A. RUSSO SPENA(*)

TRASPORTO DI INQUINANTI IN MEZZI POROSI

Il moto di soluzioni acquose attraverso i meati di un sistema filtrante poroso è usualmente analizzato associando alle equazioni che reggono il moto globale della miscela quelle che descrivono il moto dei singoli soluti, la cui presenza è espressa in termini di concentrazione locale c (massa di soluto contenuta nella unità di volume della soluzione) o di concentrazione massica c_m (rapporto tra le masse di soluto e di soluzione, riferite entrambe all'unità di volume della soluzione).

In condizioni non stazionarie, nel dominio sede del fenomeno di trasporto, la concentrazione c, o equivalentemente la frazione massica c_m dei singoli soluti, varia con il posto e con il tempo: tale variazione è determinata sia dal moto medio della soluzione, sia dal trasporto molecolare, sia, infine, da reazioni chimiche tra soluto e solvente.

Per un sistema filtrante macroscopicamente omogeneo, caratterizzato da porosità di volume ε occupata solo parzialmente dalla soluzione, il principio di continuità, per il soluto (o per ciascuno dei soluti se ve ne fossero diversi) assume la forma:

$$\rho_m \theta \frac{Dc_m}{Dt} = -\nabla \cdot \vec{j} + P \qquad (1)$$

ovvero, equivalentemente, la forma:

$$\frac{\partial c\theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (c\theta\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{j} + P \qquad (2)$$

dove si è indicato con: t il tempo; ρ_m la densità della soluzione; θ il volume della soluzione nella unità di volume del mezzo poroso; $\vec{v}$ la velocità della soluzione; $\vec{j}$ la densità del flusso di soluzione; P un termine di *produzione* o di *rimozione* del soluto per reazioni chimiche o biochimiche.

Il termine $\vec{j}$ è usualmente considerato come somma di quattro vettori componenti: densità di flusso dovuto alla diffusione ordinaria, che dipende dai gradienti di concentrazione delle varie specie presenti; diffusione dovuta alla presenza di gradienti di pressione (di entità usualmente trascurabile); diffusione forzata, che può aversi se le varie specie sono sottoposte a campi di forza diversi; diffusione termica, dovuta a gradienti di temperatura.

Considerando predominante la diffusione ordinaria, questa è espressa nella forma della 1ª Legge di Fick:

$$\vec{j} = D\theta\, \nabla \rho_m c_m \qquad (3)$$

nella quale il *coefficiente di diffusione apparente D* porta in conto sia la *diffusione molecolare* D_m sia la *dispersione meccanica* D_d dovuta al moto della soluzione nei meati del mezzo.

La (1) indica che, in assenza di flusso di diffusione e di termini di produzione o di rimozione, la derivata sostanziale rispetto al tempo di c_m è nulla. In questa condizione, la composizione di ciascun volume elementare della soluzione si mantiene costante durante il moto e le eventuali variazioni locali di concentrazione (in un volume arbitrario dello spazio), sono dovute al moto effettivo della soluzione.

Nella impossibilità di pervenire ad una completa caratterizzazione del sistema filtrante, gli effettivi spostamenti della soluzione vengono sostituiti con un moto medio globale: lo spazio occupato dal sistema filtrante viene cioè trattato come se fosse per intero occupato dalla soluzione alla quale viene attribuita una velocità che, in assenza di campo elettrico e di significativi fenomeni chimico-fisici e con riferimento a mezzi isotropi dotato di microstruttura geometrica interna indeformabile e a situazioni in cui sia possibile prescindere dagli effetti di inerzia, è data dalla relazione di Darcy (1856):

$$\vec{q} = K\vec{I} \qquad (4)$$

la quale esprime che la velocità di filtrazione $\vec{q}$ è proporzionale alla pendenza motrice $\vec{I}$.

La costante K ha le dimensioni di una velocità e dipende dalla *permeabilità* (propriamente detta) del mezzo e dalle proprietà del fluido. Risulta, cioè:

$$K = K(\mu, \gamma, d) \qquad (5)$$

dove μ e γ sono rispettivamente il coefficiente di viscosità dinamica e il peso specifico del liquido, mentre d è una dimensione media (efficace) del sistema filtrante,

(*) Dipartimento di Ingegneria delle Strutture, delle Acque e del Terreno - Università de L'Aquila.

determinata con procedimenti vari (ma tutti egualmente arbitrari) dall'analisi granulometrica del mezzo poroso.

I principi dell'analisi dimensionale applicata alla (5) forniscono per K l'espressione:

$$K = c\frac{\gamma}{\mu}d^2 = k\frac{\gamma}{\mu} \tag{6}$$

Al prodotto $cd^2 = k$ - dipendente solo dalle caratteristiche del mezzo poroso - si dà il nome di *coefficiente di permeabilità*.

La (6), introdotta nella (4) dà luogo a:

$$q = cd^2\frac{\gamma}{\mu}I \tag{7}$$

Il coefficiente k ha le dimensioni di un'area ed è misurato in *darcy*: un mezzo poroso ha permeabilità k pari a 1 *darcy* quando un fluido omogeneo, di viscosità $\mu = 1cP$ che ne satura completamente i pori, muove in esso con la velocità di $1\,cm^3/s/cm^2$ sotto il gradiente di pressione di *1 atm / cm* (BEAR, 1972).

La (7) ha un campo di validità i cui limiti possono essere dedotti avvalendosi della relazione generale:

$$\gamma I = f(\mu, \rho, q, d)$$

dalla quale, con i metodi della analisi dimensionale, si trae:

$$\gamma I = \lambda(\mathrm{Re})\rho q^2 d^{-1} \tag{8}$$

dove il numero di resistenza λ è funzione del numero di Reynolds *Re* qualificato in base alla dimensione d ($\mathrm{Re} = \rho q d / \mu$) o, come proposto da WARD (1964), dalla espressione $\mathrm{Re} = \rho q k^{\frac{1}{2}} / \mu$ nella quale figura, in luogo della dimensione efficace d, la permeabilità k del materiale.

Il numero di Reynolds può essere interpretato come rapporto tra la energia cinetica del liquido e la perdita di energia cinetica condizionata dal lavoro delle forze di viscosità su una lunghezza stabilita: esso, quindi, caratterizza il ruolo relativo della inerzia e della viscosità del liquido durante il moto. Elevati valori di Re indicano che è prevalente il ruolo svolto dall'energia cinetica; bassi valori di Re indicano al contrario che è la viscosità ad assumere il ruolo principale.

Il numero Re contiene una lunghezza e una velocità caratteristiche che non sono univocamente definite; esso, di conseguenza, è affetto da larga arbitrarietà. Nel caso di moti di filtrazione, numeri Re>> 1 caratterizzano un moto nel quale gli effetti viscosi assumono un ruolo secondario.

Con la (8), la determinazione della legge del moto è ricondotta alla individuazione del legame funzionale tra le due variabili adimensionali λ e *Re*. A questo scopo, per un dato sistema filtrante caratterizzato da permeabilità k, basterà una serie di esperienze che può essere effettuata facendo variare da una prova all'altra il numero di Reynolds; la $\lambda(\mathrm{Re})$ determinata per via sperimentale potrà eventualmente tradursi in una espressione analitica che interpola i dati sperimentali a mezzo delle normali procedure della statistica.

Se si esprime la $\lambda(\mathrm{Re})$ nella forma monomia:

$$\lambda = \frac{N}{\mathrm{Re}^b}$$

(essendo N una costante adimensionale) e si pone n=2-b, dalla (8) si trae:

$$\gamma I = Nq^n d^{n-3}\mu^{2-n}\rho^{n-1} \tag{9}$$

Per valori di *Re* per i quali le forze di inerzia sono trascurabili è $n=1$ e la (9) diviene:

$$q = \frac{1}{N}\frac{\gamma}{\mu}d^2 I$$

coincidente con la (7) quando si ponga $N=1/c$; essa consente pertanto di limitare il campo di validità della (7) ai valori di $\mathrm{Re} < 1$.

L'esame dei diagrammi (q, I) di fig.1 (KUTILEK, 1969) pone peraltro in evidenza che la legge di Darcy può cadere in difetto anche per valori di *Re* minori di 1; il comportamento non-darciano del moto è, probabilmente, dovuto alla influenza di quei fenomeni (elettrici, chimico-fisici, biologici) esplicitamente trascurati nella caratterizzazione del sistema filtrante.

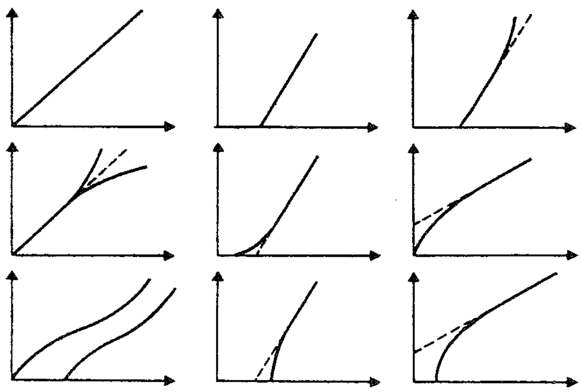

Figura 1

Per valori del numero di Reynolds tali da rendere confrontabili gli effetti della inerzia e della viscosità sul moto (1<n<2), FORCHHEIMER (1901) propose di adottare la relazione:

$$I = aq + bq^2 \tag{10}$$

essendo a e b due costanti. La relazione empirica di

FORCHHEIMER (1901) è stata teoricamente giustificata da IRMAY (1958).

Infine, per valori di Re per i quali sono predominanti le forze di inerzia è $n=2$ e la (9) diviene:

$$I = 2N\frac{q^2}{2gd} \tag{11}$$

coincidente con la nota legge del moto uniforme di correnti idriche in pressione (Darcy-Weisbach), quando si ponga:

$$\lambda = \frac{2N}{\mathrm{Re}^{2-n}}$$

La velocità di filtrazione rappresenta, come noto, una media sul volume del vettore velocità; la velocità effettiva del fluido nei pori v_p può essere espressa (BACHMETEFF & FEODOROFF, 1937) come:

$$q_p = \frac{q}{\varepsilon^{2/3}}$$

Il numero di Reynolds e il numero di resistenza corrispondenti valgono rispettivamente:

$$\mathrm{Re}_p = \mathrm{Re}/\,\varepsilon^{1/3} \text{ e } \lambda_p = \lambda\,\varepsilon^{5/3}$$

La legge di Darcy, dedotta sperimentalmente per processi di moto di filtrazione unidirezionali, si presta ad una ovvia estensione a processi di moto entro mezzi porosi (statisticamente) omogenei ed isotropi: essa indica infatti che, in presenza di forze di massa derivanti dal potenziale gravitazionale gz, $\vec{q}$ deriva dal *potenziale di velocità*:

$$\varphi = Kh + \text{costante}$$

dove è: $h = z + \frac{p}{\gamma}$ (con p pressione della fase liquida) e la costante è da ritenersi arbitraria.

Con questa posizione la relazione di Darcy assume la forma:

$$\vec{q} = -k\frac{\gamma}{\mu}\nabla h \tag{13}$$

e mostra che i vettori $\vec{q}$ e ∇h sono collineari e che il vettore $\vec{q}$ in un punto è perpendicolare alla equipotenziale h = *costante* passante per quel punto.

I mezzi porosi omogenei ed isotropi devono essere considerati come una astrazione matematica alla quale è comodo ricorrere in quanto consente di evidenziare, in modo semplice e chiaro, talune condizioni che, in opportune circostanze, possono essere estese anche ai molto più complessi sistemi filtranti naturali. Questi, nelle applicazioni correnti (in particolare nel campo della ingegneria civile), pur potendo essere considerati omogenei, risultano statisticamente anisotropi dal punto di vista della permeabilità.

In queste condizioni si ammette di poter sostituire la (12) con la:

$$\vec{q} = -\underline{\underline{k}}\frac{\gamma}{\mu}\nabla h \tag{14}$$

essendo $\underline{\underline{k}}$ il *tensore di permeabilità relativa*, di secondo ordine simmetrico e definito positivo.

Anche per la (14), così come per la (13), appare necessaria la definizione dei limiti di validità: a differenza di quanto avviene per un mezzo isotropo, tuttavia, le determinazioni sperimentali relative a moto di filtrazione in mezzo anisotropo non forniscono tutte le indicazioni necessarie allo scopo; da esse, peraltro, sembra accertato che, per valori del numero di Reynolds maggiori dell'unità, la (14) debba essere emendata per l'aggiunta di un termine funzione di Re.

Il complesso argomento è affrontato da KNUPP & LAGE (1995), che ottengono la estensione della (14) come soluzione di un problema di minimizzazione della potenza meccanica in termini di variabili dinamiche e, di conseguenza, per legami $(\vec{q}, \nabla h)$ invertibili; lo stesso problema è affrontato in un lavoro in corso di pubblicazione (RUSSO SPENA & VACCA) nel quale gli Autori ottengono la estensione della (14) come soluzione di un problema di minimizzazione della potenza meccanica dissipata in termini di variabili cinetiche anche per legami $(\vec{q}, \nabla h)$ non invertibili.

Per valori di $Re<1$, la (14) mostra che $\vec{q}$ e ∇h non sono in genere collineari e che $\vec{q}$ in un punto non è perpendicolare alla equipotenziale passante per quel punto.

E' possibile d'altra parte istituire una corrispondenza tra il mezzo uniformemente anisotropo - caratterizzato dai tre valori principali della permeabilità relativa (k_1, k_2, k_3) nelle direzioni 1,2,3 - e un equivalente mezzo isotropo uniforme di permeabilità $\hat{k} = \sqrt[3]{k_1 k_2 k_3}$ (MUSKAT, 1937). In tal modo, nei punti corrispondenti dei due mezzi, tra la velocità $\vec{q}$ e quella $\hat{\vec{q}}$ del mezzo isotropo corrispondente, sussiste la relazione:

$$\hat{q}_i = (\hat{k}/k_i)^{1/2} q_i \quad i = \{1,2,3\} \tag{15}$$

Nella determinazione dell'inquinamento dei terreni o delle acque di falda assumono particolare importanza i contaminanti a struttura chimica relativamente stabile. In questi casi possono essere trascurati i fenomeni di trasformazione e di rimozione naturale di tipo chimico e biologico, mentre diviene controllante il fenomeno di adsorbimento. Quest'ultimo presiede a molti meccanismi irreversibili di trasformazione e di accumulo dell'inquinante stesso sui granuli del terreno o sugli apparati radicali delle piante.

La quantità S di sostanza adsorbita per unità di peso dell'adsorbente, all'equilibrio, dipende essenzialmente dalla concentrazione dei soluti, dalla natura e dalla concentrazione dei soluti competitivi, dalla natura della soluzione.

La correlazione tra quantità adsorbita e concentrazione del soluto nella soluzione, a temperatura costante e in condizioni di equilibrio, è espressa dalla *isoterma di adsorbimento*. Nei casi in cui, come avviene per i terreni, sono in gioco energie superficiali eterogenee, la isoterma che di solito meglio si presta ad esprimere tale correlazione è quella di *Freundlich:*

$$S = k_s c^n \quad (16)$$

dove le costanti k_s e n esprimono, rispettivamente, la misura del numero totale di siti disponibili per l'adsorbimento e l'intensità dell'adsorbimento.

Per portare esplicitamente in conto questo fenomeno la (2) viene completata con un termine di accumulo del soluto sulla matrice solida: tale accumulo nell'unità di tempo, è espresso da $\partial \rho_s S / \partial t$, essendo ρ_s la densità del mezzo poroso.

Relativamente a soluzioni molto diluite, che di fatto sono all'origine di numerose situazioni di inquinamento, è lecito attribuire all'esponente della isoterma il valore *n=1*: con tale posizione si ammette che il fenomeno dell'inquinamento sia insensibile alle variazioni di concentrazione del soluto nella soluzione.

Nel dominio monodimensionale, assunto costante il contenuto volumetrico η , la (2) si riscrive nella forma:

$$(1+\rho_s k_s / \theta)\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{P}{\theta} \quad (17)$$

avendo posto $v = q / \theta$.

Il termine R=$(1+\rho_s k_s / \theta)$ è denominato *fattore di ritardo* ed esprime lo sfasamento con il quale il fronte dell'inquinamento si muove rispetto a quello della soluzione.

Per moti stazionari della soluzione, la (17) diventa:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - k_0 \frac{\partial c}{\partial x} + k_1 c \quad (18)$$

dove si è posto: $D_0 = D / R$; $k_0 = q / R\theta$; $k_1 = \zeta / R\theta$ avendo assunto per *P* una reazione del primo ordine (*P=*ζc) di rimozione dell'inquinante.

Alla (18) possono essere riportate situazioni anche più complesse.

Dal punto di vista analitico, lo studio dei fenomeni retti dalla (18) è ricondotto alla determinazione del valore *c(x,t)* nella striscia $x \in [0,l]$; t>0, soddisfacente ad assegnate condizioni iniziali e al contorno.

Le condizioni iniziali sono usualmente assegnate nella forma:

$$c(x,t_0) = f(x) \quad (19)$$

in cui f(x) è una funzione generalmente continua; le condizioni ai limiti vengono definite in relazione ai diversi regimi temporali imposti alla *c(x , t)* o alle sue derivate in corrispondenza degli estremi *x=0* e *x = l* del dominio spaziale.

Tali condizioni, nei casi di maggiore interesse applicativo, si riportano ad assegnare, nell'intervallo $\left[t_0, t_f\right]$ durante il quale si studia il fenomeno e in corrispondenza dell'uno o dell'altro estremo (o di entrambi gli estremi) del dominio: la funzione *c(t)*, che in particolare può essere costante nel tempo; la funzione $\partial c / \partial x$; la relazione tra la derivata spaziale della funzione e la funzione stessa.

Poiché agli estremi del dominio possono prevedersi combinazioni diverse di queste condizioni, il numero di casi da esaminare è grande.

E' da considerare il caso degenere in cui la lunghezza *l* del dominio è tale che, per valori di *t* nell'intervallo $\left[t_0, t_f\right]$non molto elevati, l'influenza del regime imposto al contorno *x=0* praticamente non si riscontra all'estremo *x = l* dove *c(l , t)* è determinato solo dalle condizioni iniziali.

In queste condizioni il dominio spaziale è detto *illimitato da un lato.*

I risultati delle ricerche svolte sull'argomento nell'ambito del Dipartimento di Ingegneria delle Strutture, delle Acque e del Terreno della Facoltà di Ingegneria dell'Università di L'Aquila (RUSSO SPENA, 1994), consentono di comprendere e seguire le vicissitudini di molte categorie di inquinanti (sostanze organiche a struttura molto stabile (pesticidi), metalli pesanti, microrganismi patogeni), se si pone l'attenzione su alcuni parametri significativi (fattore di ritardo, coefficiente di adsorbimento, velocità di transito delle soluzioni, coefficiente di diffusione, termine di rimozione) che ne influenzano il trasporto nel terreno.

A titolo di esempio nella fig. 2 sono riportati i rapporti di diluizione ricavati integrando in forma analitica la (18) per un sistema caratterizzato da *D=1.5* cm^2 / ora , $\rho_s = 1.3 g / cm^3$, $k_s = 2.5 cm^3 / g$, *l=30 cm.* Sugli stessi disegni sono riportati con cerchietti pieni i risultati conseguiti da SELIM & MANSELL (1974) con diverso procedimento di risoluzione.

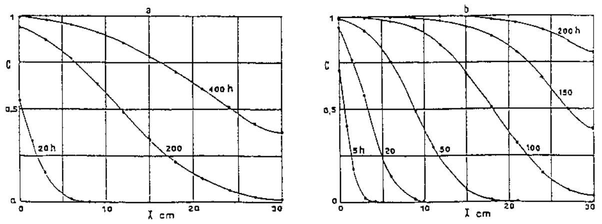

Figura 2

Nella fig. 3 successiva sono infine riportati i risultati dei calcoli relativi ad un sistema illimitato da un lato.

Le situazioni esaminate consentono di porre in evidenza il peso esercitato sulla evoluzione del fenomeno dalla velocità di filtrazione della fase liquida.

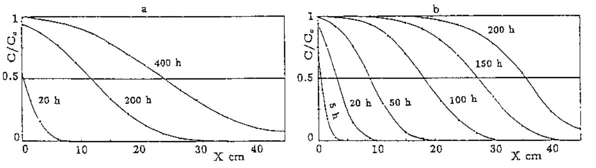

Figura 3

Sembra opportuno rilevare che alcune deduzioni quantitative relative a situazioni di pratico interesse nel campo degli interventi a carattere preventivo di protezione o di bonifica sono state ottenute (FUMAROLA, 1992) seguendo la impostazione poco sopra richiamata del problema del trasporto di inquinanti e utilizzando le soluzioni che hanno consentito di dedurre i risultati sintetizzati nella figura 3.

BIBLIOGRAFIA

BACHMETEFF B.A. & FEODOROFF N.V. (1937) - *Flow through granular media*. J. Appl. Mech.

BEAR J. (1972) - *Dynamics of flow in porous media*. American Elsevier, N.Y.

FUMAROLA G. (1992) - *Contaminazione di terreni e risorse idriche sotterranee*. La Chimica e l'Industria.

KNUPP P.M. & LAGE J.L. (1995) - *Generalization of the Forchheimer-extended darcy flow model to the tensor permability case via a variational principle*. J. Fluid Mech.

KUTILEK M. (1969) - *Non darcian flow of water in soils (laminar region)*. 1st IAHR Symp. Fundamentals of transport phenomena in porous media, Haifa (Is).

IRMAY S. (1958) - *On the theoretical derivation of Darcy and Forchheimer formulas*. Trans. Am. Geophis. Un.

MUSKAT M. (1937) - *The flow of homogeneous fluid through porous media*. Mc Graw Hill, N.Y.

RUSSO SPENA A. (1994) - *Fenomeni di trasporto di sostanze inquinanti in mezzi porosi saturi*. In: *Moto dei fluidi negli ammassi filtranti*. Istituto di Idraulica, Univ. di Bologna.

RUSSO SPENA F. & VACCA A. (in press) - *A variational approach to a class of non-darcy flows*.

SELIM H.M. & MANSELL R.S. (1976) - *Analytical solution of the equation for transport of reactive solute through soils*. Water Resources Resarch.

WARD J.C. (1964) - *Turbulent flow in porous media*. J. Hydraulic Div. ASCE (HY 5).