

APPENDICE T

MODELLI ANALITICI E NUMERICI PER IL TRASPORTO DEI CONTAMINANTI IN ZONA SATURA

Ing. Antonella Vecchio
APAT

Appendice T - Contenuti

Confronto modelli analitici – modelli numerici

Utilizzo di **modelli analitici e numerici** per la simulazione del fenomeno di trasporto dei contaminanti in falda:

- Modello analitico: **Modello di Domenico**
- Modello numerico: **FeFlow 5.3x**

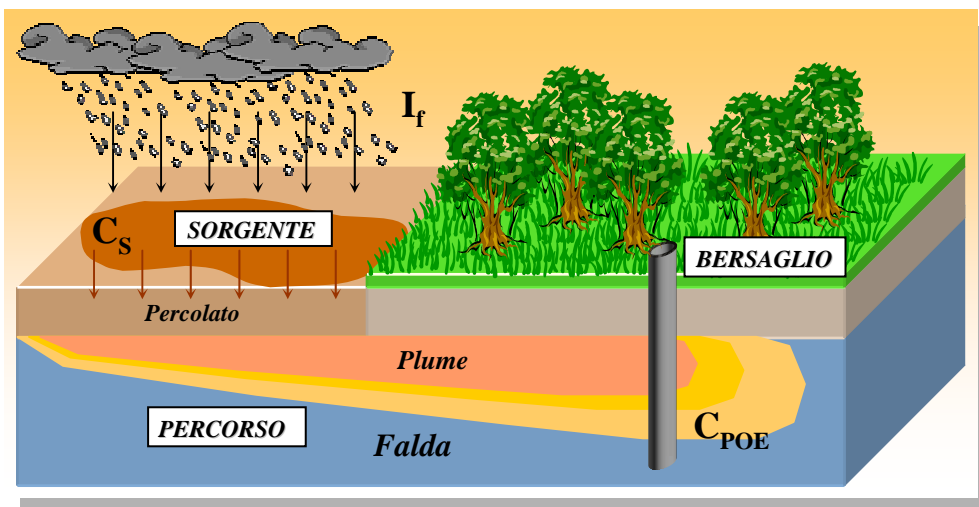
Simulazioni effettuate

Scenari di trasporto/attenuazione degli inquinanti:

- Simulazioni con diverse ipotesi sulla dispersione degli inquinanti in falda
- Simulazioni tenendo conto o meno dei fenomeni di degradazione chimica/biologica degli inquinanti (decadimento)

Valutazione del rischio associato al trasporto degli inquinanti nei diversi scenari di trasporto/attenuazione

Meccanismi di trasporto/attenuazione



MECCANISMI DI ATTENUAZIONE IN FALDA

➤ **NON DISTRUTTIVI**:
 Convezione
 Dispersione
 Diffusione
 Ritardo

➤ **DISTRUTTIVI**: Degradazione

Equazioni generali del trasporto in falda

Equazioni di trasporto

Le equazioni di trasporto in falda sono le seguenti:

- Equazione di moto del fluido: **Equazione della filtrazione o Equazione di Richards**
- Equazione di trasporto dei contaminanti: **Equazione del moto convettivo/dispersivo o ADE Equation ("Advection Dispersion Equation")**

Le due equazioni di trasporto servono a descrivere rispettivamente:

- il moto del fluido (**acqua**) in un mezzo poroso (**terreno permeabile per porosità**)
- il moto delle sostanze (**contaminanti**) nel fluido (**acqua**)

Equazione di Richards (1)

Ipotesi

Analisi monofase: l'unica fase in movimento è la fase liquida (**acqua**); l'eventuale fase aeriforme presente è a pressione costante.

Campo di moto e di pressione: conoscenza nell'intorno della porzione di acquifero esaminata (**dominio di studio**) del campo di moto (**velocità**) e di pressione (**carico idraulico**).

Caratteristiche dell'acquifero: conoscenza delle proprietà dell'acquifero (**conducibilità idraulica, trasmissività**) in ogni punto del dominio di studio.

Legge di conservazione della massa: la massa d'acqua in uscita deve eguagliare la diminuzione subita dalla massa stessa all'interno di un volume elementare (**v.e.**).

$$\frac{\partial(\rho \theta_w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = \pm W$$

Equazione di Richards (2)

$$\frac{\partial(\rho \theta_w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = \pm W$$

Variazione della massa nel tempo
Nel saturo $\theta_w = \theta_T$

Flusso di massa in uscita

Termine generativo (pozzi/sorgenti)

Variazione massa nel tempo: l'aumento (immagazzinamento) o riduzione della massa d'acqua nel tempo è dovuta alla variazione del grado di saturazione del mezzo (terreno insaturo), alla variazione della porosità con la pressione (deformazione/consolidazione in mezzo saturo), alla variazione della densità del fluido (temperatura, concentrazione sostanze disciolte).

Termine generativo: considera la presenza di pozzi (riduzione della massa) o sorgenti/ricariche (aumento della massa) nel dominio studiato.

Flusso di massa: vale la Legge di Darcy

$$v_i = -K_i \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad \text{con } x_i = x, y, z$$

Meccanismi di trasporto

ADE Equation (1)

Convezione ("Advection"): in scala microscopica le particelle di soluto si muovono con la stessa velocità dell'acqua all'interno dei pori ovvero **il trasporto degli inquinanti non influenza il modello del flusso di falda;** la velocità di flusso è pari alla **"velocità efficace"**

$$v_{e,i} = \frac{v_i}{\theta_e}$$

con

$v_{e,i}$ = velocità efficace ($i = x, y, z$)

v_i = velocità di Darcy ($i = x, y, z$)

θ_e = porosità efficace

Dispersione idrodinamica: si compone di due processi la **diffusione molecolare** (indipendente dal trasporto e dovuta a variazioni di concentrazione) e **dispersione meccanica** (dovuta a variazioni locali della velocità del flusso). Si ipotizza una **relazione lineare** tra il coefficiente di dispersione meccanica e la velocità del flusso. Il coefficiente di proporzionalità è dato dalla **"dispersività"**

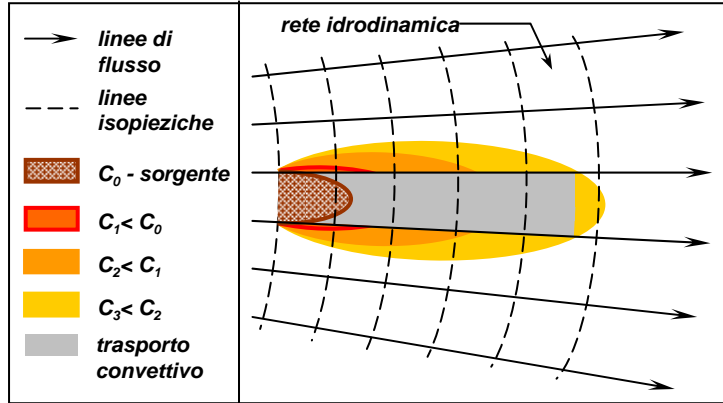
$$D_i = D_0 + \alpha_i \cdot v_{e,i}$$

con

α_i = dispersività ($i = x, y, z$)

D_0 = coeff. di diffusione

Meccanismi trasporto in falda (1)



CONVEZIONE + DISPERSIONE IDRODINAMICA

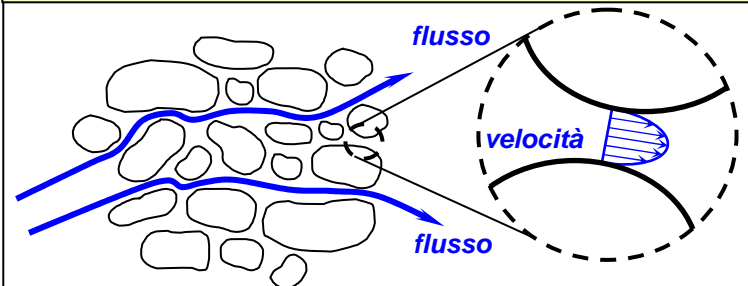
Dispersione Idrodinamica
 il contaminante si "disperde" al di fuori della regione in cui si muoverebbe per effetto della sola convezione

Convezione ("Advection")
 il contaminante viene veicolato dal flusso di falda lungo la direzione del moto

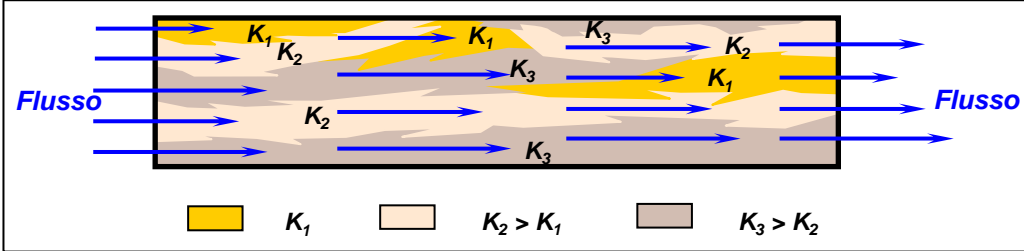
Dispersione Meccanica
 il contaminante si disperde lungo la direzione di moto a causa della tortuosità dei pori e di disomogeneità locali

Diffusione molecolare
 il contaminante si diffonde per effetto del gradiente di concentrazione

Variatione di velocità in scala microscopica
 TORTUOSITA' + REGIMI DI FLUSSO TRA I PORI



Variatione di velocità in scala macroscopica
 VARIAZIONI LOCALI DELLA CONDUCIBILITA' IDRAULICA



$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_{e,x} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{e,y} \frac{\partial C}{\partial y} - v_{e,z} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial t} \pm r$$

Termine dispersivo

Termine convettivo

Termine generativo
(trasformazione inquinanti)

Termine generativo: considera i meccanismi di trasformazione degli inquinanti

- Degradazione del primo ordine: degradazione chimica e/o biologica degli inquinanti.
- Ritardo: anche se a livello microscopico le particelle si muovono con la stessa velocità del fluido, l'interazione con le particelle di suolo (adsorbimento/rilascio) provoca a scala macroscopica una riduzione della velocità media degli inquinanti rispetto alla velocità media della falda ("ritardo").

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_{e,x} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{e,y} \frac{\partial C}{\partial y} - v_{e,z} \frac{\partial C}{\partial z} = R \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C$$

ADE Equation (2)

Ritardo

Degradazione

Meccanismi di attenuazione in falda (2)

DEGRADAZIONE DEL 1° ORDINE

La riduzione percentuale di massa di contaminante è data da:

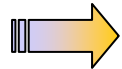
$$\frac{dM}{M} = \lambda * dt$$

Integrando e passando alle concentrazioni si ottiene:

$$C = C_0 * e^{-\lambda * t}$$

COSTANTE DI DECADIMENTO

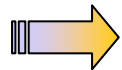
$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{0,5}}$$



volume di contaminante che si è consumato nella reazione per unità di volume e per unità di tempo

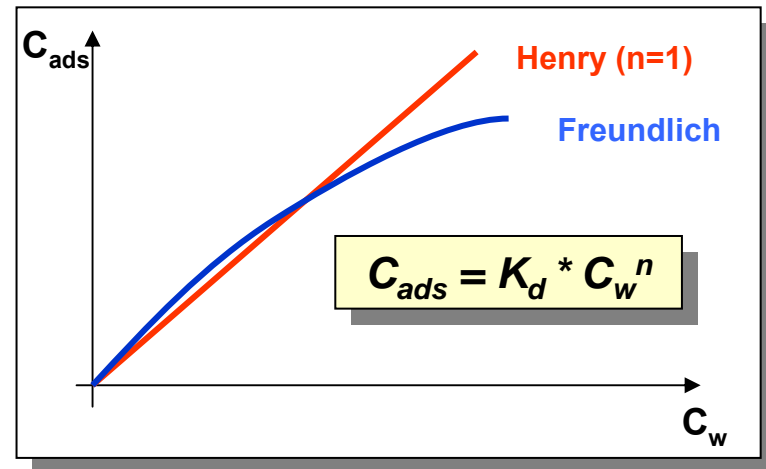
TEMPO DI EMIVITA

$$t_{0,5}$$

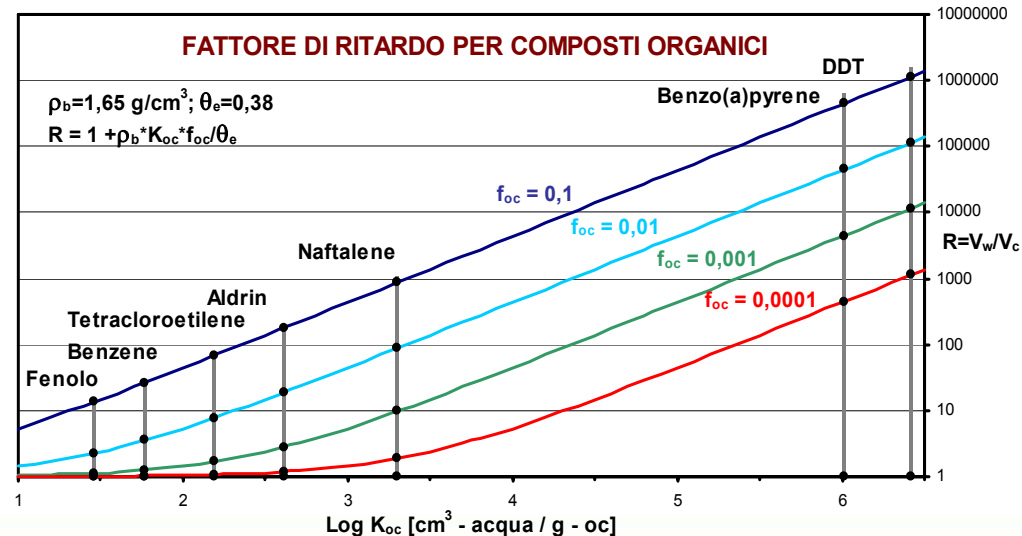


tempo in cui la concentrazione di contaminante si riduce alla metà di quella iniziale

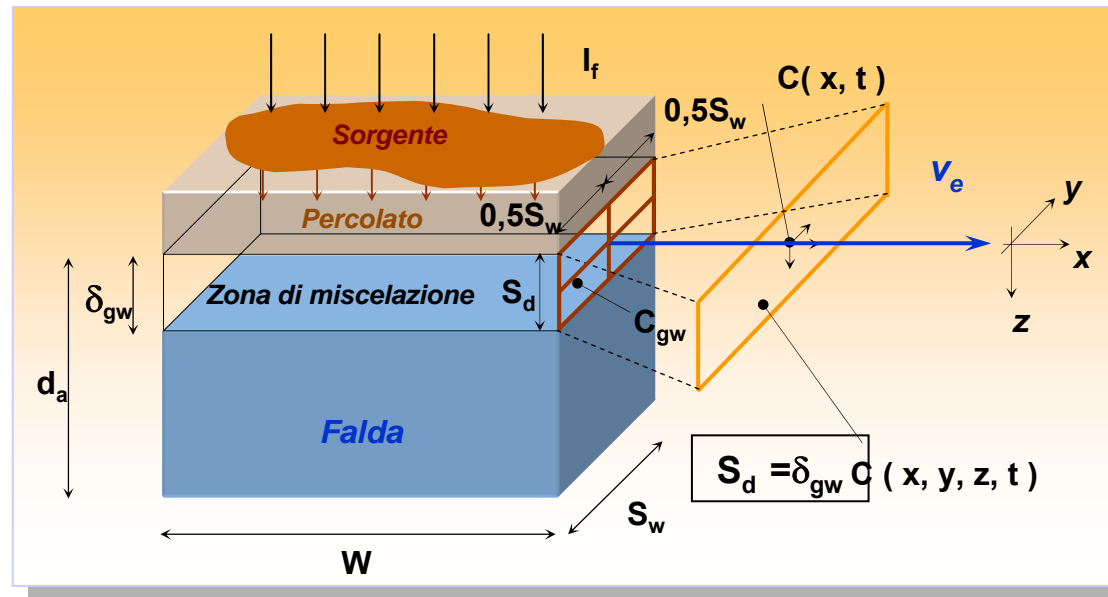
ADSORBIMENTO



FATTORE DI RITARDO PER COMPOSTI ORGANICI



Soluzione analitica dell'ADE



Soluzione di Domenico - Ipotesi

- Acquifero superficiale omogeneo ed isotropo
- Sorgente rettangolare e continua
- Flusso 1-D con v_e uniforme e Dispersione 3-D
- Decadimento del 1° ordine (opzionale)
- Diffusione molecolare trascurabile $\Rightarrow D \cong \alpha^* v_e$

Equazione di Domenico (1)

**Soluzione generale
nel transitorio**

$$\frac{C(x, y, z, t)}{C_{gw}} = \frac{1}{8} \exp \left[\frac{x}{2\alpha_x} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}} \right) \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{R \cdot x - v_e \cdot t \cdot \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}}}{2\sqrt{\alpha_x \cdot v_e \cdot R \cdot t}} \right) \cdot \left[\operatorname{erf} \left(\frac{y + 0,5S_w}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - 0,5S_w}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erf} \left(\frac{z + 0,5S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{z - 0,5S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right) \right]$$

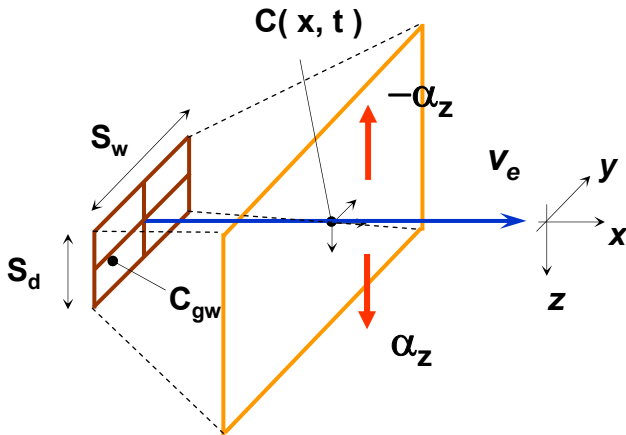
**Soluzione in
condizioni
stazionarie**

$$\frac{C(x, y, z)}{C_{gw}} = \frac{1}{4} \exp \left[\frac{x}{2\alpha_x} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erf} \left(\frac{y + 0,5S_w}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - 0,5S_w}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erf} \left(\frac{z + 0,5S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{z - 0,5S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right) \right]$$

$$\text{Fattore di ritardo } R = 1 + K_d \rho_s / \theta_T$$

Caso 1 : due componenti opposte di dispersione verticale

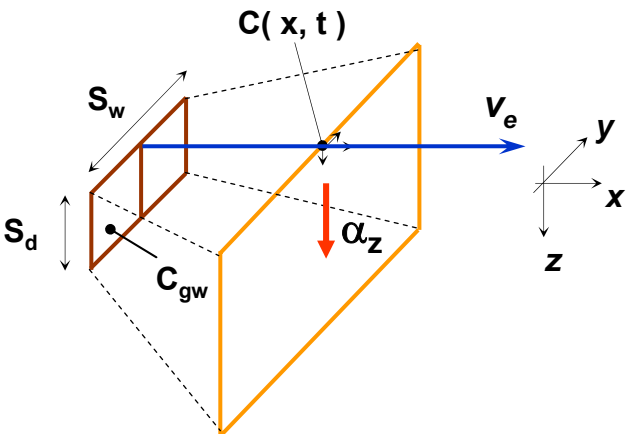
DAF(1)



$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \exp\left[\frac{x}{2\alpha_x} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}}\right)\right] \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}}\right) \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{S_d}{4\sqrt{\alpha_z \cdot x}}\right)$$

Caso 2 : una sola componente di dispersione verticale

DAF(2)



$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \exp\left[\frac{x}{2\alpha_x} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}}\right)\right] \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}}\right) \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}}\right)$$

Caso 3 : dispersione verticale nulla (contaminazione fino alla base acquifero)

$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \exp\left[\frac{x}{2\alpha_x} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x \cdot R}{v_e}}\right)\right] \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}}\right)$$

DAF(3)

Degradazione

Qualora non si tenga conto della degradazione degli inquinanti ($\lambda = 0$), nella soluzione di Domenico scompare anche il termine convettivo e dispersivo nella direzione del moto. Ciò vuol dire che **non si considera il moto delle particelle nella direzione del flusso e che l'attenuazione non dipende dalla velocità della falda. Non si tiene conto neppure del ritardo** dovuto all'adsorbimento. L'unica attenuazione è data dalla **dispersione trasversale e verticale**.

Caso 1 :
$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \text{erf} \left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) \cdot \text{erf} \left(\frac{S_d}{4\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right)$$
 DAF(1)

Caso 2 :
$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \text{erf} \left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right) \cdot \text{erf} \left(\frac{S_d}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right)$$
 DAF(2)

Caso 3 :
$$\frac{C(x)}{C_{gw}} = \text{erf} \left(\frac{S_w}{4\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right)$$
 DAF(3)

Soluzione numerica (FeFlow)

Il software **FeFlow ver.5.3x** permette di simulare, in due e tre dimensioni (2D e 3D), il moto di un fluido, e il trasporto di massa e di calore in un mezzo saturo (falda), insaturo o a saturazione variabile. E' possibile effettuare simulazioni in diverse condizioni:

Moto del fluido (Equazione di Richards):

- Stato stazionario
- Stato di transizione

Moto del fluido e trasporto di massa (ADE Equation):

- Stato stazionario per il moto e per il trasporto
- Stato stazionario per il moto e stato di transizione per il trasporto
- Stato di transizione per il moto e per il trasporto

Il software permette di simulare sia la **degradazione** che il **ritardo** considerando quest'ultimo non solo come meccanismo di attenuazione non distruttivo, ma anche come fenomeno distruttivo (ovvero come riduzione della massa di inquinanti).

Caratteristiche di Feflow

Il software **FeFlow ver.5.3x** consente inoltre di simulare:

- Acquifero confinato
- Presenza di pozzi in emungimento (termine generativo dell'Eq. Richards)
- Trasporto di una o più sostanze
- Sorgente degli inquinanti continua nel tempo o di tipo impulsivo
- Impostazione di diverse cinetiche di adsorbimento (Langumir, Freundlich, Henry)

La versione demo è scaricabile dal sito:

www.wasy.de/english/products/FeFlow/download.html

Per i dettagli sul funzionamento del software si rimanda all'Appendice T

Condizioni al contorno

Per l'applicazione di un modello numerico è necessario fissare le condizioni al contorno:

Moto del fluido (Equazione di Richards):

- Carico idraulico al contorno (condizione di Diriclet)
- Flusso/velocità al contorno (condizione di Neumann)
- Trasferimento di massa in/out dal dominio (condizione di Cauchy)
- Presenza di Pozzi (termine generativo)

Trasporto dei contaminanti (ADE Equation):

- Massa/concentrazione al contorno (condizione di Diriclet)
- Flusso convettivo/dispersivo al contorno (condizione di Neumann)
- Trasferimento di massa in/out dal dominio (condizione di Cauchy)
- Presenza di Pozzi (termine generativo)

Nelle simulazioni condotte non è stata considerata l'eventuale presenza di pozzi in emungimento.

Simulazioni effettuate

Simulazioni

Le simulazioni effettuate sia col modello analitico (eq. Domenico) che con il modello numerico (FeFlow) sono state le seguenti:

- Diverse condizioni di dispersione degli inquinanti (Caso1, Caso2 e Caso 3)
- Considerazione o meno della degradazione (decadimento)

Modello concettuale

Contaminante indice: Benzene

Concentrazione Rappresentativa alla Sorgente (CRS): 0,1mg/L ossia un valore superiore di 100 volte ai valori di riferimento della normativa vigente (D.Lgs 152/06).

Geometria del sito e della sorgente e proprietà fisiche del suolo: default proposti dal documento APAT [APAT Rev.1, 2006] in corrispondenza ad un livello 1 di Analisi

Proprietà chimico/fisiche e tossicologiche: Banca Dati ISS/ISPESL

Punto di conformità: 100 m dalla sorgente di contaminazione

Differenze nelle ipotesi dei modelli

Modello deterministico (Domenico)

Ipotesi

- Analisi in stazionario: sorgente uniforme e continua nel tempo (concentrazione costante nello spazio e nel tempo)
- Degradazione e ritardo legati al trasporto lungo la direzione del flusso (trasporto convettivo)
- L'adsorbimento non comporta una riduzione della massa degli inquinanti ma solo una riduzione della velocità media di trasporto

Modello numerico (Feflow)

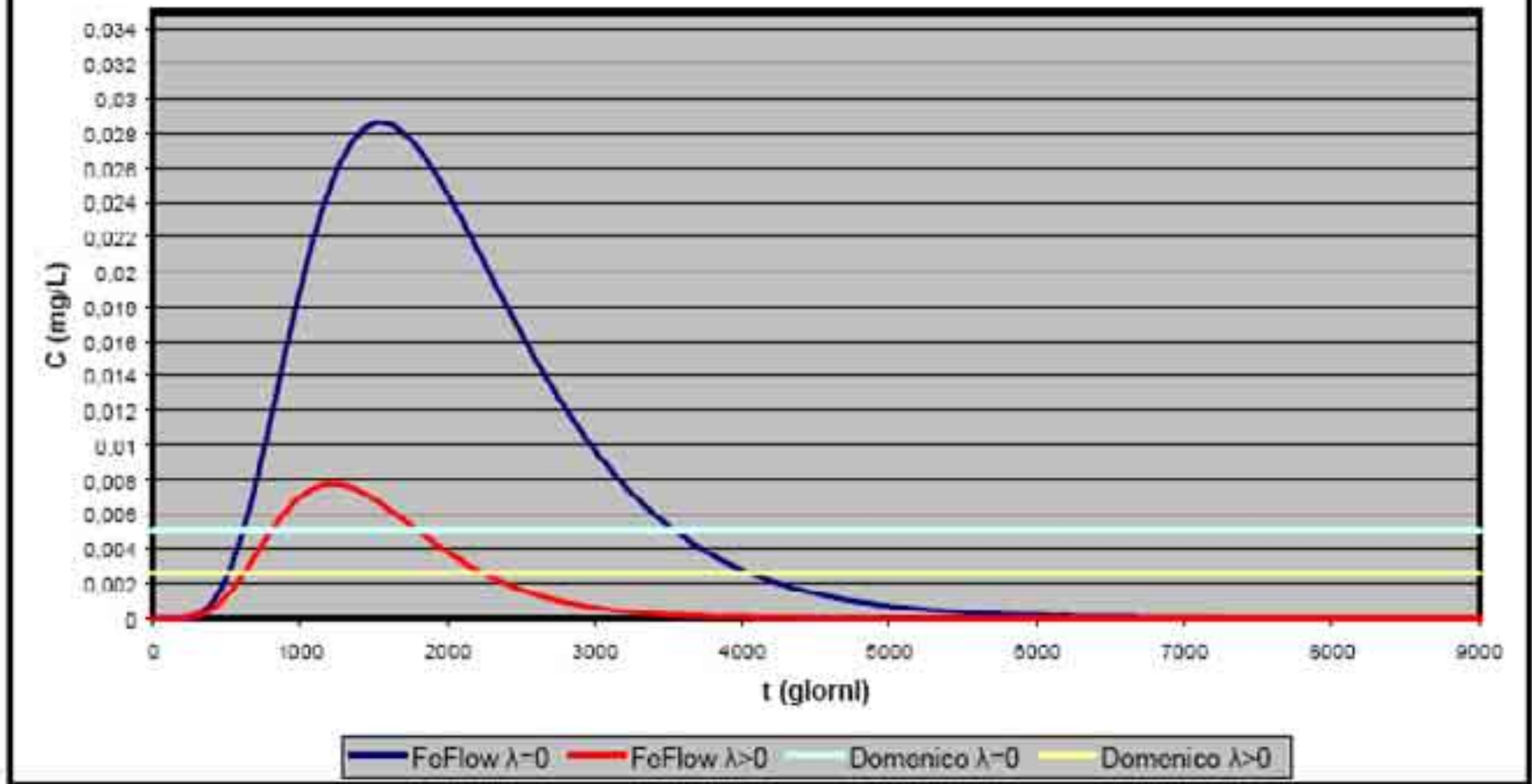
Ipotesi

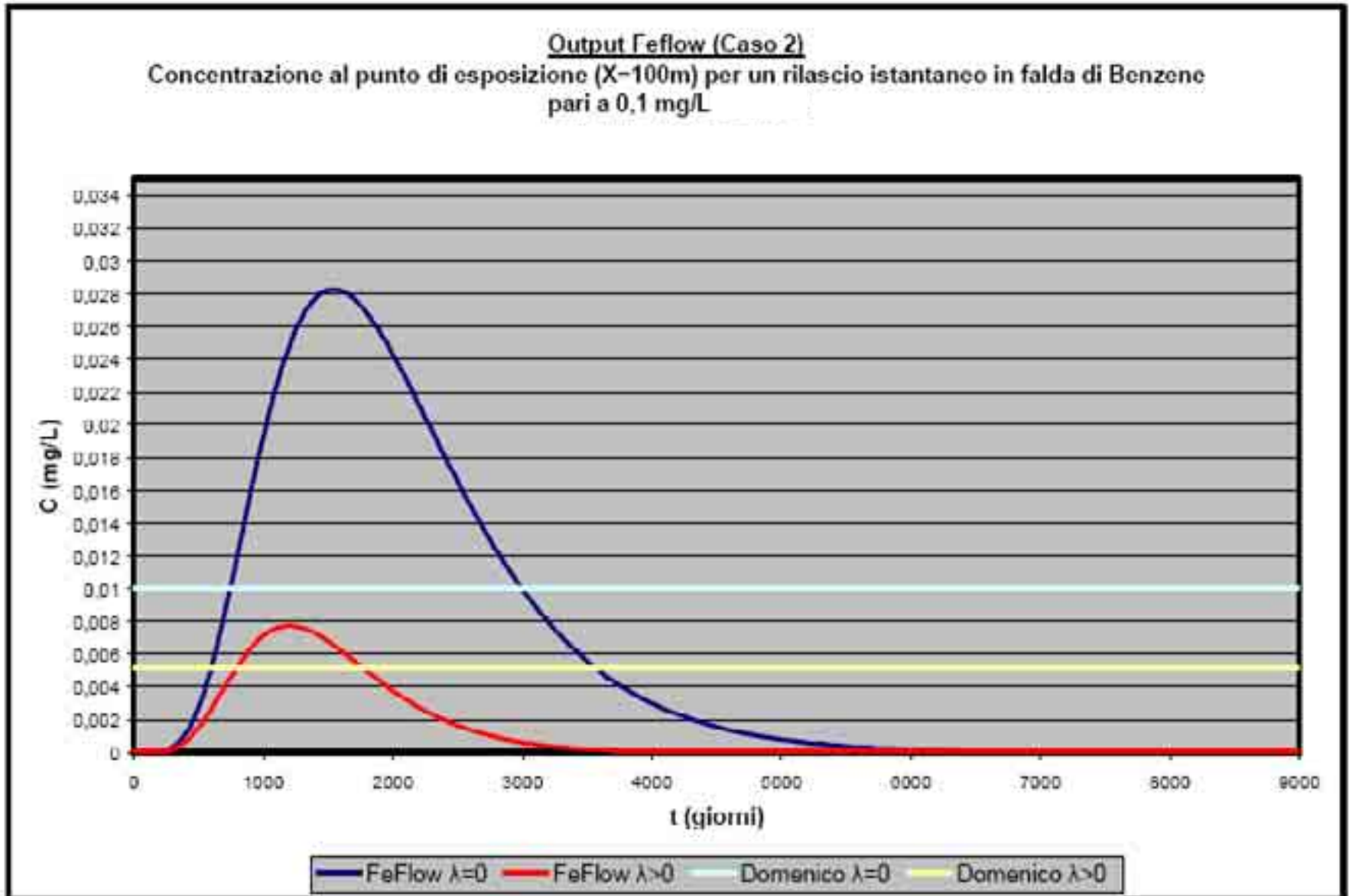
- Analisi in transitorio: sorgente a rilascio istantaneo (concentrazione $\neq 0$ per $t=0$; concentrazione = 0 per $t>0$)
- Degradazione e ritardo indipendenti dal trasporto lungo la direzione del flusso (trasporto convettivo)
- L'adsorbimento comporta una riduzione della massa degli inquinanti oltre alla riduzione della velocità media di trasporto (ritardo)

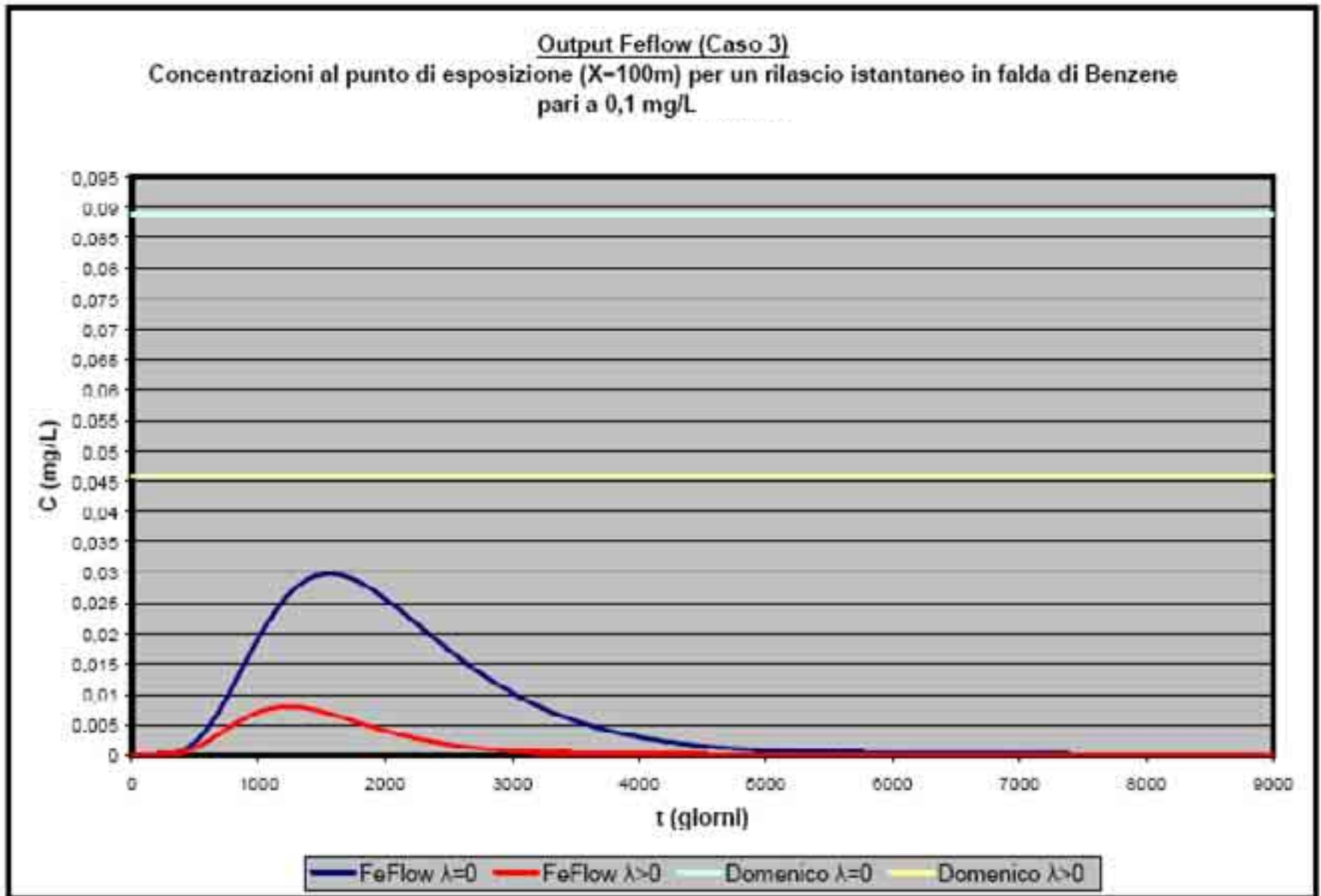
Step 1 – Confronto delle concentrazioni

Output Feflow (Caso 1)

Concentrazione al punto di esposizione (X=100m) per un rilascio istantaneo in falda di Benzene pari a 0,1 mg/L







Step 2 – Calcolo del Rischio

Il **confronto diretto** degli output dei modelli in termini di **concentrazione** al punto di conformità **non è significativo** in quanto il modello analitico opera in condizioni stazionarie, mentre quello numerico opera in transitorio.

E' stato necessario quindi confrontare i risultati dei modelli in termini di **"rischio cancerogeno"** associato all'ingestione di acqua potabile al punto di conformità.

Si è quindi operata un **integrazione nel tempo** dei risultati ottenuti con il modello numerico (Metodo di Cavalieri-Simpson). L'integrazione è avvenuta su una durata complessiva pari alla **Durata di Esposizione** del recettore considerato.

Si ricorda che tale modalità di valutazione è finalizzata unicamente al confronto dei modelli in quanto non conforme con quanto fissato dal D.Lgs 4/2008 che prevede il rispetto delle CSC al punto di conformità.

Step 2 – Parametri per il calcolo del rischio

Parametri di esposizione e tossicologici

Simbolo	Valori	Unità di misura
<i>IR</i>	1	l/giorno
<i>EF</i>	250	giorni/anno
<i>ED</i>	25	anni
<i>BW</i>	70	Kg
<i>AT</i>	70	anni

Simbolo	Valori	Unità di misura
<i>SF</i>	5,50E-02	(mg/Kg giorno) ⁻¹
<i>EM</i>	3,50E-03	l/ Kg giorno

Metodo di Cavalieri-Simpson

L'andamento delle concentrazioni nel tempo ottenuto con il metodo numerico è stato suddiviso in "step temporali".

L'andamento delle concentrazioni $[f(x) = C(t)]$ in ciascuno step è stato approssimato con un arco di parabola:

$$f(x) = \alpha(x - x_r)^2 + \beta(x - x_r) + \gamma$$

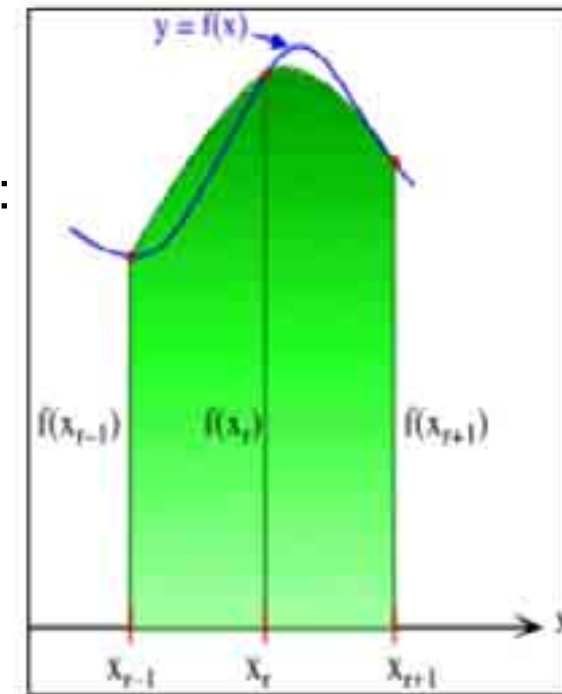
Integrando rispetto agli estremi dell'intervallo $[x_{r-1}; x_{r+1}]$:

$$\int_{x_{r-1}}^{x_{r+1}} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_{r+1}) + f(x_{r-1}) + 4f(x_r)]$$

con $2h =$ ampiezza dell'intervallo

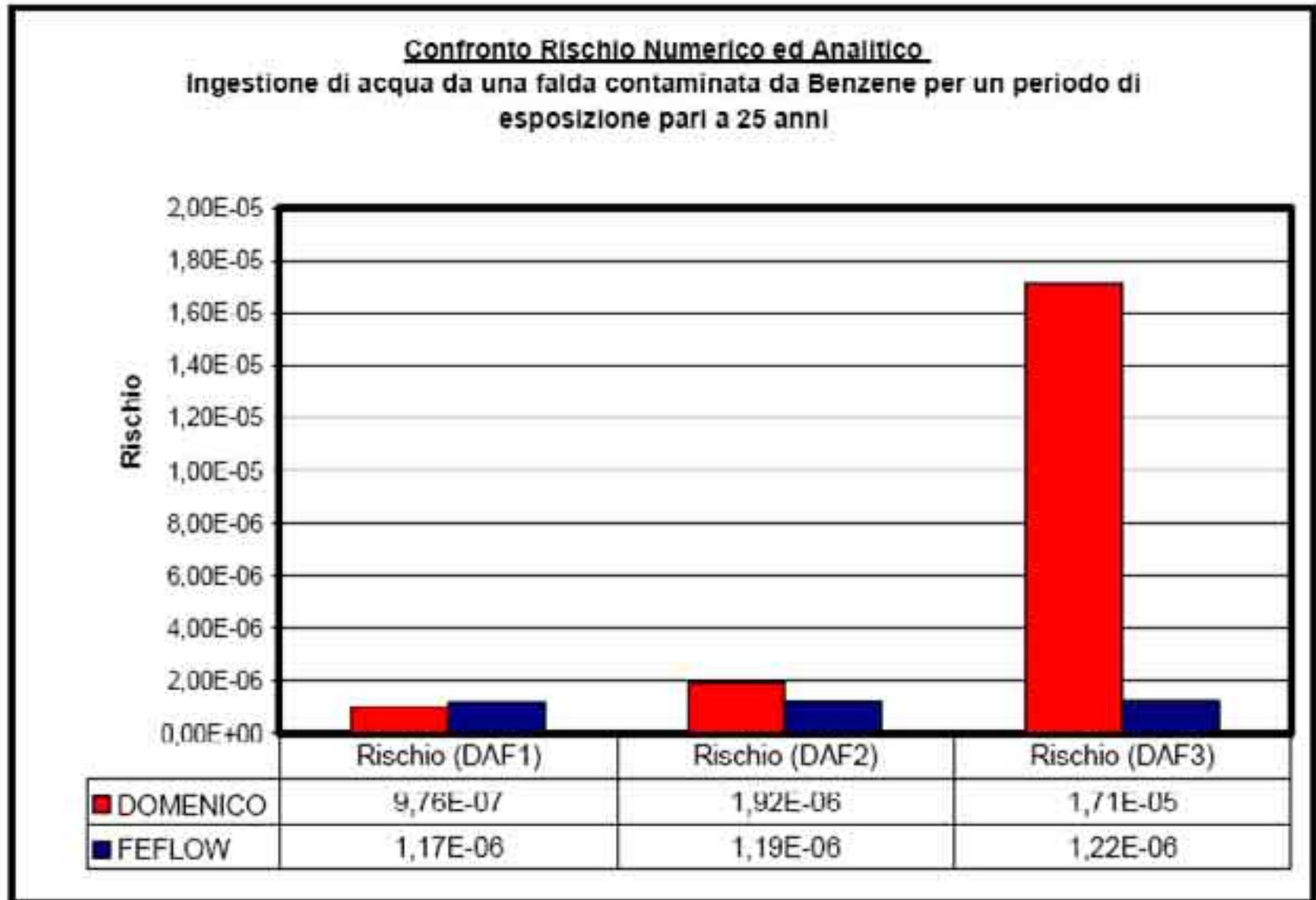
Il "rischio totale" è dato dalla somma dei rischi nei singoli intervalli:

$$R_T = \sum_{i=1}^n R_i \quad R_i = C_i \cdot ED \cdot \frac{IR \cdot EF}{AT \cdot BW} \cdot SF$$

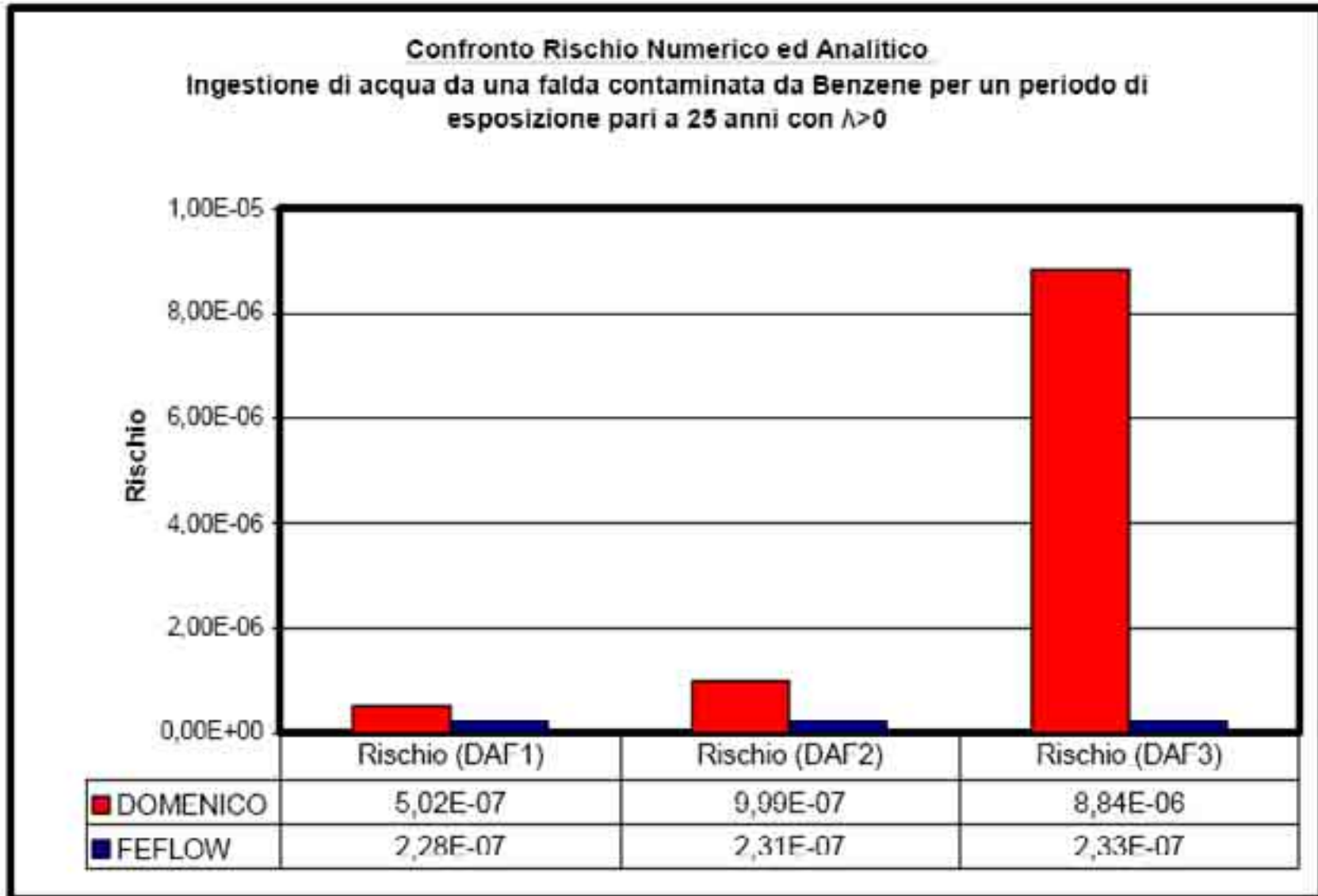


Step 2 – Integrazione nel tempo

Step 2 – Confronto dei Rischi



Step 2 – Confronto dei Rischi



Conclusioni Step 2 (1)

Assenza di degradazione ($\lambda=0$):

- Il Rischio quantificato considerando l'attenuazione dovuta alla dispersione in tutte le direzioni (Caso 1) risulta essere leggermente più conservativo con l'applicazione del modello numerico rispetto a quello analitico.
- Il Rischio quantificato considerando l'attenuazione dovuta alla dispersione orizzontale e longitudinale in tutte le direzioni e dispersione verticale nell'asse positivo di z (Caso 2) risulta essere più conservativo con l'applicazione del modello analitico rispetto a quello numerico.
- Il Rischio quantificato considerando l'attenuazione dovuta alla sola dispersione orizzontale e longitudinale (Caso 3) risulta essere estremamente più conservativo con l'applicazione del modello analitico rispetto a quello numerico.

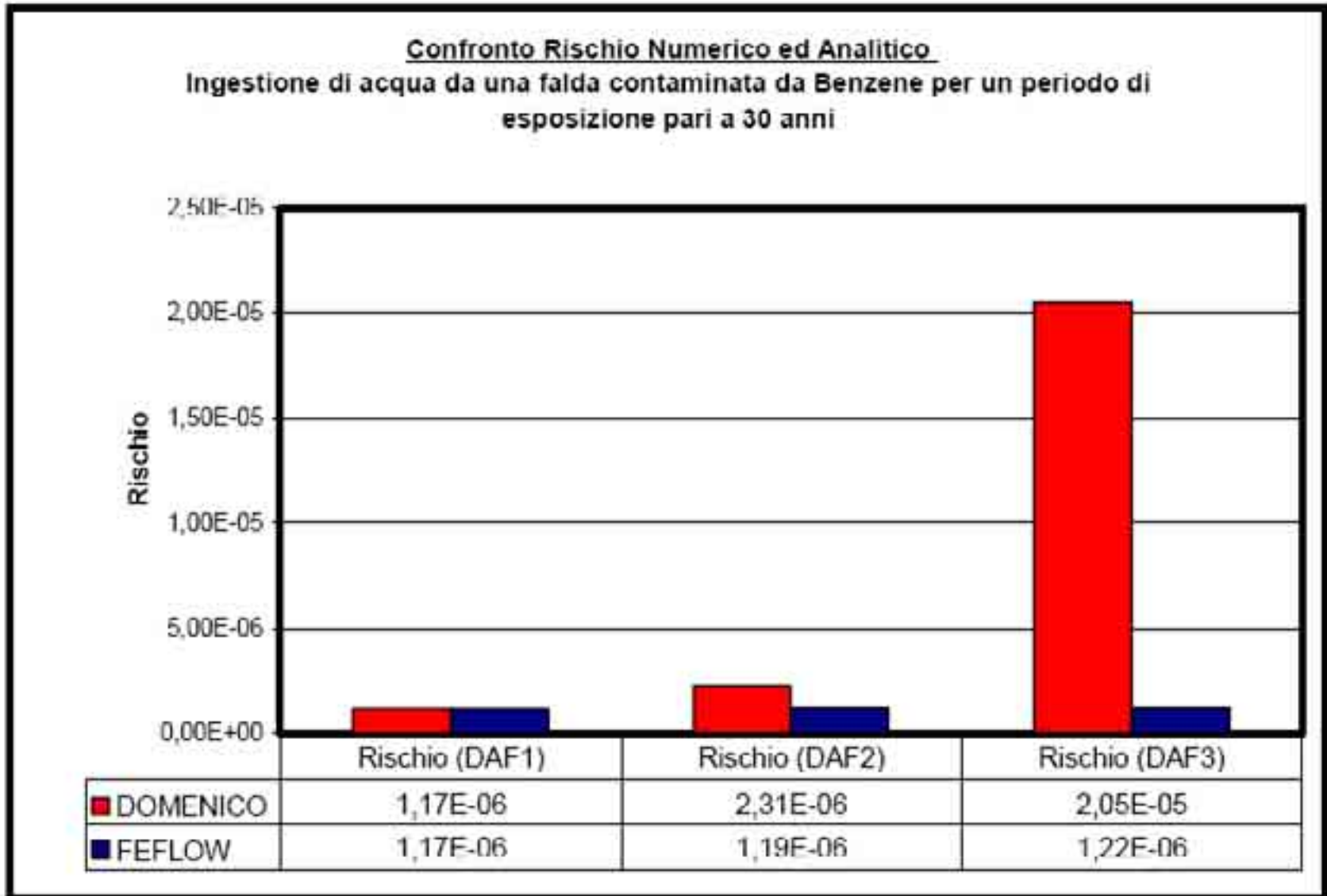
Presenza di degradazione ($\lambda>0$):

- Il Rischio quantificato considerando l'attenuazione dovuta alla degradazione ($\lambda>0$) porta a dei risultati meno conservativi. Il Rischio sanitario ottenuto infatti è di un ordine di grandezza inferiore alla scelta più conservativa di trascurarla ($\lambda=0$).

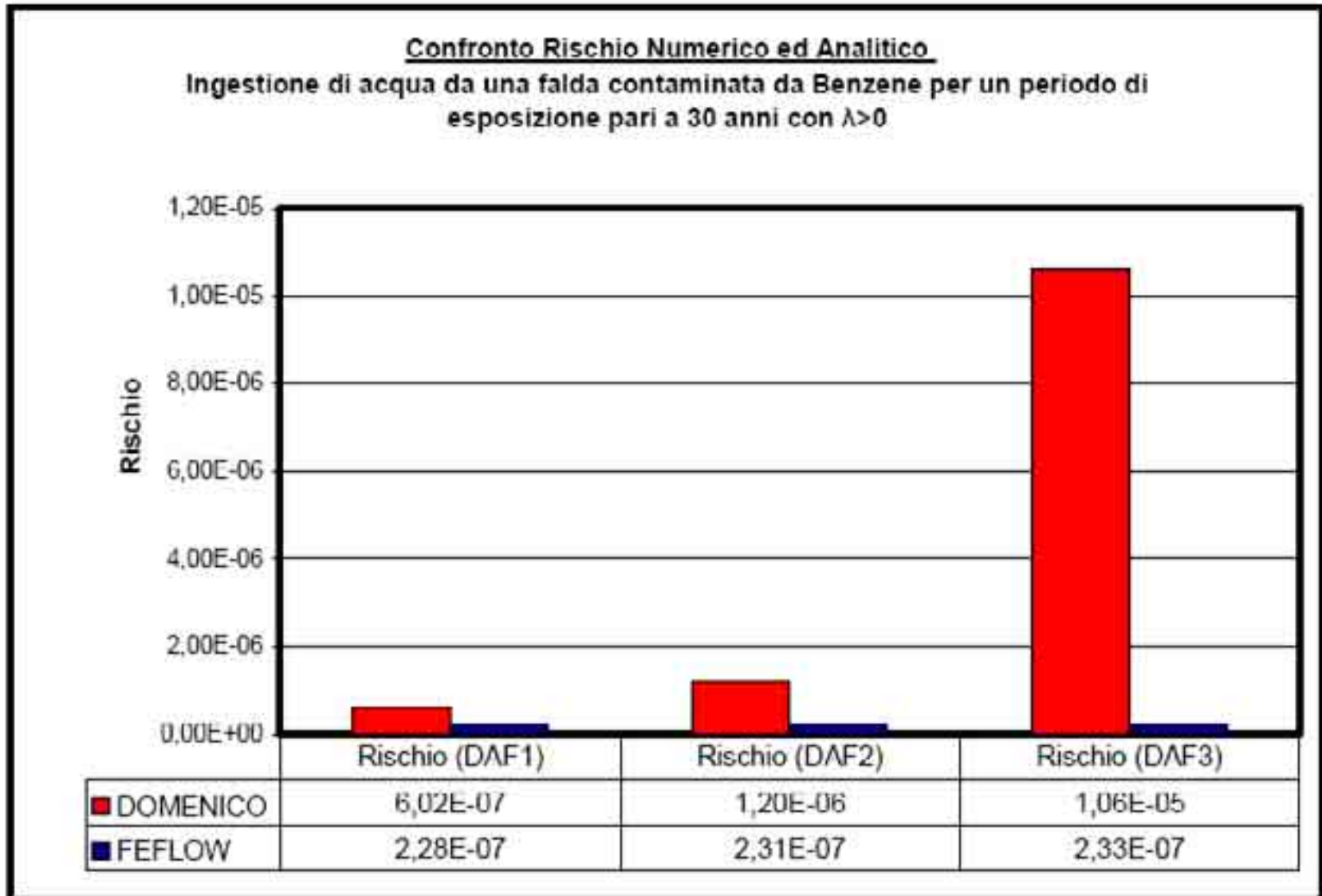
Conclusioni Step 2 (2)

- L'equazione DAF2 porta quindi a dei risultati leggermente più conservativi del modello numerico, ma non sovrastimati come nel caso di sola dispersione orizzontale e longitudinale (DAF3).
- Come descritto in precedenza l'utilizzo del modello analitico presuppone che per l'intera Durata di Esposizione il recettore sia a contatto con una determinata concentrazione costante di contaminante.
- Invece l'utilizzo del modello numerico determina che il recettore sia esposto ad una significativa concentrazione dell'inquinante al solo per un limitato arco di tempo e comunque inferiore alla Durata di Esposizione.
- Si è pertanto deciso di valutare l'influenza della Durata di Esposizione sul confronto tra i modelli.
- Le durate di esposizione sono state fissate rispettivamente in ED = 30 anni e ED = 35 anni

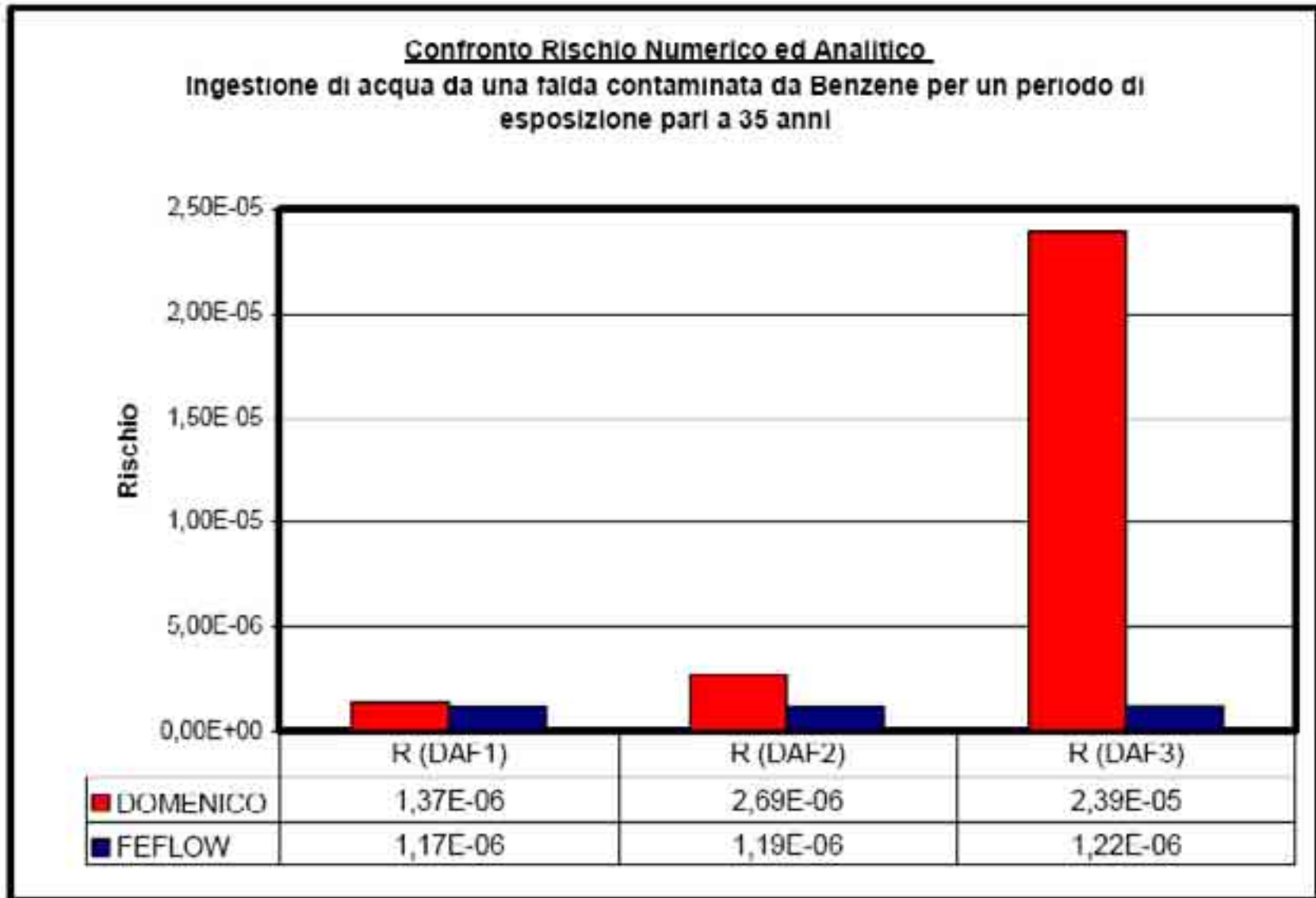
Step 3 – ED =30 anni



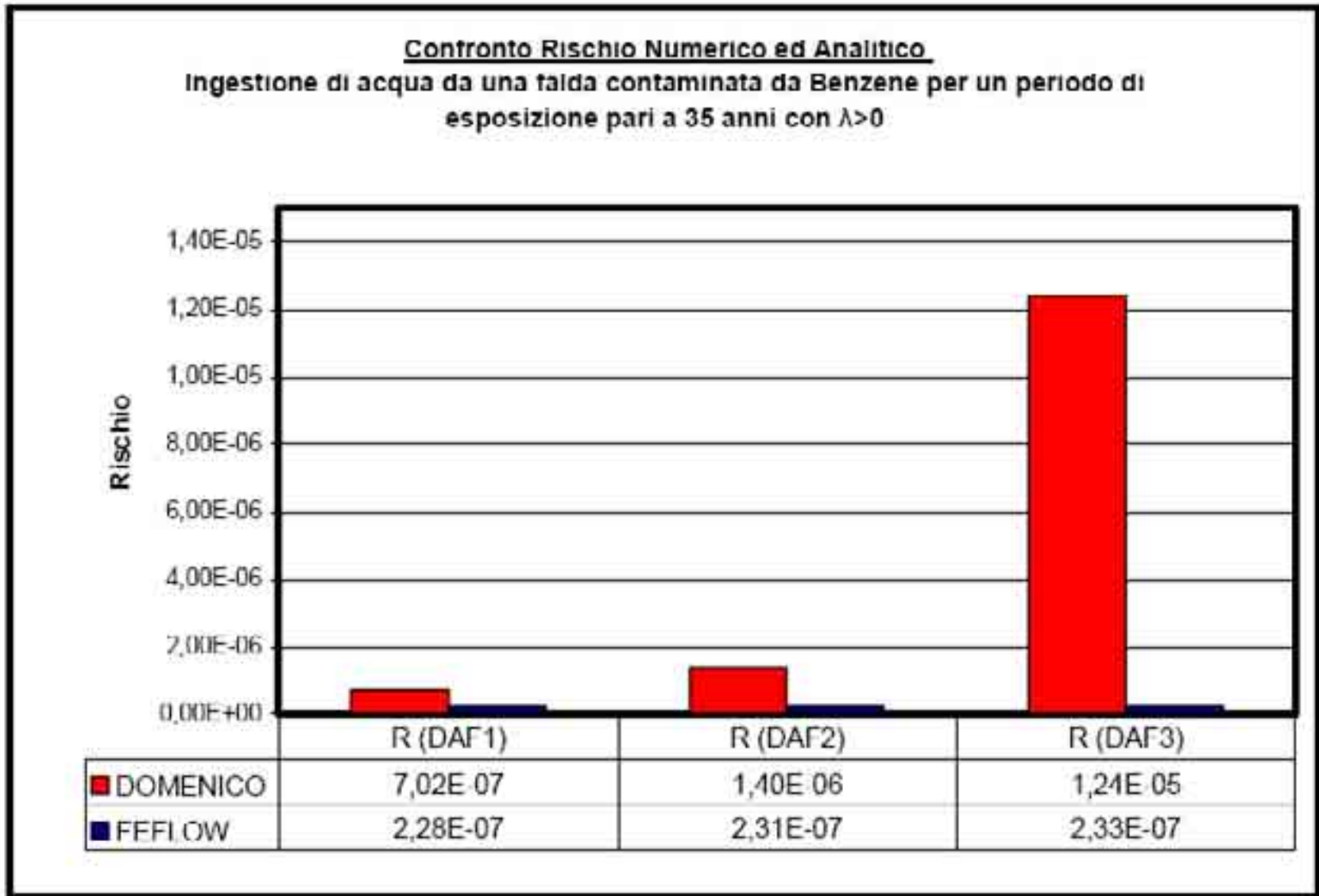
Step 3 – ED =30 anni



Step 3 – ED =35 anni



Step 3 – ED =35 anni



Considerazioni conclusive

- Il confronto tra modello analitico e modello numerico risulta non essere sempre agevole a causa delle diverse ipotesi di partenza dei due approcci.
- Il confronto effettuato mostra che, nel caso dell'equazione selezionata dal documento APAT (DAF 2 con $\lambda = 0$), i risultati del modello analitico e del modello numerico non sono estremamente differenti.
- Non tener conto della degradazione dei contaminanti comporta, come ci si aspettava, risultati più conservativi. Tuttavia nel modello analitico ciò implica che si trascurino meccanismi di attenuazione (convezione, dispersione longitudinale, ritardo) che hanno un certo "peso" nel caso reale.
- L'incremento della durata di esposizione, come ci si aspettava, ha portato ad un incremento della conservatività del modello analitico rispetto al numerico.