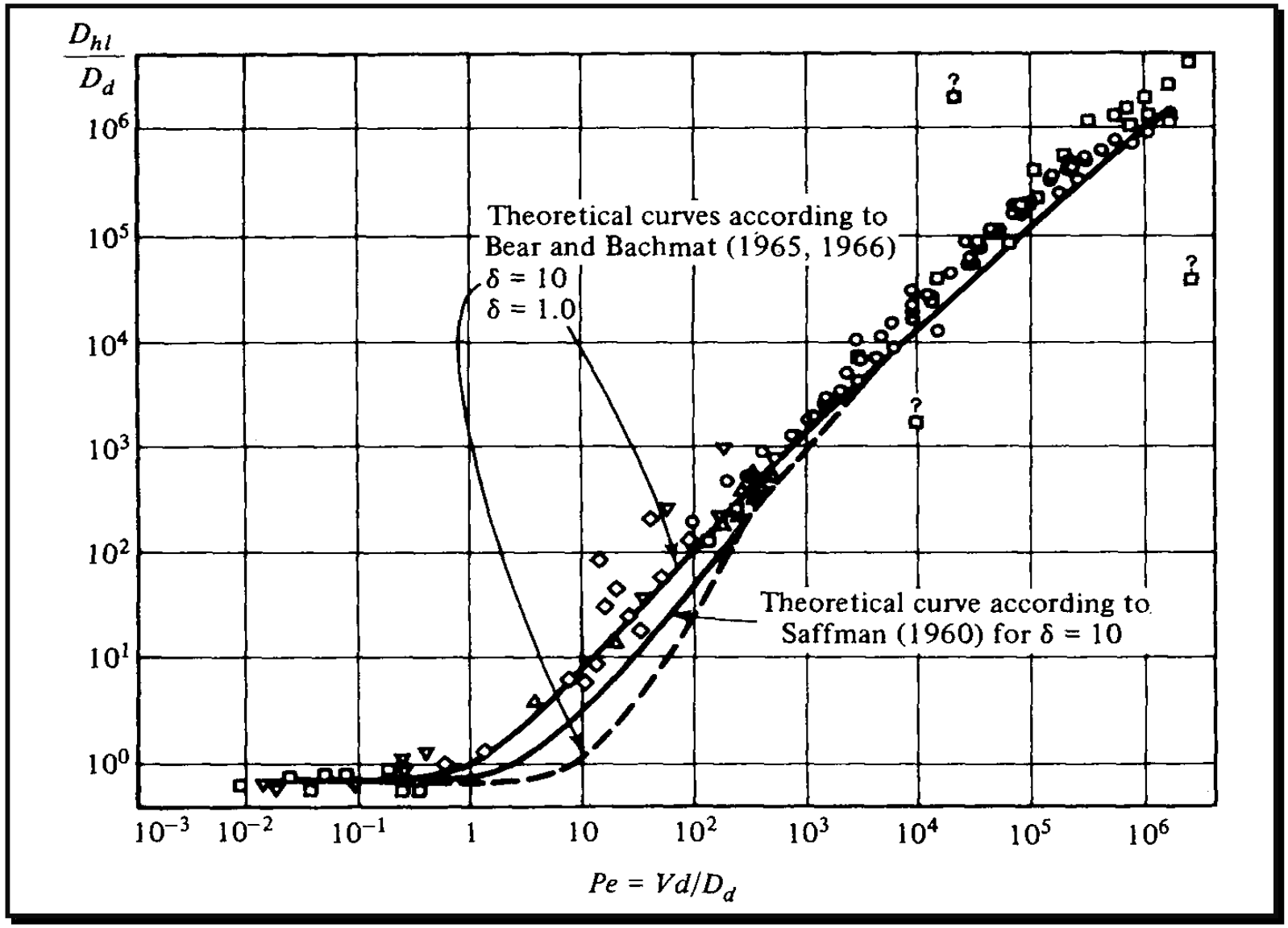
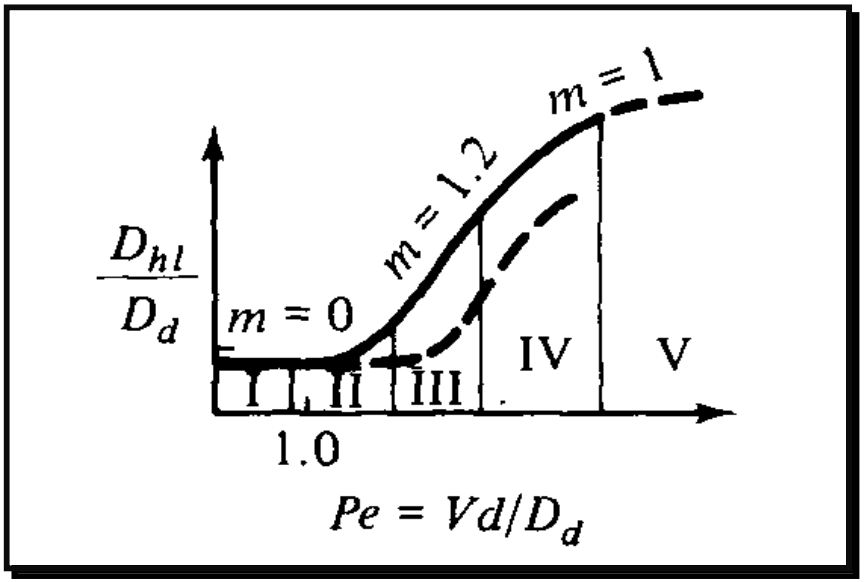
➢ Il coefficiente di dispersione idrodinamica



Relazione tra diffusione molecolare e dispersione idrodinamica longitudinale (flusso monodimensionale)

➢ 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:*

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

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

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

(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(**x**, t) ed R(**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: $\dfrac{\partial \theta_c}{\partial t}$

IL TRASPORTO DEGLI INQUINANTI

➢ 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:

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

è 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:

$$c = c(\mathbf{x}, 0) \qquad \text{in } \mathbf{R}$$

Si indichi con F = F(x, y, z, t) l'equazione che descrive la superficie di contorno, e quindi con $\nu = \nabla F / |\nabla F|$ 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:

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

dove:

$[(\dots)]_{1,2} = (\dots)|_1 - (\dots)|_2$, *ovvero la variazione della quantità (...) 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 **R**, *la condizione al contorno diviene:*

$$c(\mathbf{x}, t) = g_1(\mathbf{x}, t) \qquad \text{su } S_1;$$

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:

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

Poiché tale condizione contiene sia c che ∇c, 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:*

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

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