

Modelli matematici applicati all'inquinamento delle acque sotterranee (elementi teorici)

Ing. Michele Leccese

Dott.ssa Annalisa Di Fazio

D.I.T.S.

Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

Modelli matematici

2. Campo delle velocità (fluidodinamico)

Equazione generale delle acque filtranti

$$v=v(x,y,z,t)$$

2. Campo delle concentrazioni

Equazione del trasporto e della diffusione

$$c=c(x,y,z,t)$$

Il moto delle acque nelle falde

L'equazione generale delle acque filtranti

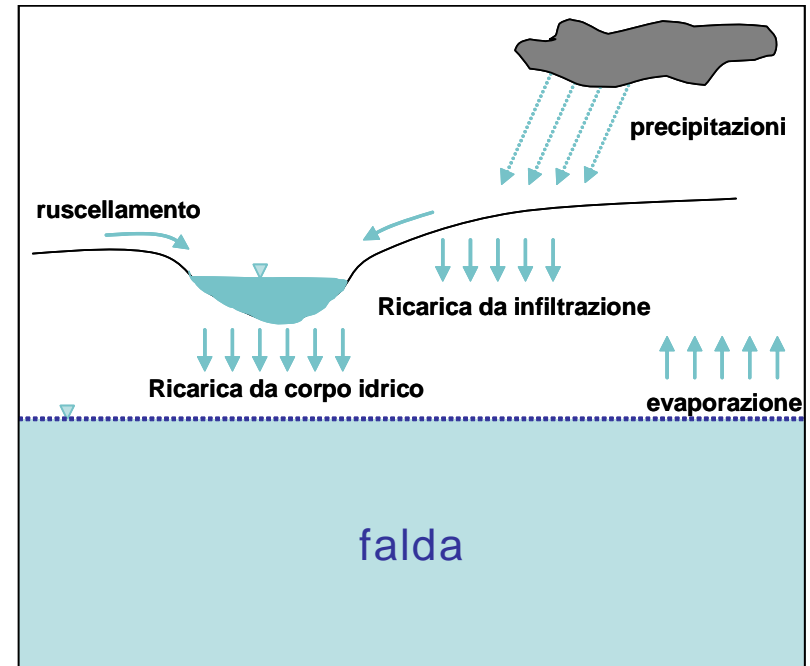
$w(x,y,t)$ [1/T]

In presenza di scambi idrici esterni
dovuti a:

- Ricarica superficiale da corpi idrici o precipitazione (+)
- Evapotraspirazione (-)

S_s [1/L]

Coefficiente di immagazzinamento



$$-\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + w(x, y, t)$$

Il moto delle acque nelle falde

Soluzione dell'equazione generale delle acque filtranti

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + w(x, y, t)$$

Obiettivo:

Determinare l'andamento della superficie piezometrica:

- Regime transitorio $\longrightarrow h(x, y, z, t)$
- Regime stazionario $\longrightarrow h(x, y, z)$

Metodi:

- Integrazione analitica
- Integrazione numerica

Il moto delle acque nelle falde

Soluzione dell'equazione generale delle acque filtranti

■ Definizione e discretizzazione del dominio

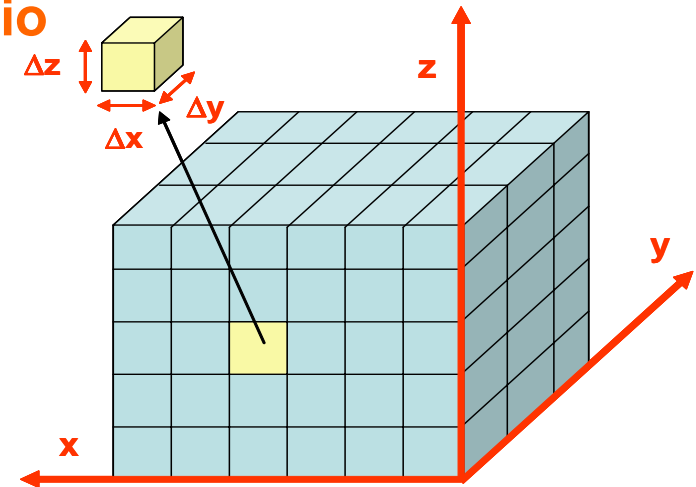
- ✓ $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$
- ✓ $x_{\min}, x_{\max}, \dots, t_{\min}, t_{\max}$

■ Definizione dei parametri

- ✓ K, S_s, \dots

■ Definizione delle condizioni al contorno e iniziali:

1. Limiti a potenziale controllato $h(x,y,z,t)=h^*$
2. Limiti a flusso imposto $\partial h / \partial x = j^*$ (si impone il gradiente)
3. Limiti a flusso controllato (ricarica) $w(x,y,t)$



Il moto delle acque nelle falde

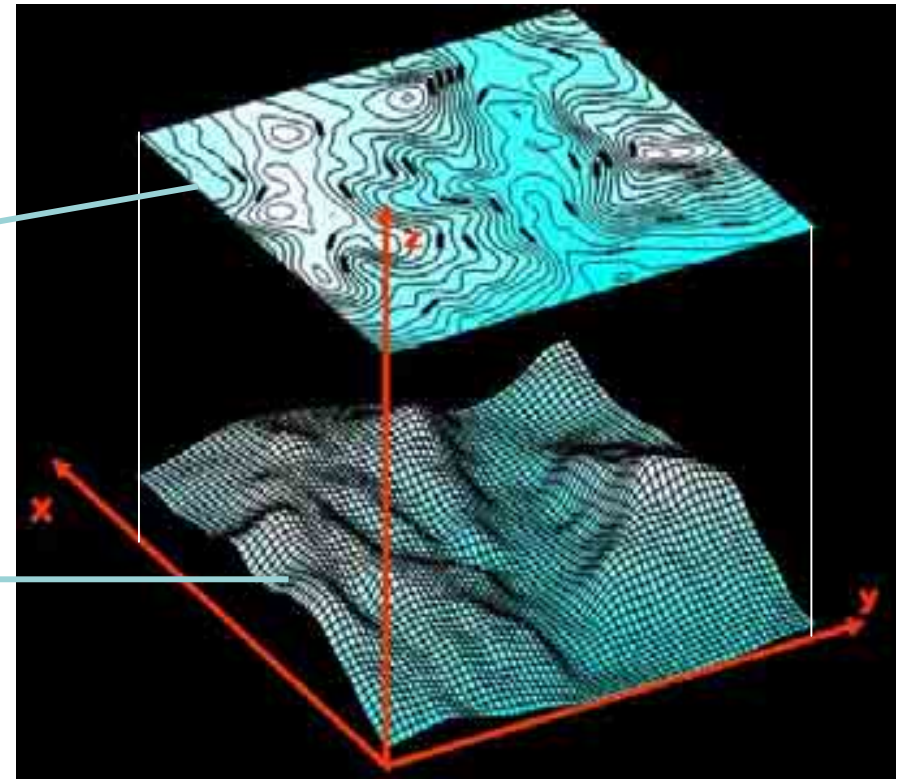
Soluzione dell'equazione generale delle acque filtranti

Esempio di risultato

Andamento della superficie
piezometrica $h(x,y)$

Rappresentazione bidimensionale
per curve a carico costante
(isopieze)

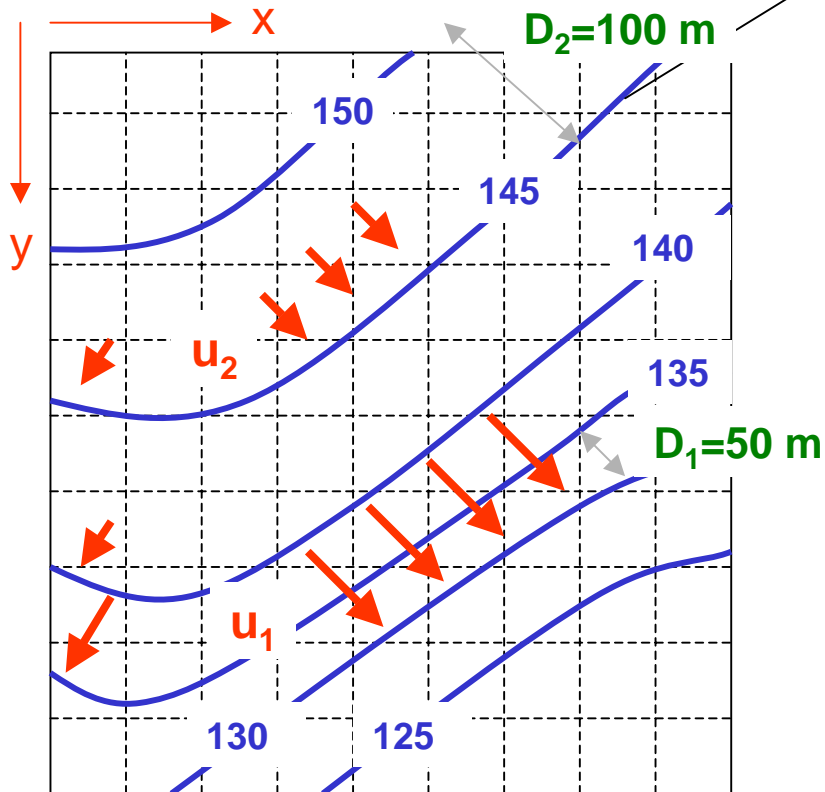
Rappresentazione
tridimensionale (3D)



Il moto delle acque nelle falde

Determinazione del campo fluidodinamico

Calcolo delle velocità $v=v(x,y,z,t)$



Linea equipotenziale $h=145\text{ m}$

La velocità è proporzionale al gradiente del carico idraulico che risulta sempre ortogonale alle linee equipotenziali

esempio

$$\underline{u} = -\underline{K} \cdot \underline{\nabla} h \quad K=10^{-6} \text{ m/s}$$

$$u_1 = -K \frac{\Delta H_1}{D_1} = 10^{-6} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \frac{5\text{m}}{50\text{m}} = 1 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$u_2 = -K \frac{\Delta H_2}{D_2} = 10^{-6} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \frac{5\text{m}}{100\text{m}} = 5 \cdot 10^{-8} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$u_1 \gg u_2$$

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

I fenomeni che contribuiscono alla dispersione delle sostanze nel suolo e nelle acque di falda sono:

- **trasporto convettivo** che dipende esclusivamente dal moto d'insieme del fluido. Esso è il più importante processo che forza lo spostamento dei contaminanti nel sottosuolo ed è caratterizzato dalla velocità media del flusso, determinata mediante la legge di Darcy
- **dispersione idrodinamica** che risulta dal mescolamento meccanico causato dalle variazioni locali della velocità attorno al valore della velocità media del flusso e dalla diffusione molecolare
- **reattività** chimica, fisico-chimica o biologica (in funzione delle caratteristiche reattive delle singole sostanze)

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

Equazione del trasporto e della diffusione

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\underline{u} C) = \underline{\nabla} \cdot (\underline{D}_{idro} \cdot \underline{\nabla} C) + \sum_i R_i$$

↓
↓
↓
↓

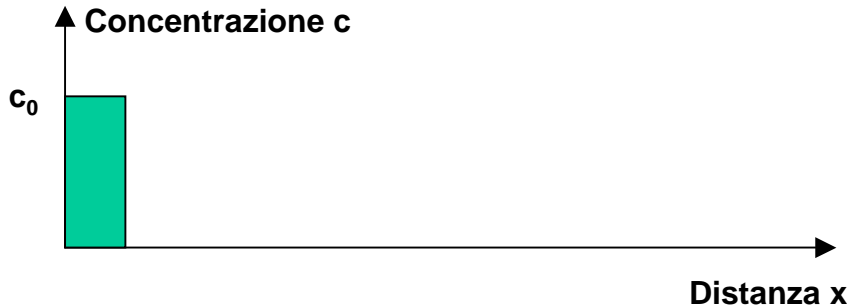
Variazione nel tempo Trasporto convettivo Dispersione idrodinamica Reattività

Equazione che descrive l'andamento della concentrazione dei contaminanti in funzione dello spazio e del tempo:

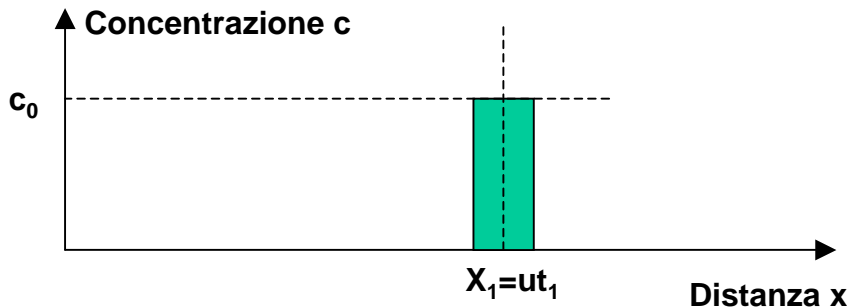
Incognita → $c=c(x,y,z,t)$

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

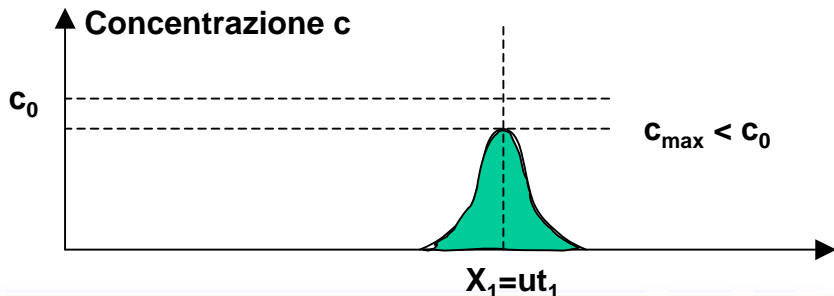
Descrizione degli effetti della convezione, dispersione



Immissione di una sostanza nel sistema ($t=t_0$)



Distribuzione dell'inquinante al tempo $t_1 > t_0$ in presenza di sola **Convezione**

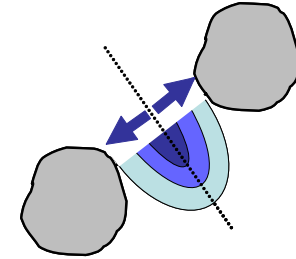


Distribuzione dell'inquinante al tempo $t_1 > t_0$ in presenza di **Convezione + Dispersione**

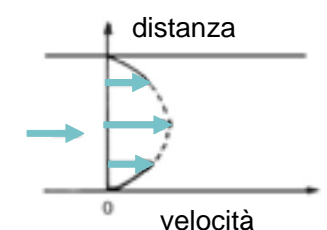
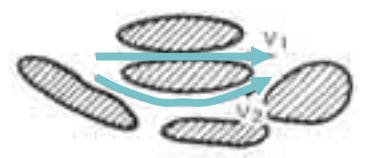
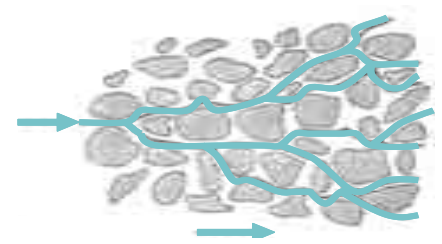
Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

La diffusione molecolare (D^M)

Movimento dovuto ai moti browniani che è regolato dal gradiente di concentrazione



La dispersione meccanica (D^{Mecc})

<p>Gradienti di velocità all'interno dei singoli pori in funzione della distanza</p>	
<p>differenza di ruvidità e di area delle pareti dei diversi pori (diversa velocità del bulk dalla soluzione)</p>	
<p>tortuosità e ramificazioni dei pori, che provocano fluttuazioni dei corsi d'acqua rispetto alla direzione media del flusso (dispersione longitudinale e trasversale).</p>	

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

La dispersione idrodinamica \longrightarrow È una grandezza tensoriale

$$\underline{\underline{D}}_{idro} = D^M + \underline{\underline{D}}^{Mecc}$$

Dipende dall'interazione del sistema
sostanza fluido e dalle caratteristiche
del mezzo poroso

Dipende solo
dall'interazione
sostanza-fluido

$$\underline{\underline{D}}^{Mecc} = \begin{vmatrix} D_{xx}^{Mecc} & D_{xy}^{Mecc} & D_{xz}^{Mecc} \\ D_{yx}^{Mecc} & D_{yy}^{Mecc} & D_{yz}^{Mecc} \\ D_{zx}^{Mecc} & D_{zy}^{Mecc} & D_{zz}^{Mecc} \end{vmatrix} \Rightarrow \underline{\underline{D}}^{Mecc} = \begin{vmatrix} D_{xx}^{Mecc} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy}^{Mecc} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz}^{Mecc} \end{vmatrix}$$

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

La dispersione idrodinamica

La dispersione meccanica è legata alla velocità

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{xx}^{Mecc} = D_{long}^{Mecc} = |u| \cdot \alpha_x \\ D_{yy}^{Mecc} = D_{trasv}^{Mecc} = |u| \cdot \alpha_y \\ D_{zz}^{Mecc} = D_{vert}^{Mecc} = |u| \cdot \alpha_z \end{array} \right. \longrightarrow \begin{array}{l} \text{Dispersività [m]} \\ \text{Coefficienti di} \\ \text{proporzionalità} \end{array}$$

Relazioni empiriche

- longitudinale (α_x)**
1. $\alpha_x = \text{cost}$ pari al 10% della lunghezza stimata del plume.
 2. $\alpha_x = f(x) = 0.1 \cdot x$ (Pickens and Grisak, 1981)

trasversale (α_y) Può essere indicata in rapporto ad α_x
($\alpha_y / \alpha_x = 0.10$)

verticale (α_z) Può essere indicata in rapporto ad α_x ($\alpha_z / \alpha_x = 0.001$)

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

I fenomeni di trasformazione dei contaminanti

■ processi chimico-fisici:

✓ *Adsorbimento/Desorbimento*

Trasferimento di massa del contaminante, dovuto ad interazioni di natura fisica e/o chimica all'interfaccia tra una fase fluida ed una fase solida del suolo.

✓ *Volatilizzazione*

Trasferimento di massa da una fase condensata alla fase gassosa del suolo.

■ processi biologici:

✓ *Biodegradazione*

Trasformazione biologica di contaminanti in altre sostanze, più, meno od ugualmente tossiche rispetto ai substrati di partenza.

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

I fenomeni di trasformazione dei contaminanti

■ processi chimici (1):

✓ *Scambio ionico*

Trasferimento di contaminante in forma ionica da una fase fluida ad una fase solida del suolo.

✓ *Idrolisi e sostituzione*

Reazione con acqua o suoi ioni costituenti (idrolisi) o con altri ioni (sostituzione), che trasformano il contaminante in un'altra specie chimica.

✓ *Precipitazione/Dissoluzione*

Rimozione dalla o aggiunta alla soluzione del suolo di soluto per formazione/dissoluzione di solidi.

✓ *Acido/Base*

Reazione con trasferimento di protoni, che determina ionizzazione e variazione di concentrazione di soluto in funzione del pH.

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

I fenomeni di trasformazione dei contaminanti

■ processi chimici (2):

✓ *Complessazione*

Combinazione con cationi o anioni per formare aggregati ionici detti complessi (aumenta la solubilità di metalli non fortemente adsorbiti).

✓ *Ossido-riduzione.*

Reazione con trasferimento di elettroni, che coinvolge elementi ai quali sia accessibile più di uno stato di ossidazione che possono determinare la precipitazione di alcuni metalli, ritardandone il trasporto. Le condizioni sono spesso ossidanti o parzialmente riducenti nel mezzo non saturo e nelle zone di alimentazione delle acque sotterranee, ma diventano riducenti in condizioni di saturazione quando si ha un eccesso di materia organica.

✓ *Decadimento radioattivo*

Decremento irreversibile dell'attività di un radionuclide dovuto a reazione nucleare; diventa significativo se il tempo di dimezzamento non supera il tempo di residenza del flusso della fase liquida nel sistema.

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

Soluzione dell'equazione del trasporto e della diffusione dei contaminanti nelle acque di falda

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_0 + \alpha_x |u|) \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_0 + \alpha_y |u|) \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(D_0 + \alpha_z |u|) \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \sum_i R_i$$

Obiettivo:

Determinare l'andamento della concentrazione:

- Regime transitorio → $c(x, y, z, t)$
- Regime stazionario → $c(x, y, z)$

Metodi:

- Integrazione analitica
- Integrazione numerica

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

Soluzione dell'equazione del trasporto e della diffusione dei contaminanti nelle acque di falda

■ Definizione e discretizzazione del dominio

- ✓ $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$
- ✓ $x_{\min}, x_{\max}, \dots, t_{\min}, t_{\max}$

■ Definizione dei parametri

$D_0, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$, eventuali parametri reattivi ...

■ Definizione delle condizioni al contorno e iniziali:

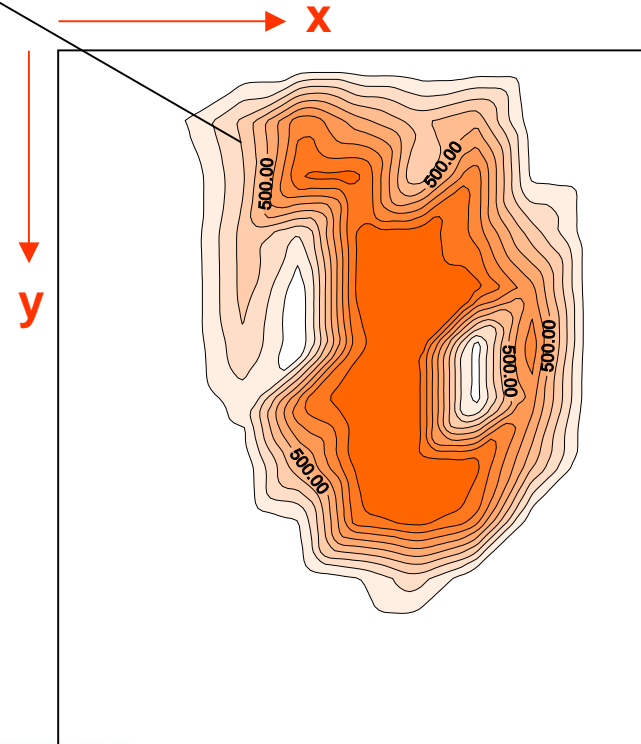
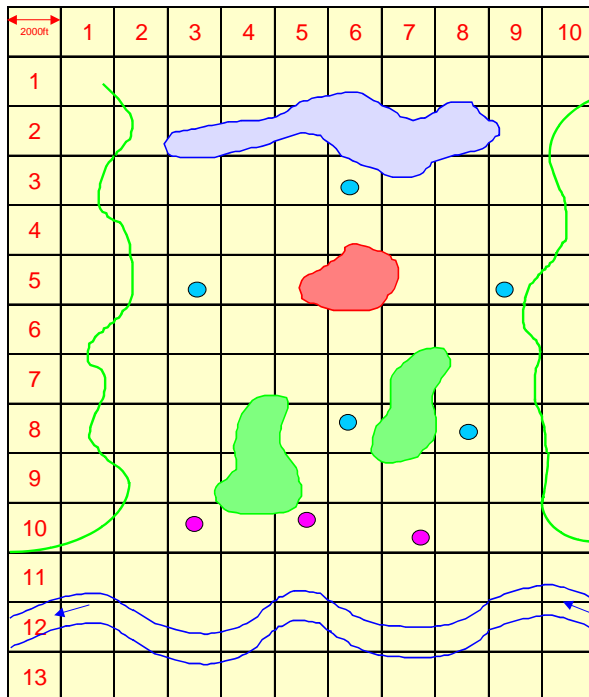
1. Limiti a concentrazione costante $c(x,y,z,t)=c^*$
2. Limiti a flusso imposto $\partial c / \partial x = j^*$ (si impone il gradiente)

Il trasporto e la diffusione dei contaminanti

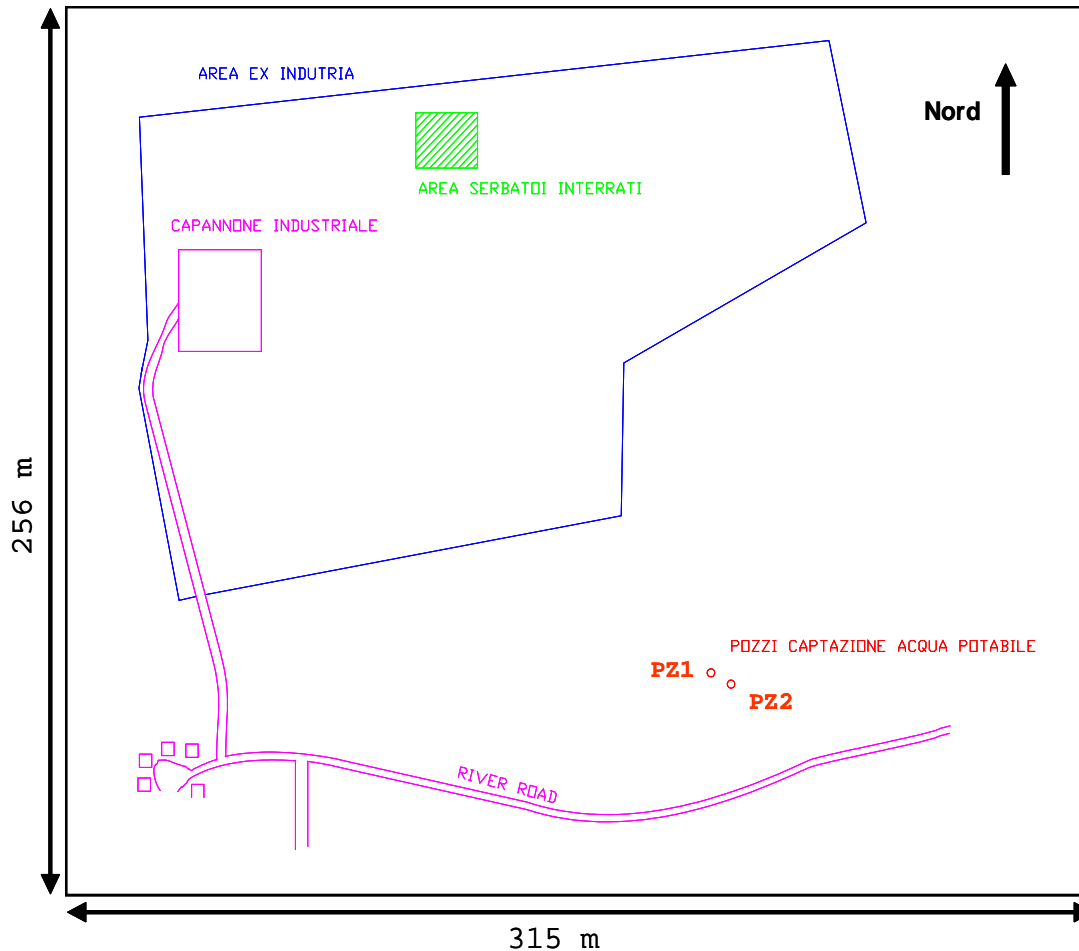
Soluzione dell'equazione del trasporto e della diffusione dei contaminanti nelle acque di falda

Esempio di risultato - Andamento della concentrazione

Curve a concentrazione costante (isoconcentrazione) $c(x,y,t^*)=c^*$



Case study – sito contaminato

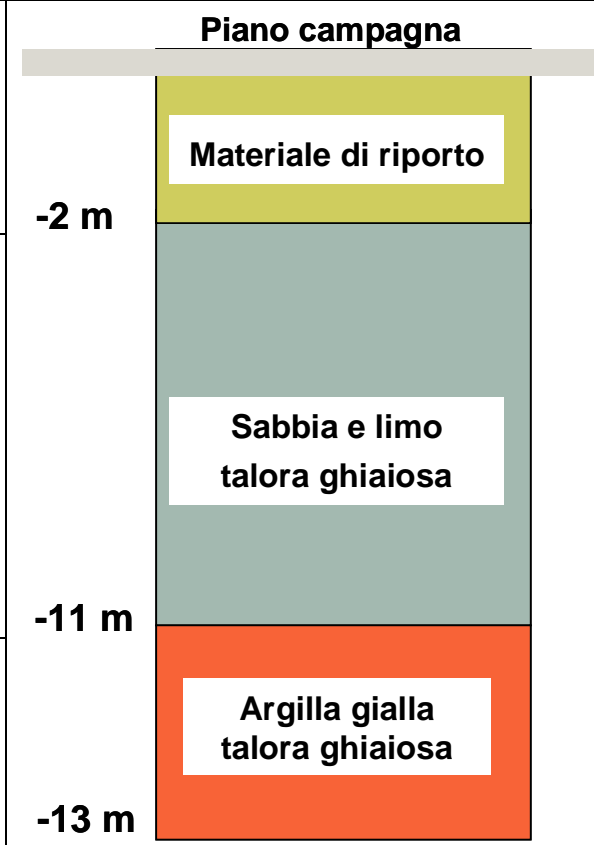


Sorgente di contaminazione:

- Serbatoi interrati perdenti TCE
- Durata del rilascio: 10 gg
- Concentrazione: 250 mg/l

Case study – sito contaminato

Stratigrafia (p.c. 146 mslm)

Prof. dal p.c	Litologia	Idrogeologia	Colonna stratigrafica
Da 0 a 2m	Materiale di riporto	Non saturo, mediamente permeabile	<p style="text-align: center;">Piano campagna</p> 
Da 2 m a 11m	Sabbia e limo talora ghiaiosa	Saturo, mediamente permeabile, sede di un acquifero freatico	
Da 11m a 13 m	Argilla gialla talora ghiaiosa	Non saturo, impermeabile	

Case study – sito contaminato

Caratteristiche idrogeologiche:

conducibilità idraulica (k_x , k_y , k_z)

porosità

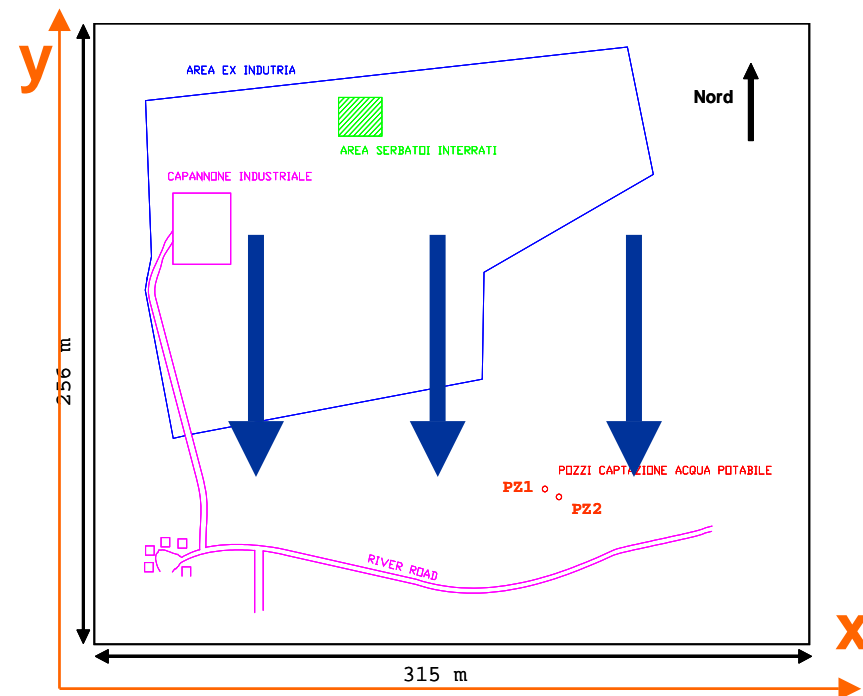
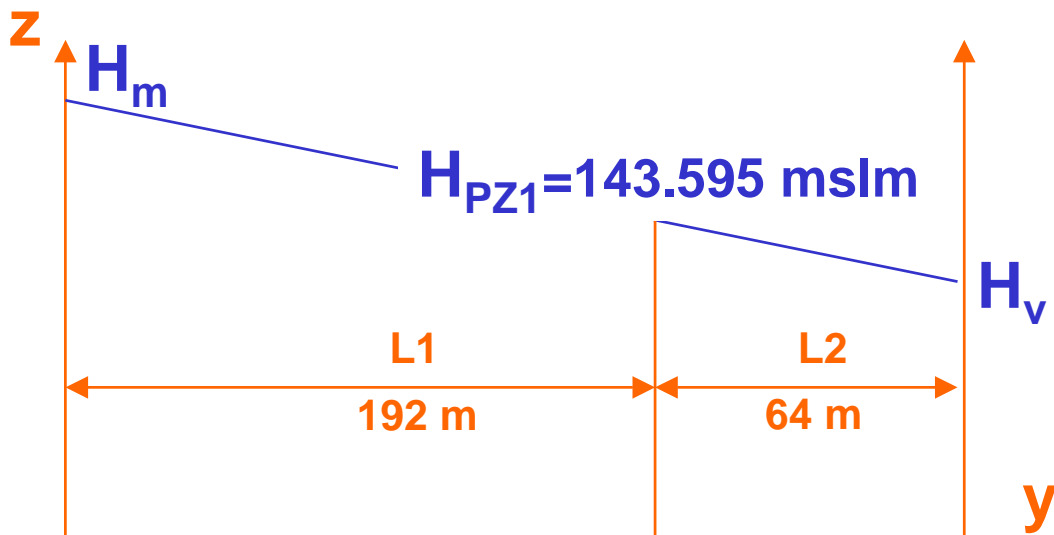
coefficienti di immagazzinamento

Parametro	Unità	1 LAYER	2 LAYER	3 LAYER
Conducibilità idraulica				
K_x	(m/sec)	1.0×10^{-5}	4.0×10^{-3}	2.0×10^{-6}
K_y	(m/sec)	1.0×10^{-5}	4.0×10^{-3}	2.0×10^{-6}
K_z	(m/sec)	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-4}	1.0×10^{-7}
S_s	(1/m)	0.0001	0.0082	0.0001
S_y	(-)	0.05	0.3	0.3
Porosità (n)	%	0.45	0.35	0.40
Porosità effettiva (n_{eff})	%	0.40	0.3	0.40

Case study – sito contaminato

Condizioni al contorno:

direzione media della falda: NS
 gradiente medio della falda: 0.00255
 H misurato in PZ1 -2.405 m dap.c.



$$H_m = H_{PZ1} + L_1 * j = 144.08 \text{ mslm}$$

$$H_v = H_{PZ1} - L_2 * j = 143.43 \text{ mslm}$$

Case study – sito contaminato

Parametri idrodispersivi dell'acquifero:

conducibilità idraulica (k_x , k_y , k_z)

porosità

coefficienti di immagazzinamento

Parametro	Unità	Valore
Dispersione longitudinale α_x	(m)	15
Rapporto α_y / α_x	(-)	0.1
Rapporto α_z / α_x	(-)	0.001
Coefficiente di diffusione molecolare	m ² /giorno	0

Riferimenti bibliografici

- ✓ **Bear J.** - *“Dynamics of fluid in porous media”* - Amer. Elsevier Env. Sci
- ✓ **G.P. Beretta** (1992) - *“Idrogeologia per il disinquinamento delle acque sotterranee”* – Pitagora Editrice
- ✓ **Gilbert Castany** (1985) – *“Idrogeologia: principi e metodi “* – Dario Flaccovio Editore
- ✓ **Henderson-Sellers** – *“Environmental lymnology”*
- ✓ **Hillel, D.** (1982). *Introduction to Soil Physics*. Academic Press.
- ✓ **Hillel D.** – *“Application of soil physics”* – Academic Press
- ✓ **Viotti P.** (1999) *“Dispense del Corso di Dinamica degli Inquinanti”* – D.I.T.S. – Università degli Studi di Roma “La Sapienza” (disponibili sul web <http://w3.uniroma1.it/dits/docenti/viotti/viotti.htm>)
- ✓ **Wang H.F. and M.P. Anderson** – *“Introduction to groundwater modeling”* – W.H. Freeman and Co.