

APPENDICE R

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

R.1 Introduzione

Nella presente appendice si riportano i risultati di un confronto tra l'utilizzo di modelli analitici e numerici per la simulazione del fenomeno di percolazione di un contaminante nello strato insaturo di suolo al fine di stimare il rischio per la salute umana correlato alla ingestione di acqua di falda contaminata.

Il presente studio di confronto ha come fine il raggiungimento dei seguenti obiettivi:

1. Verificare la conservatività degli output ottenuti con l'applicazione del modello analitico rispetto a quelli ottenuti a mezzo di modelli numerici.
2. Verificare la necessità di considerare il coefficiente di attenuazione del suolo SAM nell'applicazione del modello analitico.

Si specifica che i suddetti argomenti sono stati sviluppati in relazione al fenomeno di percolazione del contaminante attraverso la zona insatura di suolo, non considerando fenomeni di produzione e biodegradazione del contaminante.

Come “modello analitico” è stato utilizzato quello contenuto nel presente documento (paragrafo 3.3.1), mentre come “modello numerico” è stato utilizzato il software Chemflo ver. 2005 e il software VS2DTI ver. 1.2.

Si sottolinea che i due modelli, analitico e numerico, stimano la concentrazione dell'inquinante alla base della zona vadosa prima della falda.

Lo studio svolto può essere suddiviso in 3 parti:

1. Nella prima parte vengono illustrati i modelli analitici e numerici di trasporto dei contaminanti nella zona vadosa. In particolare per il modello numerico sono sinteticamente descritti i software utilizzati (per una trattazione più completa è possibile consultare i manuali d'uso degli stessi).
2. Nella seconda parte sono riportati i risultati conseguiti con l'applicazione dei modelli. Gli output ottenuti sono mostrati mettendo in evidenza le differenze che si riscontrano tra il

modello analitico e il numerico; inoltre, dato che per il numerico sono stati utilizzati due distinti programmi (Chemflo e VS2DTI), si sottolineano le similitudini e le discordanze tra i due.

3. La terza ed ultima parte è costituita dalla stima del Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda con contaminazione nota, ricavata dai risultati conseguiti con l'uso del modello analitico e numerico.

R.2 Descrizione dei modelli analitici e numerici

Nel presente paragrafo è riportata, in forma sintetica, una descrizione di modelli analitici e numerici utilizzati per il confronto.

Come modello analitico è stato utilizzato quello contenuto nel presente documento (paragrafo 3.3.1), mentre come modelli numerici sono stati utilizzati i due software: Chemflo ver. 2005 e VS2DTI ver. 1.2.

R.2.1 Modello analitico

Nel caso dell'Analisi di Rischio Sanitario, connesso alla contaminazione di un sito, il presente documento prevede un approccio analitico per la formulazione del "Modello concettuale". In particolare, per quanto riguarda la sorgente di contaminazione in zona insatura, prevede il calcolo del *fattore di lisciviazione* LF (*Leaching Factor*), che consente di valutare l'attenuazione subita dalla concentrazione di contaminante, dovuta al trasporto dalla sorgente di contaminazione al piano di falda a causa dell'infiltrazione nello strato insaturo di suolo e alla successiva diluizione nell'acquifero superficiale. Tale fattore rappresenta il rapporto tra la concentrazione nella sorgente (C_s) e quella che si avrà nella falda (C_{Lmf}).

$$LF = \frac{C_{Lmf}}{C_s} = \frac{k_{ws} \cdot SAM}{LDF} \quad (R.1)$$

In Figura R.2.1 si viene rappresentato schematicamente il meccanismo di trasporto degli inquinanti in zona insatura e satura nel caso di contaminazione di suolo profondo.

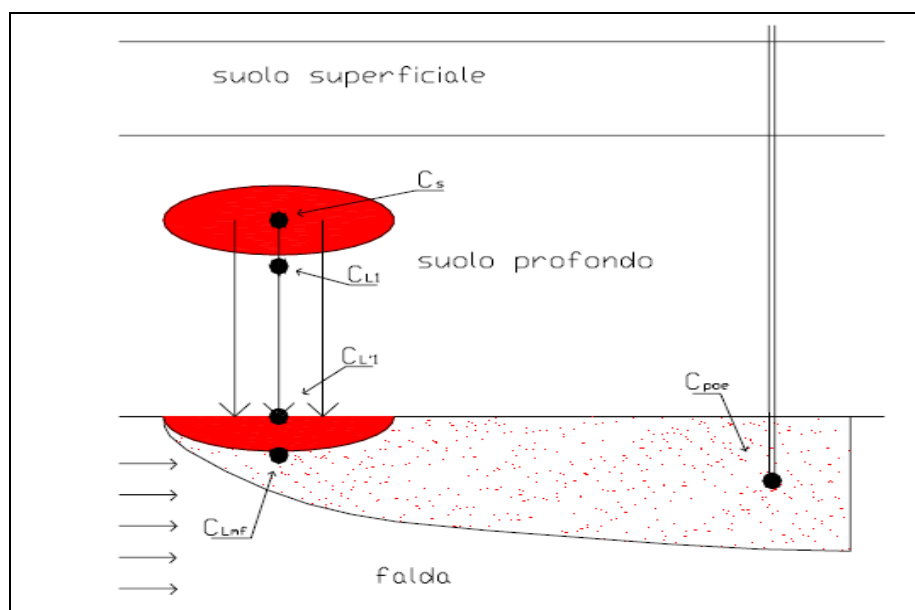


Figura R.2.1: Lisciviazione e dispersione in falda

R.2.2 Modelli numerici

In Tabella R.2-1 sono riportate le principali caratteristiche dei software di simulazione del fenomeno di percolazione del contaminante nel suolo insaturo più diffusi a livello internazionale [www.epa.gov/ada/models/html; *RBCA, 1999*].

Tabella R.2-1: Elenco di software per percolazione insaturo

Nome modello	Descrizione modello	Tipo	Processi	Caratteristiche	Output
Vleach	Descrive il movimento delle sostanze organiche nella zona vadosa, considerando la ripartizione nelle tre fasi: solida, liquida e gassosa.	1-D	Avvezione Diffusione Equilibrio tre fasi No biodegradazione.	La zona vadosa si trova in stato stazionario, per esempio si considera il profilo di umidità costante; Si schematizza il suolo con poligoni verticali che rappresentano parti di suolo omogeneo.	Distribuzione del contaminante tra la massa liquida, solida e gassosa.
Chemflo 2000	Simula il movimento dell'acqua e delle sostanze chimiche nella zona vadosa.	1-D	Dispersione Diffusione Advezione Degradazione Produzione Decadimento del primo ordine	I risultati sono mostrati in funzione del tempo e dello spazio. Sia per l'acqua che per le sostanze chimiche si possono considerare condizioni omogenee e non omogenee.	Contenuto d' acqua, potenziale di matrice, carico totale, conduttività idraulica, concentrazione in soluzione, assorbita e totale.
Sesoil	Descrive il processo di "fate and transport" di un inquinante nella zona vadosa.	1-D	Dissoluzione Diffusione Assorbimento Dispersione Biodegradazione Volatilizzazione Scambio ionico Idrolisi	I parametri più importanti sono la velocità di biodegradazione, il contenuto di carbonio organico nel suolo, le precipitazioni annuali e l'altezza della falda.	Ciclo idrogeologico, concentrazione massa d'inquinante in acqua, nel suolo e in fase gassosa, quantità di contaminante migrato in falda.

Sutra	Simula il flusso e il trasporto di energia o delle sostanze in una zona insatura o satura	2-D	Convezione Dispersione Diffusione Assorbimento	Servono molti dati sito-specifici, è usato solitamente per un'Analisi di livello 3. Considera sia la percolazione nell'insaturo che il flusso nella zona satura.	Distribuzione del contaminante tra la massa liquida solida e gassosa nel tempo.
Mofat	Descrive il flusso e trasporto di tre fasi fluide: acqua NAPL e gas.	2-D	Avvezione Dispersione Diffusione Decadimento	Servono numerosi parametri.	Distribuzione della concentrazione dei costituenti.
VS2DTI	Simula il trasporto del contaminante nella zona vadosa.	2-D	Dispersione Assorbimento Scambio ionico Advezione Decadimento del primo ordine	È indicato nel caso in cui si voglia studiare il trasporto di un contaminante in un mezzo eterogeneo.	Contenuto d' umidità, carico totale, pressione, concentrazione soluto.
Pestan	Modellizza il trasporto dei pesticidi (contaminanti organici) nella zona vadosa.	1-D	Avvezione Dispersione Decadimento del primo ordine	Servono pochi parametri.	Ripartizione dei contaminanti organici.
3DFATMIC	Simula il flusso nel sottosuolo, e i modelli di fate and transport dei contaminanti.	-	Avvezione	Si può applicare per condizioni transitorie sia nell'insaturo che nel saturo.	-
Bioplume III	Trasporto del contaminante sotto l'influenza dell'ossigeno, dei nitrati, del ferro del solfato e del metano prodotti dalla biodegradazione.	2-D	Avvezione Dispersione Decadimento del primo ordine Biodegradazione istantanea, del primo ordine e di ordine zero.	-	Distribuzione della concentrazione dei costituenti.
OASIS	E' un sistema di supporto per la modellizzazione dei contaminanti in falda.	Supporto grafico	-	Contiene: due databases chimici e uno idrologico , BIOPLUME II e altri modelli idrologici.	Fu idealizzato per fornire un set di strumenti che dovrebbero aiutare l'utente a stimare l'entità del problema della contaminazione della falda.
HELP	Il modello consente di valutare l'impatto ambientale provocato dalle precipitazioni, pioggia o neve, e dalle sostanze da esse trasportate nel suolo.	2-D	Evapotraspirazione dal suolo Percolazione verticale Infiltrazione Ruscellamento, intercettazione e traspirazione dalle piante.	Considera un suolo eterogeneo, costituito da un profilo a più strati.	Velocità d'infiltrazione.

Chemflo 2005 - “Interactive Software for Simulating Water and Chemical Movement in Unsaturated Soils”

È stato realizzato e messo in commercio dal Dottor D.L. Nofziger e dal Dottor Jinquan Wu del dipartimento di *Plant and Soil Sciences* dell'università dello Stato dell'Oklahoma. L'ultima versione di tale programma, che corrisponde a quella utilizzata nel seguente lavoro, è la versione

2005, la quale si può scaricare gratuitamente da internet sia dal sito dell'EPA [www.epa.gov/ada/models/html] che da quello dei realizzatori del programma [pss.okstate.edu/personnel/faculty/nofziger.html].

Il Chemflo è un software che permette di descrivere il *movimento dell'acqua* e delle *sostanze chimiche* nella zona vadosa. Può essere utilizzato per effettuare un'Analisi di Rischio di livello 3, in quanto si basa su modelli matematici per la risoluzione delle equazioni caratteristiche del sistema.

L'equazione differenziale usata dal programma per descrivere il movimento monodimensionale dell'acqua è quella di Richards

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(h) \left(\frac{\partial h}{\partial x} - \sin(A) \right) \right] \quad (\text{R.2})$$

o

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(h) \left(\frac{\partial h}{\partial x} - \sin(A) \right) \right] \quad (\text{R.3})$$

$$C(h) = \frac{\partial \theta}{\partial h} \quad (\text{R.4})$$

Dove: θ = contenuto volumetrico d'acqua

h = potenziale di matrice

$K(h)$ = conduttività idraulica

$C(h)$ = capacità specifica dell'acqua

A = angolo tra la direzione del flusso e l'asse orizzontale.

L'equazione differenziale usata per descrivere il trasporto delle sostanze chimiche :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta C + \rho S) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial x} - q C \right) - \alpha \theta S + \gamma \theta \quad (\text{R.5})$$

Dove: $C=C(x,t)$ concentrazione di sostanza chimica in fase liquida ;

$S=S(x,t)$ concentrazione di sostanza chimica in fase solida;

$D=D(x,t)$ coefficiente di dispersione

$q=q(x,t)$ flusso dell'acqua

$\rho = \rho(x)$ densità della massa solida

$\alpha = \alpha(x)$ costante di degradazione del primo ordine in fase liquida

$\beta = \beta(x)$ costante di degradazione del primo ordine in fase solida

$\gamma = \gamma(x)$ costante di formazione del primo ordine in fase liquida

I risultati ottenuti con la simulazione sono mostrati graficamente.

Sono di seguito riportate le principali caratteristiche e limitazioni del software Chemflo, le quali emergono dalla descrizione fatta precedentemente del programma. Da tale studio emerge che:

1. Il Chemflo considera tutte le sostanze chimiche sia organiche che inorganiche.
2. I modelli usati in questo software presumono che il flusso e il trasporto nel suolo siano rigorosamente monodimensionali.
3. Per il flusso dell'acqua non si prevede alcuna fonte o termine di decadimento.
4. La ripartizione e il movimento delle sostanze chimiche nella fase vapore è ignorata in questo modello. Per le altre fasi, solida e liquida, si presume una ripartizione istantanea e reversibile delle sostanze.
5. Il Chemflo considera condizioni omogenee e non omogenee, per esempio l'umidità può avere un profilo costante o variare con la profondità.
6. Il Chemflo considera il fenomeno di dispersione del contaminante in fase liquida, la degradazione e la produzione, sia in fase liquida sia solida.
7. Il modello non considera i NAPL (non aqueous-phase liquid).
8. In alcune situazioni l'equazione di Richards [Richards, 1931] è impropria per descrivere il flusso d'acqua, in quanto basandosi sull'equazione di Darcy-Buckingham [Buckingham, 1907] valida per acqua in movimento in suoli insaturi, non considera suoli che rigonfiano (*swelling*), e casi in cui ci sono flussi preferenziali d'acqua attraverso grandi pori. Perciò, non si può rappresentare con accuratezza il flusso in suoli fessurati, che sono inondati. Il software presume anche che le proprietà idrauliche del suolo non cambino in presenza di sostanze chimiche.
9. I risultati simulati dipendono dalle condizioni iniziali specificate. Se le condizioni iniziali specificate non sono uguali alle vere condizioni, i valori calcolati possono essere incorretti.
10. Le predizioni del modello possono essere piuttosto sensibili alle condizioni al contorno specificate. Se tali condizioni non sono uguali alle condizioni effettive possono essere fatti grandi errori. In alcuni casi, gli errori sono dovuti ad una mancanza di conoscenza delle vere condizioni al contorno. In altri casi, il software può non essere flessibile abbastanza per realizzare le vere condizioni.
11. Ulteriori errori nei risultati sono dovuti alle approssimazioni che si fanno con il metodo delle differenze finite per risolvere le derivate, così come le altre approssimazioni usate per

risolvere le equazioni differenziali parziali. In generale questi errori tendono a decrescere quando il *mesh size* diminuisce.

12. Vi sono delle limitazioni anche nella introduzione dei dati in input, in quanto il Chemflo permette di introdurre valori di concentrazione compresi in un range tra 0 e 1000 g/m³, la stessa cosa vale anche per il coefficiente di ripartizione k_s .

VD2DTI ver. 1.2 “A Graphical User Interface for the Variably Saturated Flow and Transport Computer Program”

Il software VS2DTI (Versione 1.2), sviluppato da P. Hsieh, W. Wingle e R. Healy della *United States Geological Survey* (USGS), è un programma che simula il flusso di un fluido e il trasporto di un soluto in suoli di media porosità [www.water.usgs.gov/software].

Il VS2DTI è composto da:

- preprocessor: serve all'utente per preparare il modello concettuale;
- modello numerico VS2DT 3.2 (Healy, 1990; Lappala, 1987): calcola il flusso e il trasporto;
- postprocessor: serve per visualizzare i risultati della simulazione.

Si riportano di seguito le principali caratteristiche del software:

- Uso del metodo delle differenze-finite per risolvere l'equazione di Richards relativa al flusso dell'acqua, e l'equazione di advezione-dispersione per il trasporto del soluto.
- I modelli usati in questo software presumono che il flusso e il trasporto nel suolo siano monodimensionali o bidimensionali.
- Si possono usare assi cartesiani o coordinate radiali.
- Le condizioni al contorno per il flusso includono: la pressione in superficie, il flusso, l'infiltrazione con ponding, la traspirazione dalle piante, l'evaporazione dal suolo.
- Le caratteristiche idrauliche possono essere rappresentate dalle equazioni di: Van Genuchten, Brooks-Corey, and Haverkamp.
- I processi di trasporto includono l'avvezione, la dispersione, il decadimento del primo-ordine, l'assorbimento e lo scambio di ionico.

R.2.3 Confronto tra Chemflo 2005 e VS2DTI ver. 1.2

In questo paragrafo viene mostrata la Tabella R.2-2, nella quale sono messe in evidenza le caratteristiche generali dei software utilizzati. Dalla schematizzazione si possono vedere le similitudini e le differenze che contraddistinguono i due programmi.

Tabella R.2-2: Confronto tra le caratteristiche generali del Chemflo e del VS2DTI

Caratteristiche	CHEMFLO	VS2DTI
Schematizzazione suolo	Finito = divisione in strati Semi-infiniti	Finito = divisione in strati
Caratteristiche suolo	Omogeneo Non omogeneo	Omogeneo Non omogeneo
Equazione del flusso	Equazione di Richards	Equazione di Richards
Equazione per il trasporto delle sostanze	Equazione d'advezione e dispersione	Equazione d'advezione e dispersione
Metodo di risoluzione dell'equazioni del sistema	Metodo delle differenze finite	Metodo delle differenze finite
Equazione che rappresentano le caratteristiche idrauliche	Van Genuchten Simmons Brooks-Corey Gardner	Van Genuchten Brooks-Corey Haverkamp
Trasporto	Dispersione Diffusione Advezione Degradazione Produzione Decadimento del primo ordine	Dispersione Assorbimento Scambio ionico Advezione Decadimento del primo ordine
Fasi di ripartizione del contaminante	Liquida Solida	Liquida Solida Gassosa
Direzione del flusso e del trasporto	Monodimensionale	Monodimensionale Bidimensionale
Output	<u>Parametri relativi al flusso:</u> <ul style="list-style-type: none"> • contenuto d'acqua • potenziale di matrice • potenziale totale • carico totale • conduttività idraulica <u>Parametri relativi alla sostanza chimica:</u> <ul style="list-style-type: none"> • concentrazione in soluzione • concentrazione assorbita • concentrazione totale 	<u>Parametri relativi al flusso:</u> <ul style="list-style-type: none"> • carico totale • contenuto d'umidità • pressione <u>Parametri relativi al soluto:</u> <ul style="list-style-type: none"> • concentrazione soluto
Soluzioni	Numerica	Numerica Grafica

R.3 Applicazione dei modelli di trasporto

Per l'applicazione dei modelli è stato necessario definire un modello concettuale del sito, selezionare dei contaminanti rappresentativi ed attribuire agli stessi dei valori di concentrazione rappresentativa alla sorgente.

Come modello concettuale del sito è stato assunto quello proposto dal presente documento in corrispondenza ad un livello 1 di Analisi, per quanto riguarda la geometria del sito e della sorgente di contaminazione e le proprietà fisiche del suolo.

Come contaminanti sono stati selezionati il Benzene, 1,1,2,2-Tetracloroetano, Benzo(a)pirene e Arsenico. Tali sostanze sono state scelte, nell'appendice B del presente documento, in relazione al loro diverso grado di solubilità e volatilità e al loro diverso valore di k_{oc} e di λ (Tabella R. 3-1). In questo lavoro però il Benzo(a)pirene è stato sostituito dal 1,4-Diclorobenzene; tale scelta è giustificata dal fatto che al Benzo(a)pirene corrisponde un k_s maggiore del limite proposto dal software Chemflo. In sua vece è stato selezionato l'1,4Diclorobenzene poiché ha un k_s intermedio tra l'Arsenico e gli altri due.

Per ogni contaminante selezionato è stato imposto un valore di concentrazione rappresentativo alla sorgente (CRS) superiore di 100 volte ai limiti di riferimento della normativa vigente.

Tabella R.3-1: Caratteristiche chimico fisiche degli inquinanti

Inquinanti	S	P _v	H	K _{oc} /K _d	logk _{oc}	D _a	D _w
Benzene	1,75E+03	9,53E+01	2,28E-01	6,20E+01(*)	2,13E+00	8,80E-02	9,80E-06
1,1,2,2Tetracloroetano	2,97E+03	5,95E+00	1,41E-02	7,90E+01(*)	2,39E+00	7,10E-02	7,90E-06
Benzo(a)pirene	1,62E-03	5,68E-04	4,63E-05	9,69E+05(*)	6,11E+00	4,30E-02	9,00E-06
1,4Diclorobenzene	7,38E+01	1,06E+00	9,96E-02	6,16E+02(*)	3,42E+00	6,90E-02	7,90E-06
Arsenico	4,41E+05	1,01E+04	-	2,9E+01(**)	-	-	-

(*)Coefficiente d'adsorbimento del carbonio organico k_{oc} , da cui si ricava $k_d = f_{oc} * k_{oc}$.

(**)Coefficiente di partizione suolo-acqua k_d a pH 7

In

Tabella R.3-2 si riporta schematicamente il criterio di costruzione del modello concettuale. Mentre in Tabella R.3-3 sono elencati i parametri relativi al suolo e all'inquinante necessari per effettuare le simulazioni differenziando tra modello numerico e modello analitico.

Tabella R.3-2: Elementi del modello concettuale

Elementi del modello concettuale	
Geometria del sito	[APAT, 2005] Livello 1
Geometria della sorgente	[APAT, 2005] Livello 1
Proprietà suolo	[APAT, 2005] Livello 1
Tipo di inquinanti	[APAT, 2005] Appendice B
CRS	Teoriche

Tabella R.3-3: Parametri caratteristici del modello numerico e analitico

PARAMETRI	MODELLO ANALITICO	MODELLO NUMERICO: CHEMFLO	MODELLO NUMERICO: VS2DTI
<i>PARAMETRI CHIMICO-FISICI DEL SUOLO</i>			
Θ_T	X	X	X
Θ_w	X	X	X
$\Theta_{w,sat}$	X	X	X
Θ_r	-	X	X
Θ_a	X	-	-
Ss	-	-	X
ρ_s	X	X	X
K	-	X	X
K_{sat}	-	X	-
P	X(*)	X	X
Altezza iniziale della pozza d'acqua	-	X	X
f_{oc}	X	X	-
ph suolo-acqua	X	X	X
H	-	X	X
<i>PARAMETRI CHIMICO-FISICI DEGLI INQUINANTI</i>			
D_w	-	X	X
D_a	-	-	-
A	-	X	X
H	X	-	-
K_{ow}	X	X	X
K_{oc}	X	X	X
K_s	X	X	X
Costante di degradazione nel liquido	-	X	X
Costante di degradazione nel solido	-	X	-
Costante di produzione	-	X	-

C_s	X	$x^{(**)}$	X
Concentrazione iniziale delle sostanze chimiche in soluzione nel suolo	-	$x^{(**)}$	-
Concentrazione di contaminante nell'acqua di infiltrazione		X	X
GEOMETRIA DEL SITO E DELLA SORGENTE DI CONTAMINAZIONE			
SAM	X	-	-
L_F	X	X	$X^{(****)}$
d_s	X	X	$X^{(****)}$
A	-	X	$X^{(****)}$
Suolo finito o semi-infinito	-	X	-
Suolo omogeneo o non omogeneo	-	X	X
ULTERIORI PARAMETRI			
Tempo totale della simulazione	-	X	X
Intervallo di tempo per ogni output	-	X	X
Quota alla quale si richiedono gli output	-	X	X
Intervallo spaziale (***) (Mesh Distance)	-	X	X
Intervallo temporale (***) (Mesh Time)	-	X	X

(*) Serve per il calcolo del LFD (fattore di diluizione): tiene conto della diluizione che il contaminante subisce, una volta raggiunta la falda, nel passaggio tra terreno insaturo e terreno saturo. Nella seguente simulazione non si terrà conto di tale passaggio, quindi nell'applicazione del modello analitico tale parametro non sarà utilizzato.

(**) Nei dati in input c'è l'opzione d'inserire o la concentrazione di contaminante totale o quella in soluzione nella sorgente.

(***) Intervalli necessari per la risoluzione alle differenze finite della equazione differenziale di governo.

(****) Tali informazioni sono introdotte con il disegno dell'area di studio.

Nelle simulazioni si considera la circostanza in cui è l'acqua piovana, infiltratasi nel suolo inquinato, che permette la migrazione del contaminante fino all'acquifero superficiale. L'intensità di precipitazione può essere valutata applicando l'equazione di bilancio idrologico, espressa nei minimi termini, riportata nel testo del presente documento, equazione (3.2.5).

Poiché il suolo in oggetto è un "Loamy Sand", invertendo l'equazione (3.2.6) si ricava l'intensità di precipitazione P :

$$P = \left(\frac{I_{eff}}{0,0018} \right)^{1/2} = 129,1 \text{ cm/anno} = 0,0147 \text{ cm/h}$$

Per i parametri fisici del suolo (Tabella R.3-4) e chimici del contaminante (Tabella R.3-5, Tabella R.3-8, Tabella R.3-11, Tabella R.3-14) ci riferiamo ai valori di default previsti dalla banca dati del presente documento.

Tabella R.3-4: Caratteristiche fisiche del suolo

CARATTERISTICHE FISICHE DEL TERRENO ZONA INSATURA	
ρ_s	1,7 g/cm ³
Θ_T	0.38 adim.
Θ_w	0.12 adim.
Θ_a	0,26 adim.
f_{oc}	0.01 g(carbonio)/ g(suolo)
I_{eff}	30 cm/anno
P^*	129 cm/anno

Per ogni contaminante selezionato sono state effettuate tre simulazioni denominate CASO1, CASO2 e CASO3 in cui è stata fatta variare la profondità dello spessore di contaminazione (3 cm, 1 m, 2 m). Per ogni caso stata calcolata la concentrazione in soluzione alla base della zona insatura ricavata tramite il modello analitico e numerico.

I risultati ottenuti sono stati utilizzati per effettuare l'Analisi di Rischio sanitaria descritta nel capitolo successivo.

R.3.1 Suolo contaminato da Benzene

E' stato ipotizzato un suolo contaminato da Benzene, supponendo una concentrazione alla sorgente 100 volte superiore a quella prevista dalla normativa vigente per i siti contaminati. Per suoli ad uso industriale e commerciale la concentrazione massima ammessa di Benzene è di 2 mg/Kg, quindi è stata assunta una concentrazione pari a 200 mg/Kg (=340 g/m³).

R.3.1.1 Caso 1: Suolo contaminato da Benzene per uno spessore di 3 cm

Nella Tabella R. 3-5 sono riportate tutte le grandezze utilizzate per effettuare il confronto fra i due modelli.

Tabella R.3-5: Grandezze utilizzate per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
Θ_w	0,12 adim	0,12 adim	0,12 adim
$\Theta_{w,sat}$	-	0,35 adim	-
Θ_r	-	0,057 adim	0,057 adim
Θ_a	-	0,26 adim	-
Θ_T	-	-	0,38
ρ_s	1,7 g/cm ³	1,7 Mg/m ³ (**)	1,7E06 g/m ³ (***)

K_{sat}	-	2 cm/h (**)	0,02 m/h (***)
P	-	0,0147 cm/h (**)	1,47E-04 m/h (***)
f_{oc}	0,01	0,01	-
D_w	-	0,035 cm ² /h (**)	3,5E-06 m ² /h (***)
α	-	2 cm	0,02 m
H	0,228 adim	-	-
K_s	0,62 ml/g	0,62 m ³ /Mg (**)	6,2E-7 m ³ /g (***)
K_{ws}	1,38 Kg/l	-	-
C_s	200 mg/Kg	340 g/m ³ (*)	340 g/m ³ (*)
$C_{inflowing}$	-	0	0
λ_L	-	0	0
λ_s	-	0	0
Costante di produzione	-	0	-
SAM	0,01	-	-
L_F	3 m	300 cm (**)	3 m (***)
d_s	3 cm	3 cm	3 cm
α_p	-	0	0
Suolo finito	-	X (****)	-
Suolo omogeneo	-	X (****)	-
Tempo totale della simulazione	-	5 anni	5 anni
Intervallo di tempo per ogni output	-	3 mesi	3 mesi
Intervallo spaziale (<i>Mesh Distance</i>)	-	1 cm	1E-07 m
Intervallo temporale (<i>Mesh Time</i>)	-	0,5 h	0,001h

(*) $C_s = C_s (mg / Kg) \cdot \rho_s (Kg / m^3) = 340 g / m^3$

(**) Unità di misura richieste dal Chemflo.

(***) Unità di misura utilizzate per il VS2DTI.

(****) Sono delle opzioni richieste dal Chemflo in input per schematizzare il suolo.

CASO 1(analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura.

Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 2,76 g / m^3$$

Nel caso in cui si trascuri l'effetto dell'attenuazione dovuto al SAM, che tiene conto del percorso che l'inquinante fa per raggiungere il piano di falda (SAM=1), applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 276 \text{ g / m}^3$$

CASO 1(numerico)

Per determinare la concentrazione in soluzione di Benzene utilizzando il modello numerico occorre fare delle simulazioni attraverso l'uso di software specifici. I dati necessari per la simulazione risultano essere in numero molto maggiore a quelli necessari nel caso analitico, questo perchè i software considerano anche i parametri fisici e quelli idraulici del suolo.

I due approcci hanno ovviamente differenze sostanziali; al di là della soluzione matematica usata, possiamo notare le numerose condizioni al contorno e le condizioni iniziali che i due software (Chemflo e VS2DTI) richiedono sul suolo, sul contaminante, e sulle modalità di trasporto di quest'ultimo, non previste nel modello analitico.

Nella modellizzazione abbiamo supposto che:

- L'acqua infiltrata tramite la pioggia (si richiede la *rainfall rate* o *precipitation rate*) sia priva di contaminazione (*concentration of inflowing solution*);
- Il suolo sia omogeneo con un contenuto volumetrico d'acqua uniforme;
- Il trasporto dell'acqua alla base della zona vadosa (x=3m) è dovuto solo alla gravità, in quanto il potenziale di matrice è nullo (*free drainage* o *possibile seepage face*) e quello del contaminante è governato solo dal flusso convettivo, si trascurano la diffusione e la dispersione (*convective flow only*);
- I parametri relativi al trasporto nell'intera zona siano il coefficiente di diffusione in acqua, la dispersività e il coefficiente di ripartizione del Benzene.

Il Chemflo e il VS2DTI forniscono i risultati desiderati in funzione del tempo e di punti specifici (di controllo) all'interno della matrice fornendo la possibilità di impostazione da parte dell'utente. Si ricorda che, nei modelli analitici la variabile tempo non esiste.

In Figura R.3.1 si riporta il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di Benzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Come si può notare l'inquinante in esame raggiunge la zona satura solo dopo un tempo superiore a 24 mesi; il picco massimo di concentrazione si raggiunge dopo 3 mesi (verificato da entrambi i software) dopodiché subisce una diminuzione al variare del tempo e della profondità, ma allo stesso tempo si nota uno spanciamento del plume.

Si noti come per le stesse profondità il VS2DTI presenta concentrazioni maggiori rispetto al Chemflo a parità di contaminazione iniziale, sulla natura di questo risultato si parlerà diffusamente nelle conclusioni del presente lavoro. Bisogna altresì notare come le curve che rappresentano i risultati dei due programmi abbiano lo stesso andamento.

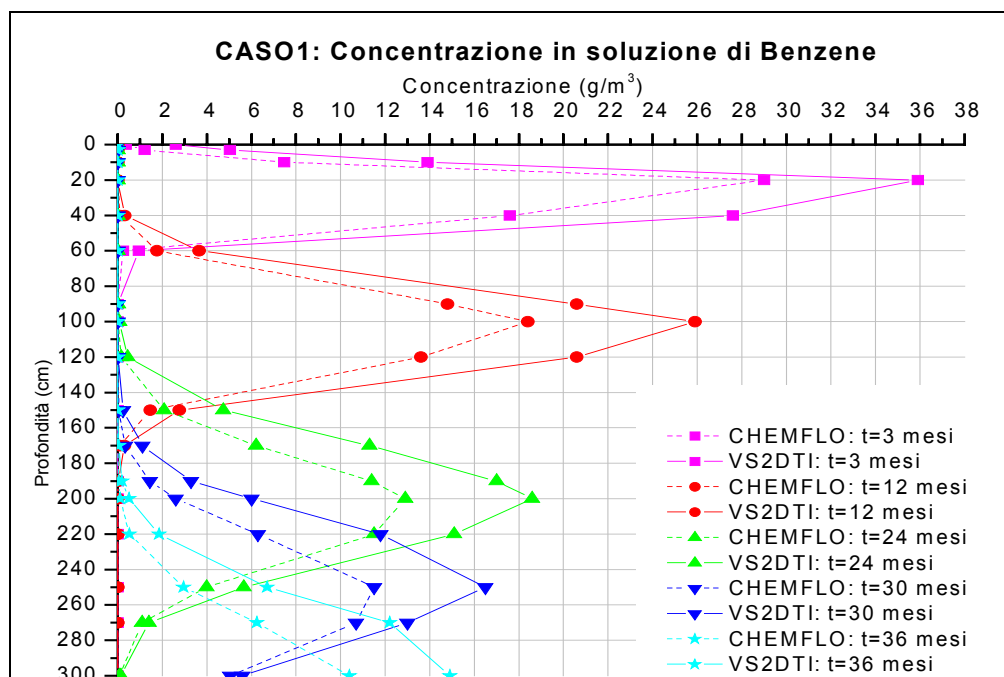


Figura R.3.1: Concentrazione in soluzione di Benzene al variare della profondità

In Figura R.3.2 si riporta l'andamento, in funzione del tempo, della concentrazione di Benzene in soluzione alla profondità $x=300$ cm per il modello analitico e per quello numerico (Chemflo 2000 e VS2DTI). Si noti che, essendo il modello analitico indipendente dal tempo, la concentrazione rimane sempre costante. Invece gli output forniti dai software assumono un andamento parabolico essendo dipendenti da esso. La concentrazione di Benzene in soluzione al livello della falda ($x=300$) è inizialmente nulla e aumenta con il passare del tempo fino ad arrivare ad un valore massimo (raggiunto per un tempo pari a 36 mesi), maggiore di quello calcolato con il modello analitico (caso $SAM=0,01$), per poi diminuire fino a tendere a zero. Analizzando le tre curve si nota che considerare un approccio analitico significa prevedere che in falda arrivi per tutto il periodo dello studio la stessa concentrazione di contaminante. Al contrario con il modello numerico si presume che in falda non arrivi sempre la stessa quantità di contaminante, in quanto fino a $t=20$ mesi l'inquinante non riesce a percolare fino alla base della zona insatura, tra i 20 e 50 mesi c'è il passaggio completo del Benzene in falda, dopo i 50 mesi la zona vadosa può essere considerata

incontaminata. Il differente comportamento dei due modelli diventa determinante nel calcolo del Rischio Sanitario, che sarà affrontato e discusso nel capitolo successivo.

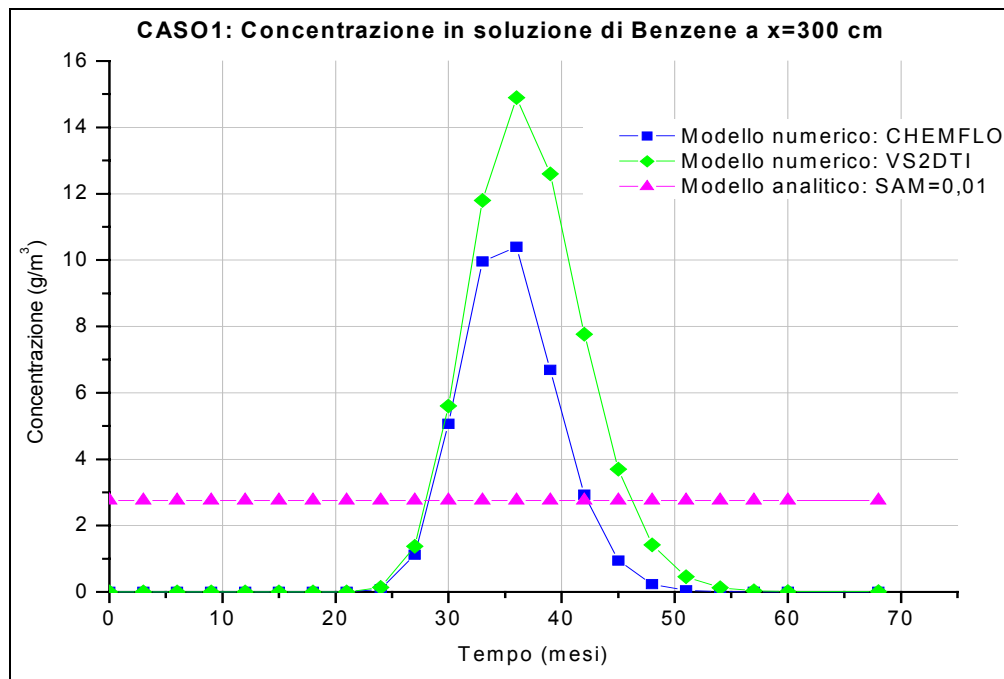


Figura R.3.2: Andamento della concentrazione di Benzene a x=300 cm

Il grafico di Figura R.3.3 mette a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Da tale studio risulta che non considerando l'effetto d'attenuazione si ottiene una sovrastima delle concentrazioni alla fine della zona insatura.

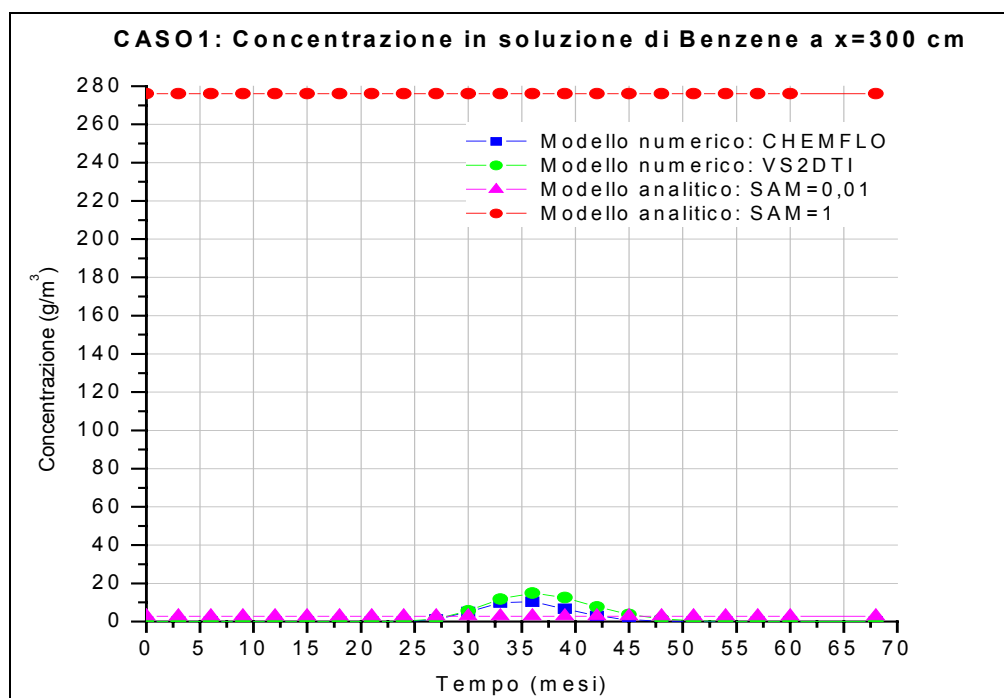


Figura R.3.3: Confronto modello analitico e numerico

R.3.1.2 Caso 2: Suolo contaminato da Benzene per uno spessore di 1 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 1 m di profondità, nella Tabella R.3-6 sono riportati i parametri del CASO 2 che variano rispetto a quelli di Tabella R.3-5 relativi al CASO1:

Tabella R.3-6 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,33	-	-
L_F	3 m	300 cm	3 m
d_s	1 m	1 m	1 m

CASO 2 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa il primo m di zona insatura. Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 91,08 \text{ g} / \text{m}^3$$

CASO 2 (numerico)

In Figura R.3.4 si riporta l'andamento della concentrazione di Benzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati, fornita rispettivamente dal software Chemflo e VS2DTI.

Per uno spessore di contaminazione pari a 1 m i software stimano a parità di profondità una concentrazione in soluzione di Benzene simile, infatti le curve che rappresentano i risultati dei due programmi sono molto vicine.

Essendo il suolo contaminato per uno spessore di 1 m la quantità di Benzene che passa in soluzione è maggiore di quella del CASO1 (numerico). Come si può notare dalla figura l'inquinante in esame raggiunge la zona satura solo dopo un tempo superiore a 24 mesi; il picco massimo della concentrazione si riscontra per un tempo pari a 3 mesi, e rimane costante fino a $t=12$ mesi dopodiché subisce una diminuzione al variare del tempo, ma contemporaneamente si osserva uno spanciamento del plume, tuttavia ad un tempo $t=36$ mesi quasi tutto l'inquinante è passato in falda.

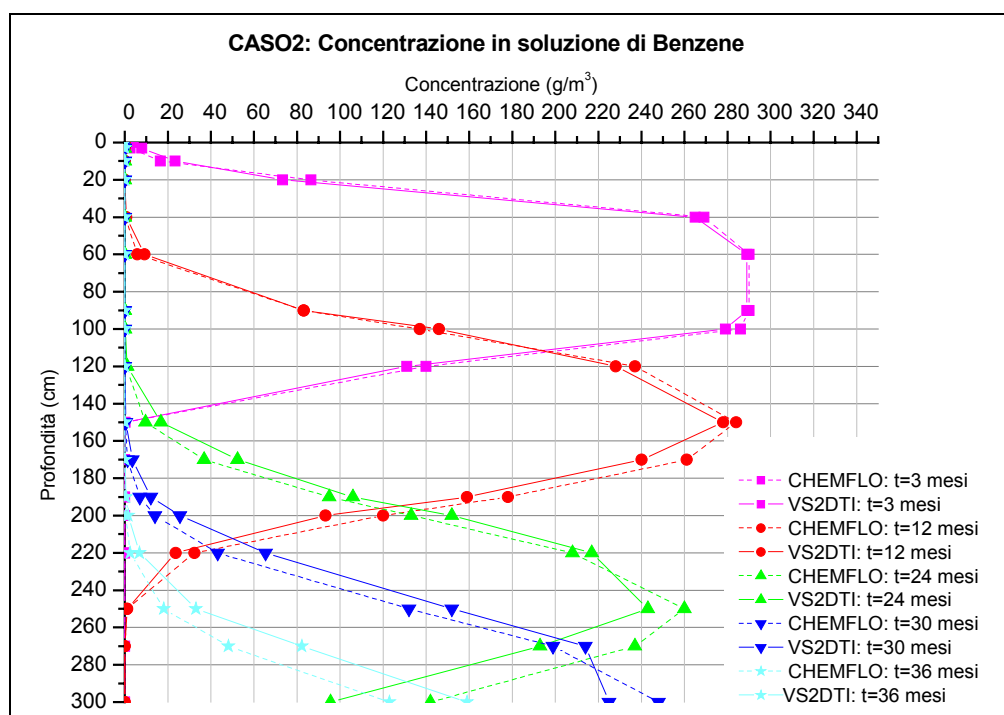


Figura R.3.4: Andamento della concentrazione di Benzene a $x=300$ cm

Per il grafico in Figura R.3.5 valgono le stesse considerazioni fatte per la figura 4.4, la massima concentrazione di Benzene, alla profondità $x=300$ cm, si ottiene al tempo $t=30$ mesi; essendo lo strato contaminato più profondo, alla base della zona vadosa si osservano concentrazioni maggiori rispetto al caso 1 (numerico). Confrontando i due software si vede che il contaminante secondo il Chemflo passa in falda più velocemente. La sua curva d'involuppo è traslata indietro rispetto a quella del VS2DTI, cioè a parità di tempo, prima del raggiungimento della concentrazione massima, presenta valori maggiori di concentrazione e dopo minori.

Nella Figura R.3.5 sono inoltre posti a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Si osserva, che rispetto al CASO 1 la differenza tra il valore della concentrazione di Benzene valutato con il modello analitico con SAM=1 e quella massima stimata dal numerico è diminuita.

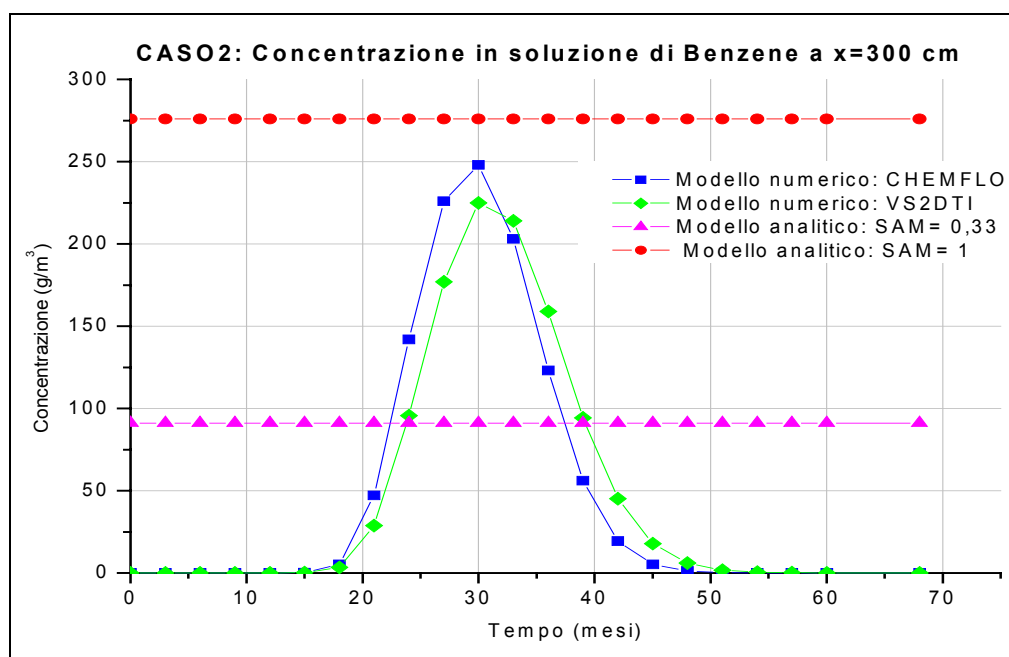


Figura R.3.5: Confronto modello analitico e numerico

R.3.1.3 Caso 3: Suolo contaminato da Benzene per uno spessore di 2 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 2 m di profondità, nella Tabella R.3-7 sono riportati i parametri del CASO 3 che variano rispetto a quelli esposti nella Tabella R.3-5 relativi al CASO1:

Tabella R.3-7 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,67	-	-
L_F	3 m	300 cm	3 m
d_s	2 m	2 m	2 m

CASO 3 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 2 m di zona insatura. Applicando modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 184,92 \text{ g / m}^3$$

CASO 3 (numerico)

La Figura R.3.6 mostra il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di Benzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. L'inquinante in esame raggiunge la zona satura in un tempo inferiore ai 12 mesi, ossia in un tempo minore di quello osservato nel CASO1 e CASO2. Ciò è dovuto al fatto che lo spessore di contaminazione è maggiore (pari a 2 m), e in proporzione la profondità della zona insatura incontaminata da attraversare è diminuita. Lo spessore di contaminazione influenza anche l'andamento del picco massimo, che rimane costante fino a quando l'inquinante arriva in falda.

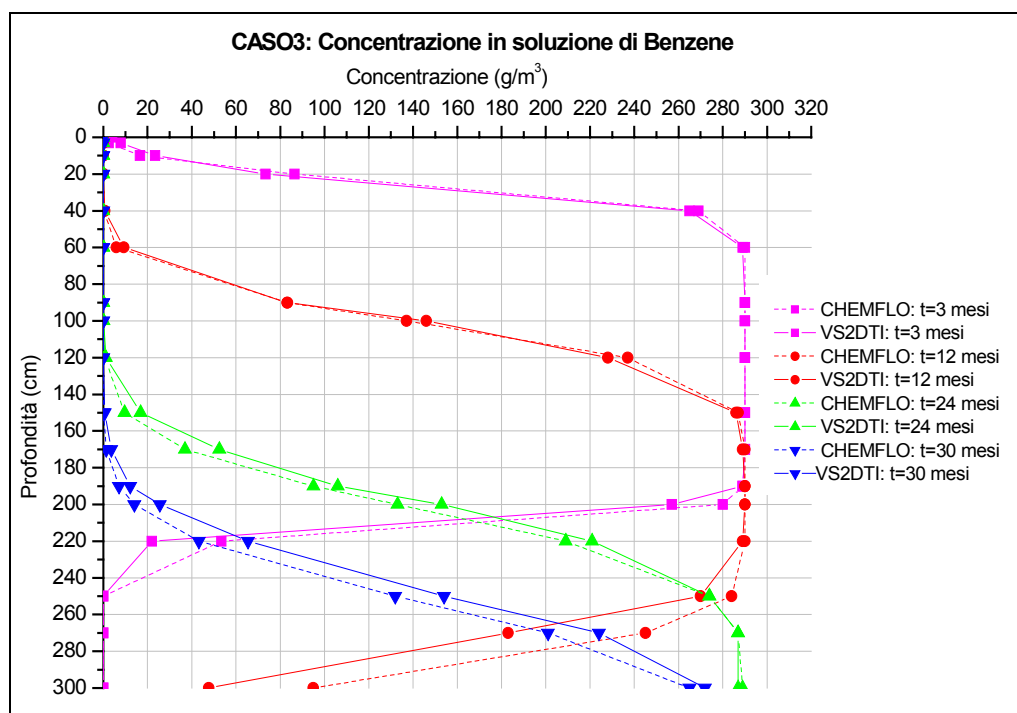


Figura R.3.6: Concentrazione in soluzione di Benzene al variare della profondità

Per il grafico in Figura R.3.7 valgono le stesse considerazioni fatte per la Figura R.3.3 e Figura R.3.5, la massima concentrazione di Benzene, alla profondità $x=300$ cm, si ottiene al tempo $t=24$ mesi. Anche in questo caso il contaminante si muove più velocemente secondo il Chemflo rispetto al VS2DTI. In Figura R.3.7 si riportano inoltre i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Si osserva che la concentrazione massima di

Benzene, stimata con il modello numerico, è maggiore di quella valutata con il modello analitico con SAM=1.

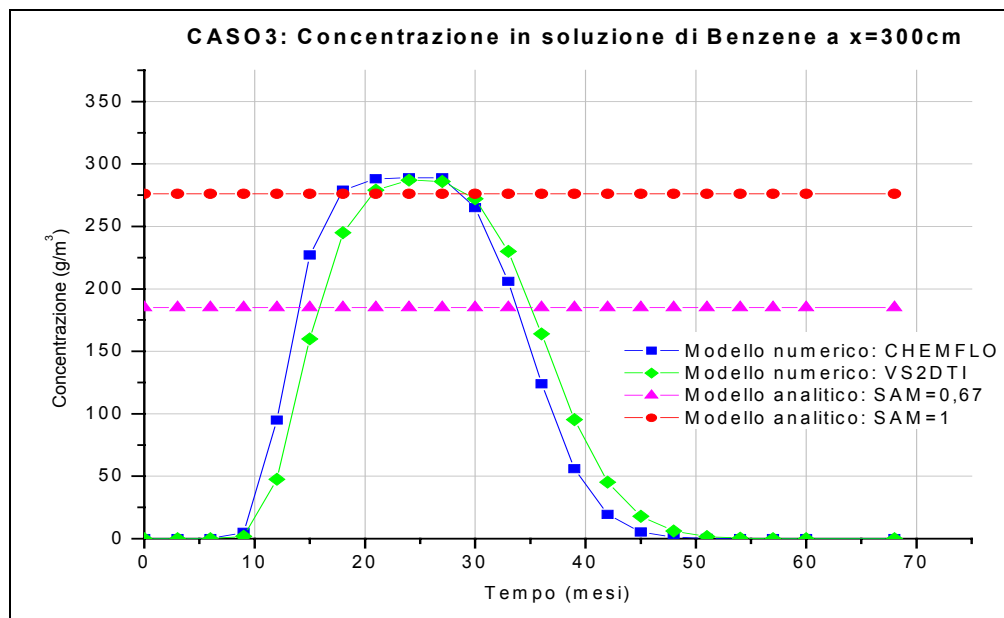


Figura R.3.7: Confronto modello analitico e numerico

R.3.2 Suolo contaminato da 1,1,2,2Tetracloroetano

Si ripetono le simulazioni CASO 1, CASO 2 e CASO 3, però per tale studio si ipotizza il suolo contaminato da 1,1,2,2Tetracloroetano, anziché da Benzene. In questo caso, non è possibile usare per la simulazione una concentrazione 100 volte superiore a quella prevista dai limiti di riferimento della normativa vigente, che per suoli ad uso industriale e commerciale è di 20 mg/kg e quindi si dovrebbe considerare una concentrazione alla sorgente pari a 3400 g/m³ però il Chemflo accetta concentrazioni iniziali fino a 1000 g/m³.

$$C_s = C_s(\text{mg/Kg}) \cdot \rho_s(\text{Kg/m}^3) = 2000 \cdot 1,7 \cdot 10^3 = 3400 \text{ g/m}^3$$

Per tale ragione consideriamo alla sorgente una concentrazione pari a 1000 g/m³ (590 mg/kg).

R.3.2.1 Caso 1: Suolo contaminato da 1,1,2,2Tetracloroetano per uno spessore di 3 cm

Nella Tabella R 3-8 sono riportate tutte le grandezze utilizzate per effettuare il confronto fra i due modelli.

Tabella R.3-8 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
Θ_w	0,12 adim	0,12 adim	0,12 adim
$\Theta_{w,sat}$	-	0,35 adim	-
Θ_r	-	0,057 adim	0,057 adim
Θ_a	-	0,26 adim	-
Θ_T	-	-	0,38
ρ_s	1,7 g/cm ³	1,7 Mg/m ³ (*)	1,7E06 g/m ³ (**)
K_{sat}	-	2 cm/h (*)	0,02 m/h (**)
P	-	0,0147 cm/h (*)	1,47E-04 m/h (**)
f_{oc}	0,01	0,01	-
D_w	-	0,028 cm ² /h	2,8E-06 m ² /h (**)
α	-	2 cm	0,02 m
H	1,41*10 ⁻²	-	-
K_s	0,79 ml/g	0,79 m ³ /Mg (*)	7,9E-7 m ³ /g (**)
K_{ws}	1,16 Kg/l	-	-
C_s	590 mg/Kg	1000 g/m ³	1000 g/m ³
Concentrazione di contaminante nell'acqua di infiltrazione	-	0	0
Costante di degradazione nel liquido	-	0	0
Costante di degradazione nel solido	-	0	0
Costante di produzione	-	0	-
SAM	0,01	-	-
L_F	3 m	300 cm (*)	3 m (**)
d_s	3 cm	3 cm	3 cm
α_p	-	0	0
Suolo finito	-	X (***)	-
Suolo omogeneo	-	X (***)	-
Tempo totale della simulazione	-	5 anni	5 anni
Intervallo di tempo per ogni output	-	3 mesi	3 mesi
Intervallo spaziale (<i>Mesh Distance</i>)	-	1 cm	1E-07 m
Intervallo temporale (<i>Mesh Time</i>)	-	0,5 h	0,001h

(*) Unità di misura richieste dal Chemflo.

(*) Unità di misura utilizzate nel VS2DTI.

(**) Sono delle opzioni richieste dal Chemflo in input per schematizzare il suolo.

CASO 1(analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura. Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 6,844 \text{ g / m}^3$$

Nel caso in cui si trascuri l'effetto dell'attenuazione dovuto al SAM che tiene conto del percorso che l'inquinante fa per raggiungere il piano di falda (SAM=1), applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 684,4 \text{ g / m}^3$$

CASO 1(numerico)

In Figura R.3.8 si riporta il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Come si può notare dalla figura l'inquinante in esame raggiunge la zona satura solo dopo un tempo superiore a 30 mesi; il picco massimo di concentrazione si raggiunge dopo 3 mesi (verificato da entrambi i software) dopodiché subisce una diminuzione al variare del tempo e della profondità, ma allo stesso tempo si nota uno spanciamento del plume.

Si noti che alle stesse profondità il Chemflo presenta concentrazioni maggiori rispetto al VS2DTI a parità di contaminazione iniziale; il fenomeno è inverso rispetto a quello osservato per il Benzene CASO1, sulla natura di questo risultato si parlerà diffusamente nelle conclusioni del presente lavoro. Bisogna altresì notare che le curve che rappresentano i risultati dei due programmi hanno lo stesso andamento.

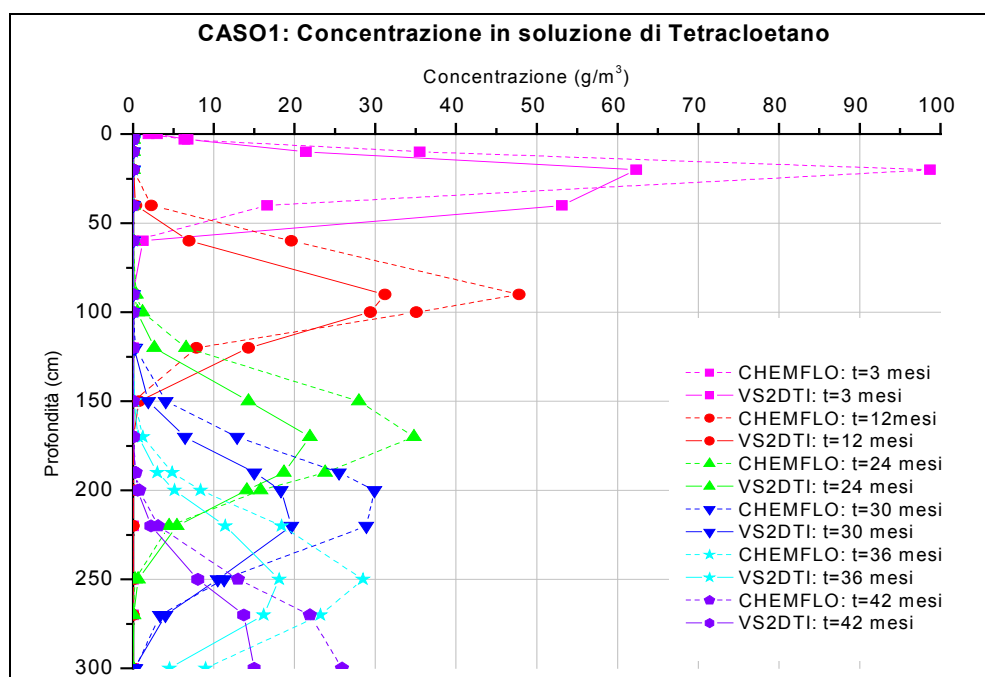


Figura R.3.8: Concentrazione in soluzione di 1,1,2,2Tetracloroetano al variare della profondità

In Figura R.3.9 si riporta l'andamento, in funzione del tempo, della concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione alla profondità $x=300$ cm per il modello analitico e quello numerico (Chemflo 2000 e VS2DTI). Gli output forniti dai software assumono un andamento parabolico essendo dipendenti dal tempo. La concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione prima del passaggio in falda ($x=300$) è nulla fino a $t=30$ mesi successivamente aumenta con il passare del tempo fino ad arrivare ad un valore massimo, maggiore di quello calcolato con il modello analitico (caso $SAM=0,01$), per poi diminuire fino a tendere a zero.

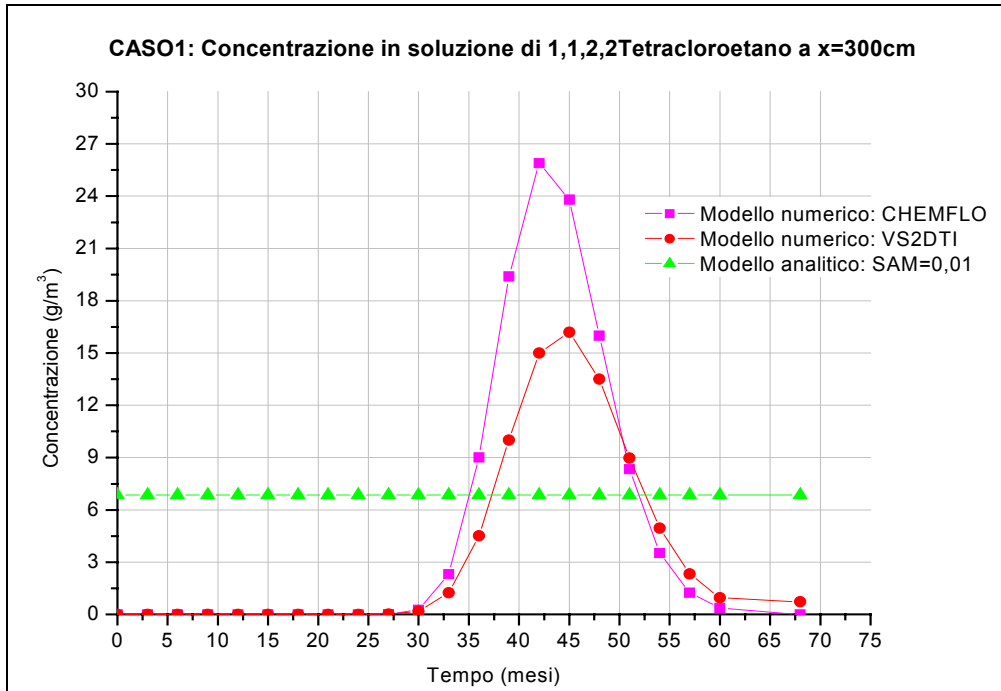


Figura R.3.9: Andamento della concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano a x=300 cm

Il grafico di Figura R.3.10 mette a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico, analitico con SAM e analitico senza SAM. Da tale studio risulta che non considerando l'effetto d'attenuazione si ottiene una sovrastima delle concentrazioni alla fine della zona insatura.

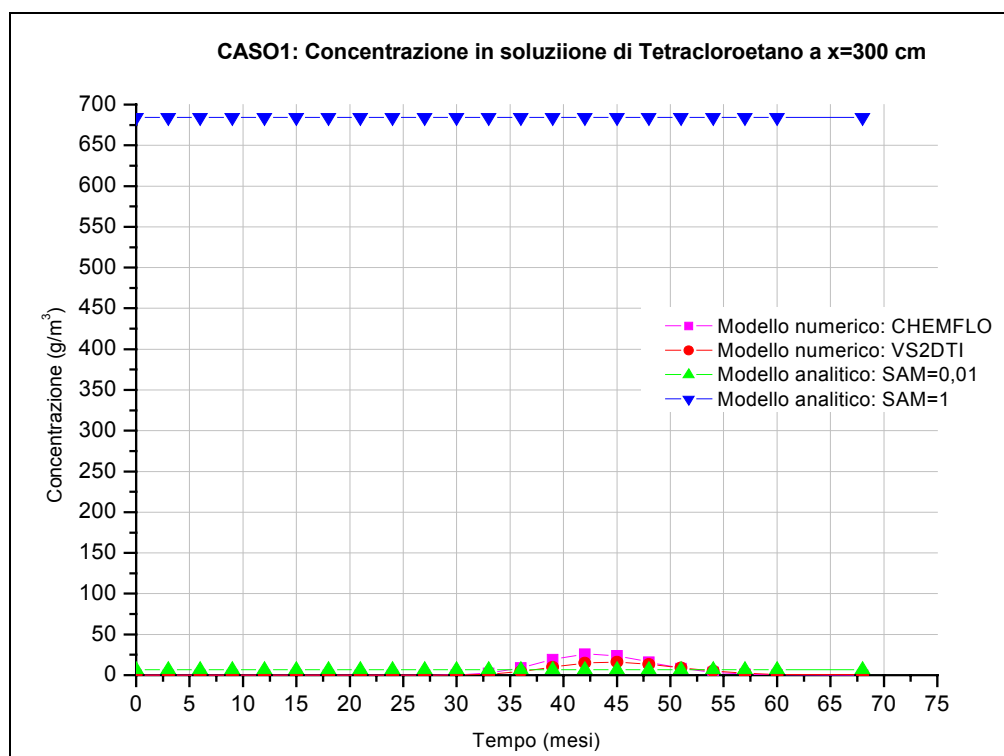


Figura R.3.10: Confronto modello analitico e numerico

R.3.2.2 Caso 2: Suolo contaminato da 1,1,2,2Tetrachloroetano per uno spessore di 1 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 1 m di profondità, nella Tabella R.3-9 sono riportati i parametri del CASO 2 che variano rispetto a quelli esposti nella Tabella R.3-8 relativi al CASO1:

Tabella R.3-9 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	CHEMFLO
SAM	0,33	-	-
L_F	3 m	300 cm (**)	3 m
d_s	1 m	1 m	1 m

CASO 2 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa il primo m di zona insatura. Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 225,85 \text{ g} / \text{m}^3$$

CASO 2 (numerico)

Nel grafico di Figura R.3.11 si riporta il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. L'inquinante raggiunge la zona satura solo dopo un tempo superiore a 24 mesi. Il picco massimo della concentrazione si riscontra per un tempo pari a 3 mesi, in seguito all'aumentare del tempo la concentrazione massima diminuisce e si osserva a profondità maggiori. Le curve rappresentative dei due programmi sono simili solo che il VS2DTI si muove più velocemente del Chemflo.

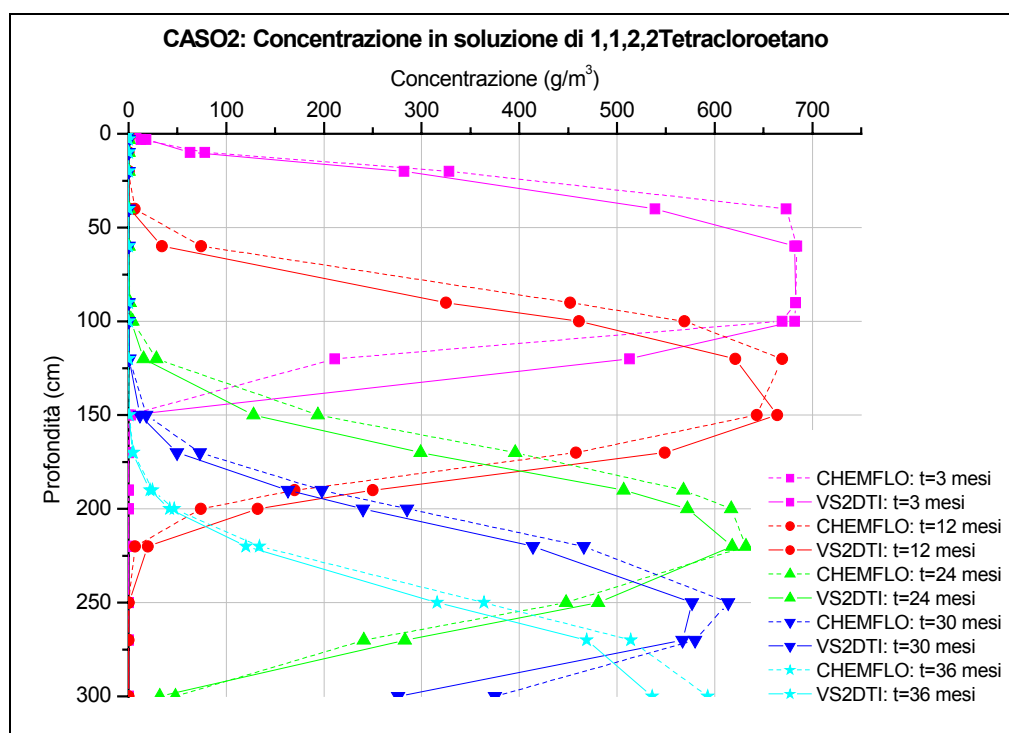


Figura R.3.11: Concentrazione in soluzione di 1,1,2,2Tetracloroetano al variare della profondità

In Figura R.3.12 si riporta l'andamento, in funzione del tempo, della concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione alla profondità $x=300$ cm per il modello analitico e quello numerico (Chemflo 2000 e VS2DTI). Per tale figura valgono le stesse considerazioni fatte per la Figura R.3.10, però essendo lo strato contaminato più profondo, alla base della zona vadosa si osservano concentrazioni maggiori rispetto al CASO1 (numerico). Il contaminante secondo il Chemflo passa in falda più velocemente, come per il CASO2 (numerico) del Benzene. La sua curva d'involuppo è traslata indietro rispetto a quella del VS2DTI, cioè a parità di tempo, prima del raggiungimento della concentrazione massima, presenta valori maggiori di concentrazione e dopo minori.

Il grafico di Figura R.3.12 mette inoltre a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Si osserva, che rispetto al CASO 1 la differenza tra il valore della concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano valutato con il modello analitico con SAM=1 e quella massima stimata dal numerico è diminuita.

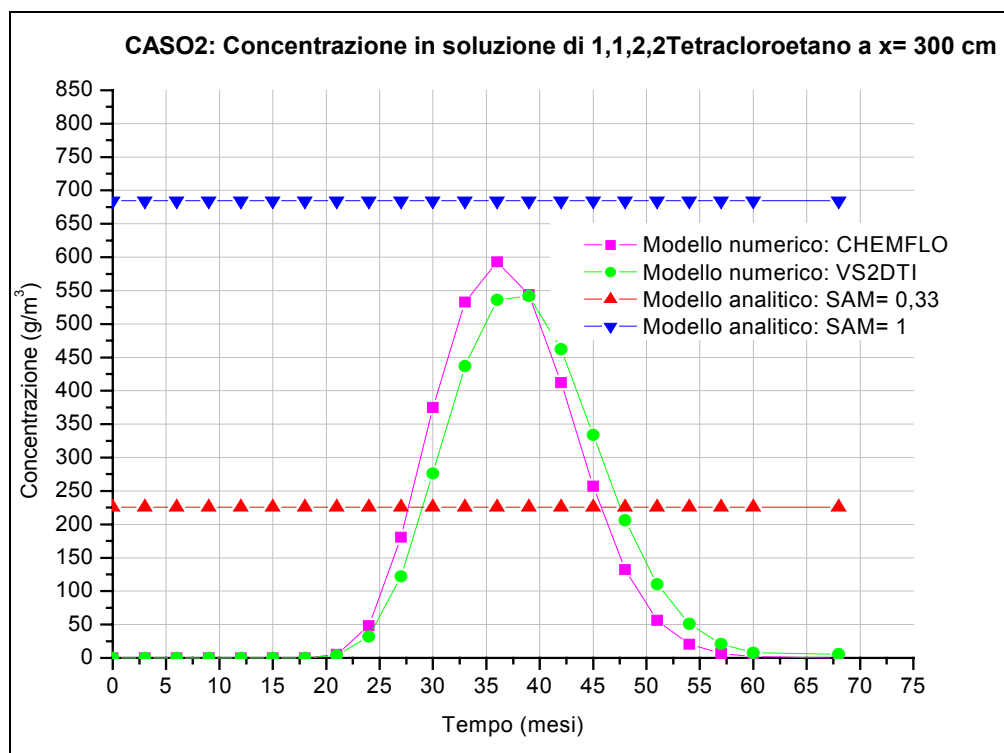


Figura R.3.12: Confronto modello analitico e numerico

R.3.2.3 Caso 3: Suolo contaminato da 1,1,2,2Tetracloroetano per uno spessore di 2 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 2 m di profondità, nella Tabella R.3-10 sono riportati i parametri del CASO 3 che variano rispetto a quelli esposti nella tab. 23 relativi al CASO1:

Tabella R.3-10 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,67	-	-
L_F	3 m	300 cm (**)	3 m
d_s	2 m	2 m	2 m

CASO 3 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa il primi 2 m di zona insatura. Applicando modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 458,67 \text{ g / m}^3$$

CASO 3 (numerico)

Nel grafico di Figura R.3.13 si riporta il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. L'inquinante in esame raggiunge la zona satura in un tempo inferiore ai 12 mesi, ossia in un tempo minore di quello osservato nel CASO1 e CASO2. Ciò è dovuto al fatto che lo spessore di contaminazione è maggiore (pari a 2 m), e in proporzione la profondità della zona insatura incontaminata da attraversare è diminuita. Lo spessore di contaminazione influenza anche l'andamento del picco massimo, che rimane costante fino a quando l'inquinante arriva in falda. In questo caso le curve di inviluppo dei risultati dei due software sono quasi coincidenti.

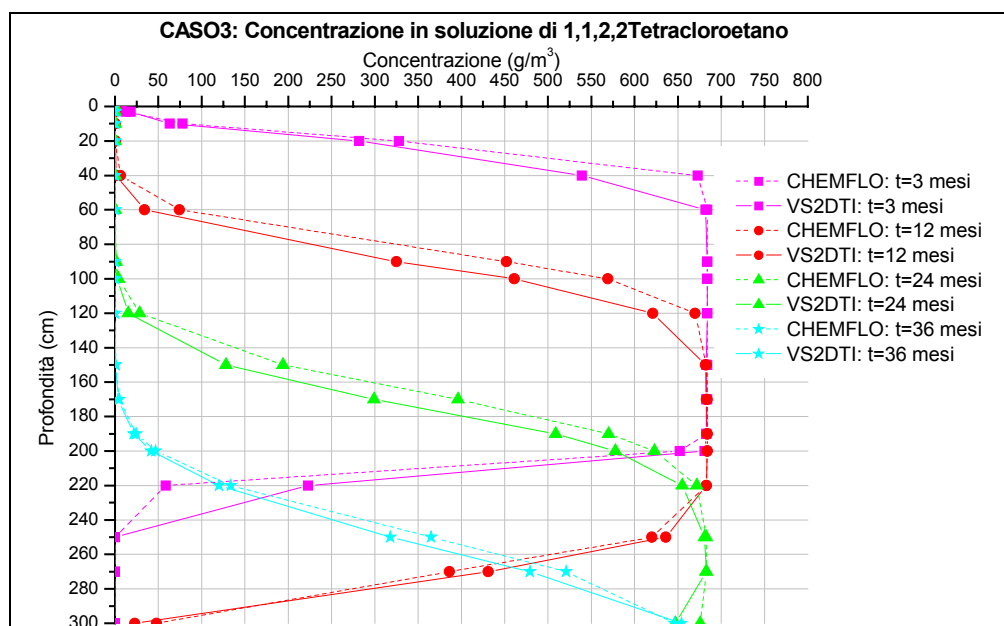


Figura R.3.13: Concentrazione in soluzione di 1,1,2,2Tetracloroetano al variare della profondità

Per il grafico in Figura R.3.14 valgono le stesse considerazioni fatte per la Figura R.3.10 e la Figura R.3.12, la massima concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano, alla profondità $x=300$ cm, si ottiene al tempo $t=30$ mesi. Anche in questo caso il contaminante si muove più velocemente secondo il Chemflo rispetto al VS2DTI.

Il grafico di Figura R.3.14 mette inoltre a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico, analitico con SAM e analitico senza SAM.

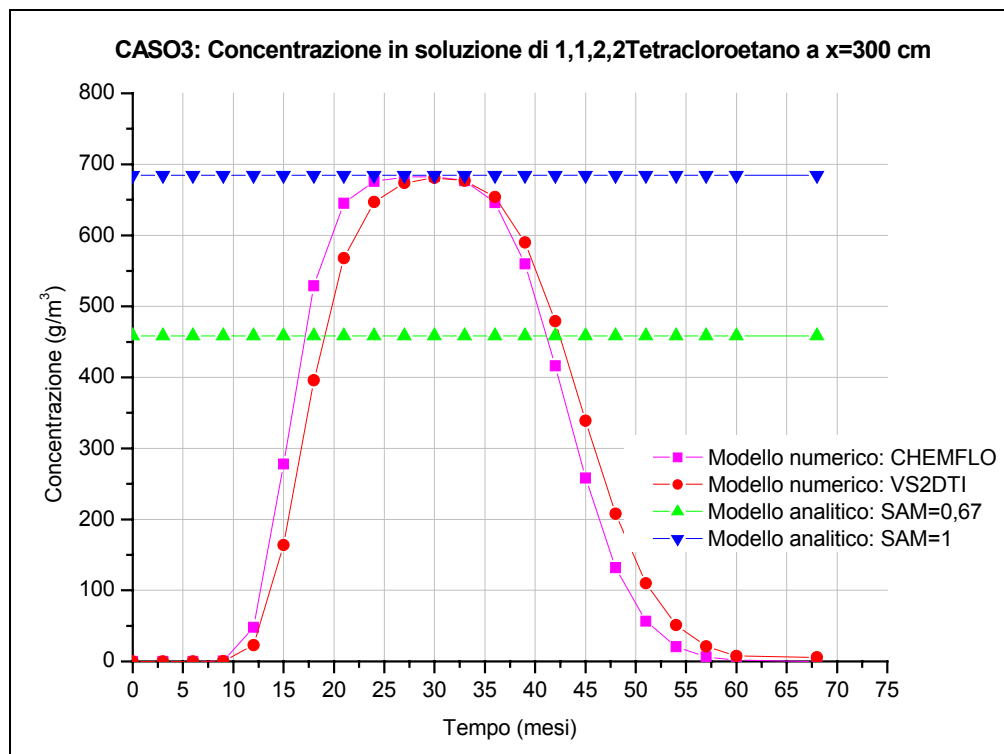


Figura R.3.14: Confronto modello analitico e numerico

R.3.3 Suolo contaminato da 1,4Diclorobenzene

Si ripetono le simulazioni CASO 1 e CASO 2 e CASO 3 però il suolo si considera contaminato da 1,4Diclorobenzene. Anche in questo caso come per 1,1,2,2Tetracloroetano, non è possibile usare per la simulazione una concentrazione 100 volte superiore ai limiti di riferimento della normativa vigente sui siti contaminati, che per suoli ad uso industriale e commerciale è di 10 mg/kg e quindi si dovrebbe considerare una concentrazione alla sorgente pari a 1700 g/m³, perché il Chemflo accetta concentrazioni iniziali fino a 1000 g/m³.

$$C_s = C_s(mg / Kg) \cdot \rho_s(Kg / m^3) = 1000 \cdot 1,7 \cdot 10^3 = 1700 g / m^3$$

Per tale ragione consideriamo alla sorgente una concentrazione pari a 1000 g/m³ (590 mg/kg).

R.3.3.1 Caso 1: Suolo contaminato da 1,4Diclorobenzene per uno spessore di 3 cm

Nella seguente Tabella R.3-11 sono riportate tutte le grandezze utilizzate per effettuare il confronto tra i due modelli.

Tabella R.3-11 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
Θ_w	0,12 adim	0,12 adim	0,12 adim
$\Theta_{w,sat}$	-	0,35 adim	-
Θ_r	-	0,057 adim	0,057 adim
Θ_a		0,26 adim	-
Θ_T	-	-	0,38
ρ_s	1,7 g/cm ³	1,7 Mg/m ³ (*)	1,7E06 g/m ³ (**)
K_{sat}	-	2 cm/h (*)	0,02 m/h (**)
P	-	0,0147 cm/h (*)	1,47E-04 m/h (**)
f_{oc}	0,01	0,01	-
D_w	-	7,9 cm ² /sec	2,8E-06 m ² /h (**)
A	-	2 cm	0,02 m
H	-	9,96*10 ⁻² adim	-
K_s	6,12 ml/g	6,12 m ³ /Mg (*)	6,12E-6 m ³ /g (**)
K_{ws}	0,16 Kg/l	-	-
C_s	590 mg/Kg	1000 g/m ³	1000 g/m ³
Concentrazione di contaminante nell'acqua di infiltrazione	-	0	0
Costante di degradazione nel liquido	-	0	0
Costante di degradazione nel solido	-	0	0
Costante di produzione	-	0	-
SAM	0,01	-	-
L_F	3 m	300 cm (*)	3 m (**)
d_s	3 cm	3 cm	3 cm
α_p	-	0	0
Suolo finito	-	X (***)	-
Suolo omogeneo	-	X (***)	-
Tempo totale della simulazione	-	30 anni	30 anni
Intervallo di tempo per ogni output	-	3 mesi	3 mesi

Intervallo spaziale (<i>Mesh Distance</i>)	-	1 cm	1E-07 m
Intervallo temporale (<i>Mesh Time</i>)	-	0,5 h	0,001h

(*) Unità di misura richieste dal Chemflo.

(*) Unità di misura utilizzate nel VS2DTI.

(***) Sono delle opzioni richieste dal Chemflo in input per schematizzare il suolo.

CASO 1 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura.

Applicando modello analitico:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 0,944 \text{ g / m}^3$$

Nel caso in cui si trascuri l'effetto dell'attenuazione dovuto al SAM che tiene conto del percorso che l'inquinante fa per raggiungere il piano di falda (SAM=1), applicando modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 94,4 \text{ g / m}^3$$

CASO 1 (numerico)

In Figura R.2.1 si riporta il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,4Diclorobenzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Come si può notare dalla figura l'inquinante in esame raggiunge la zona satura solo dopo un tempo pari a 20 anni; il picco massimo di concentrazione si raggiunge dopo 3 mesi (verificato da entrambi i software) dopodiché subisce una diminuzione al variare del tempo e della profondità, ma allo stesso tempo si nota uno spanciamento del plume.

Si noti come per le stesse profondità il Chemflo presenta concentrazioni maggiori rispetto al VS2DTI a parità di contaminazione iniziale, sulla natura di questo risultato si parlerà diffusamente nelle conclusioni del presente lavoro. Bisogna altresì notare come le curve che rappresentano i risultati dei due programmi abbiano lo stesso andamento.

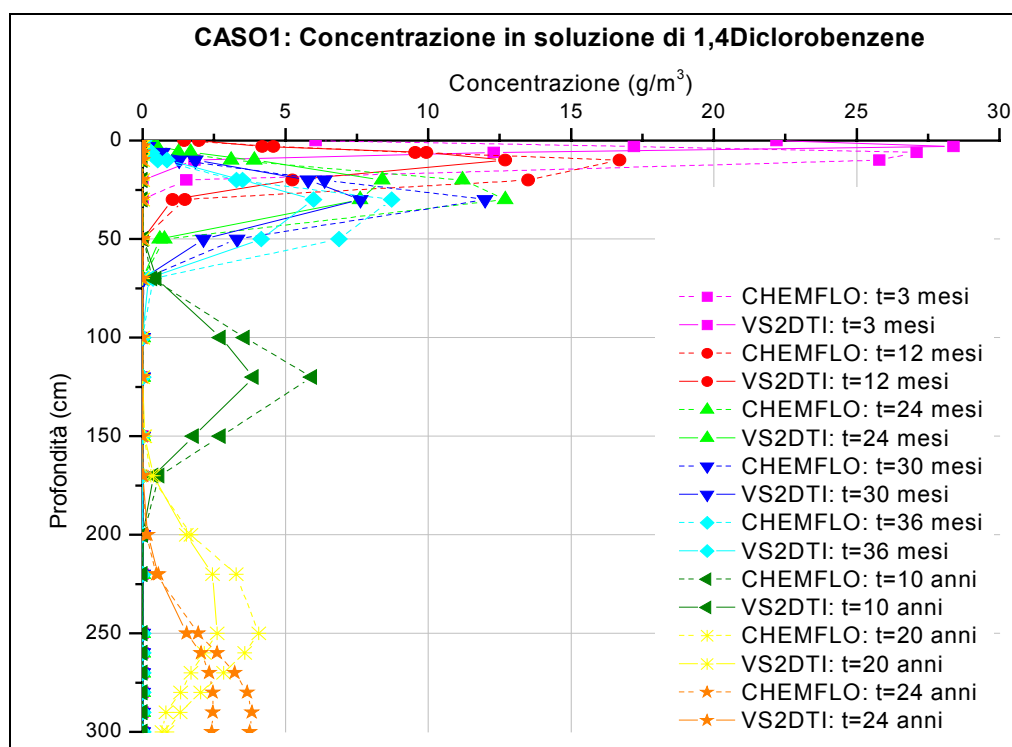


Figura R.3.15: Concentrazione in soluzione di 1,4Diclorobenzene al variare della profondità

In Figura R.3.16 si riporta l'andamento, in funzione del tempo, della concentrazione di 1,4 Diclorobenzene in soluzione alla profondità $x=300$ cm per il modello analitico e quello numerico (Chemflo e VS2DTI). Gli output forniti dai software assumono un andamento parabolico essendo dipendenti dal tempo, la concentrazione, infatti, è nulla per un lungo periodo di tempo (14 anni), successivamente aumenta fino ad arrivare ad un valore massimo (raggiunto a $t=24$ anni), maggiore di quello calcolato con il modello analitico (caso $SAM=0,01$), per poi diminuire nuovamente. Per questa simulazione è stata assunta una durata di studio di 30 anni, invece per le simulazioni effettuate con il Benzene e il 1,1,2,2Tetracloroetano è stato utilizzato un tempo d'osservazione di 5 anni. Gli intervalli presi in considerazione sono diversi perché si è notato che per i nostri casi studio, dopo 5 anni, nella zona insatura non c'è più traccia in soluzione di Benzene o di 1,1,2,2Tetracloroetano, questo significa che c'è stato il passaggio completo del contaminante in falda; invece il 1,4 Diclorobenzene impiega tempi maggiori per lisciviare in falda. Il comportamento del 1,4 Diclorobenzene è dovuto al suo coefficiente di partizione k_s , più elevato di quello degli altri due inquinanti, che determina una maggiore tendenza della sostanza ad essere assorbita dalla matrice solida del suolo e ad avere un maggior ritardo rispetto al moto dell'acqua.

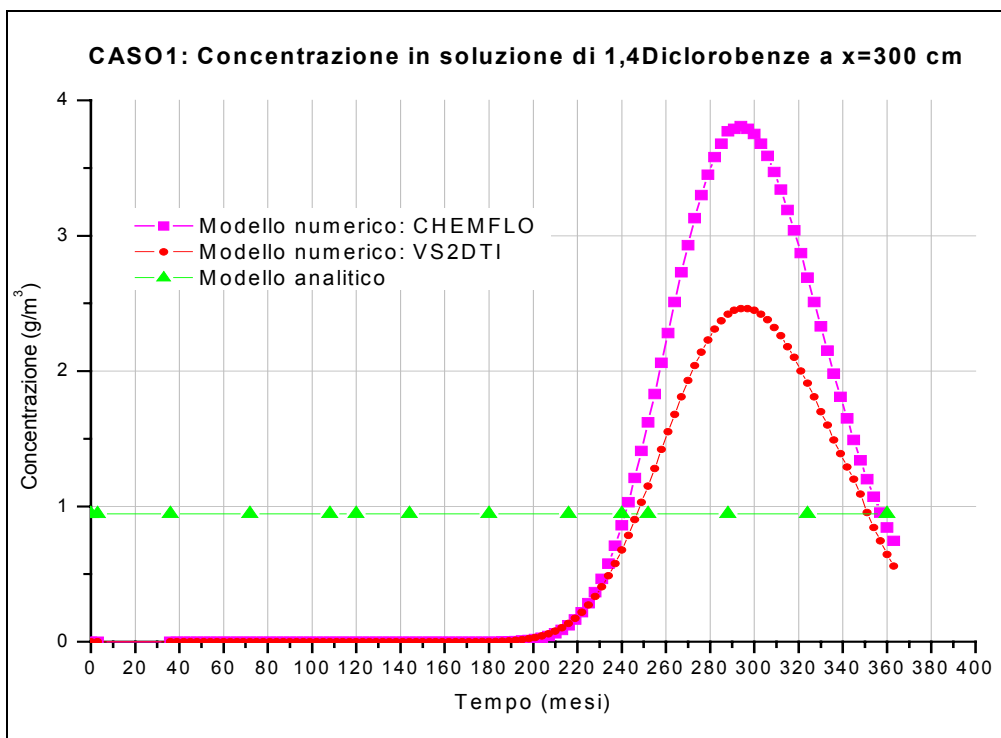


Figura R.3.16: Andamento della concentrazione di 1,4Diclorobenzene a x=300 cm

Il grafico di Figura R.3.17 mette a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Da tale studio risulta che non considerando l'effetto d'attenuazione si ottiene una sovrastima delle concentrazioni alla fine della zona insatura.

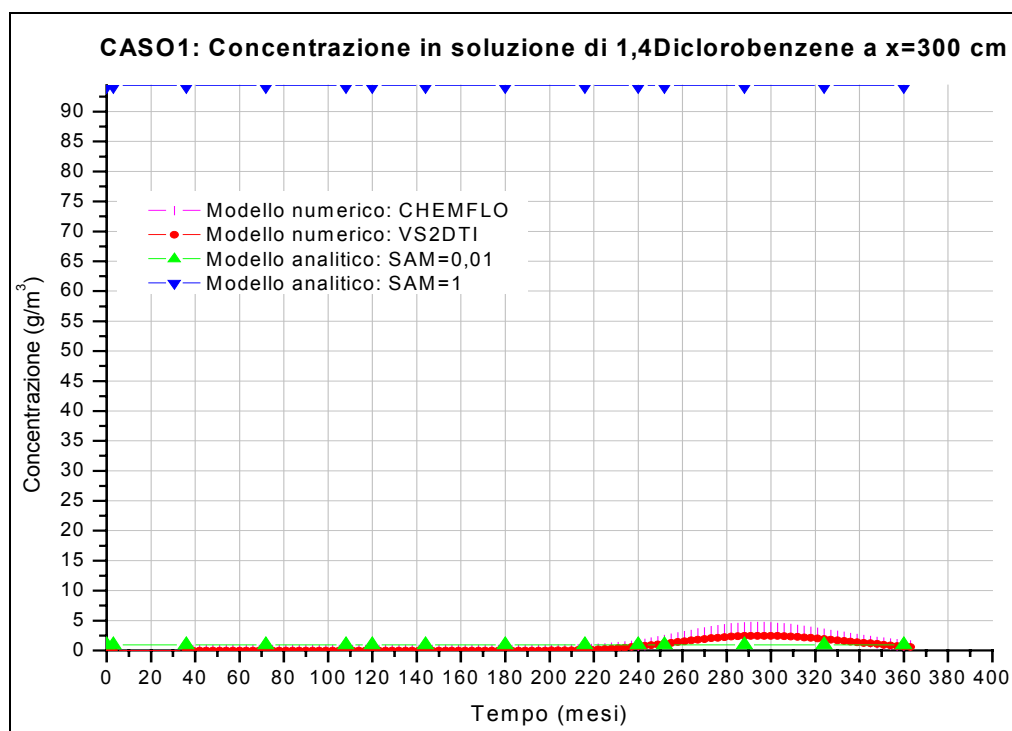


Figura R.3.17: Confronto modello analitico e numerico

R.3.3.2 Caso 2: Suolo contaminato da 1,4Diclorobenzene per uno spessore di 1 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 1 m di profondità, nella Tabella R.2-1 sono riportati i parametri del CASO 2 che variano rispetto a quelli esposti nella Tabella R.3-11 relativi al CASO1:

Tabella R.3-12 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,33	-	-
L _F	3 m	300 cm	3 m
d _s	1 m	1 m	1 m

CASO 2 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa il primo m di zona insatura. Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 31,152 \text{ g / m}^3$$

CASO 2 (numerico)

Nel grafico di Figura R.2.1 si mostra il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,4Diclorobenzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Come si può notare dalla figura l'inquinante in esame raggiunge la zona satura solo dopo un tempo superiore a 10 anni; il picco massimo di concentrazione rimane costante fino a quando l'inquinante non percola in falda (verificato da entrambi i software). Si noti come per le stesse profondità i due programmi presentino le stesse concentrazioni a parità di contaminazione iniziale, le curve sono coincidenti.

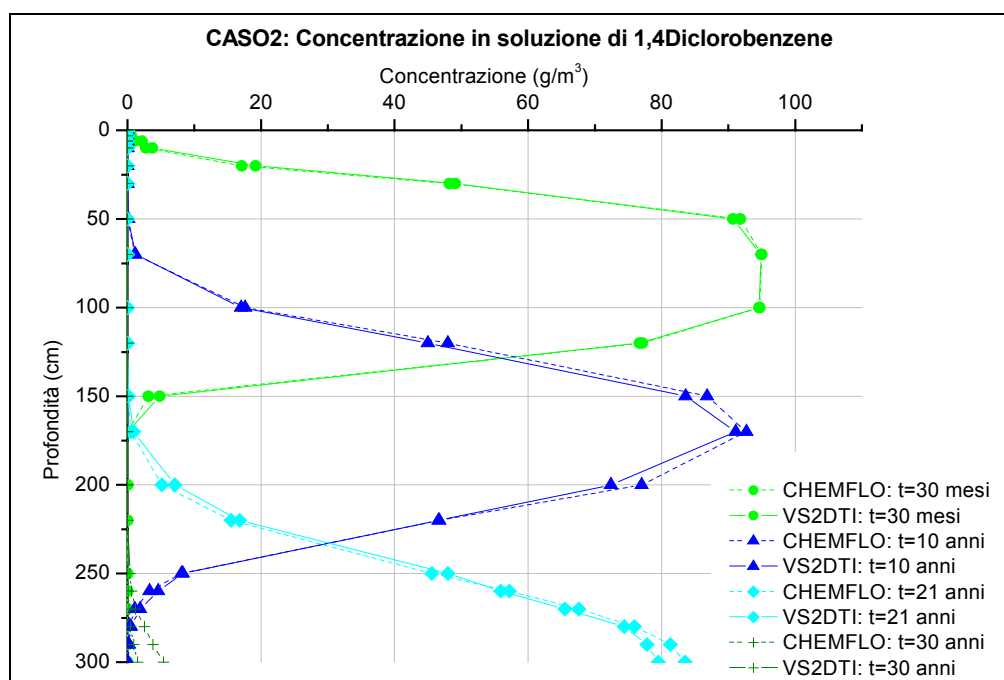


Figura R.3.18: Concentrazione in soluzione di 1,4Diclorobenzene al variare della profondità

Per il grafico in Figura R.3.19 valgono le stesse considerazioni fatte per la Figura R.3.17. Essendo lo strato contaminato più profondo, alla base della zona vadosa si osservano concentrazioni maggiori rispetto al CASO1 (numerico). Si noti che i tempi sono molto più grandi rispetto a quelli utilizzati per le simulazioni effettuate con il Benzene e il 1,1,2,2Tetracloroetano, per il motivo spiegato sopra. Un'altra differenza, messa in evidenza dalla figura, è dovuta al fatto che nonostante si consideri un tempo lungo per la simulazione (30 anni), in soluzione rimane ancora una certa quantità d'inquinante.

Le curve d'involuppo che rappresentano gli output dei due programmi sono quasi coincidenti, il VS2DTI è leggermente più veloce dell'altro nella prima parte dello studio.

Il grafico di Figura R.3.19 mette inoltre a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. Si osserva, che rispetto al CASO 1 la differenza tra il valore della concentrazione di 1,1,2,2Tetracloroetano valutato con il modello analitico con SAM=1 e quella massima stimata dal numerico è diminuita.

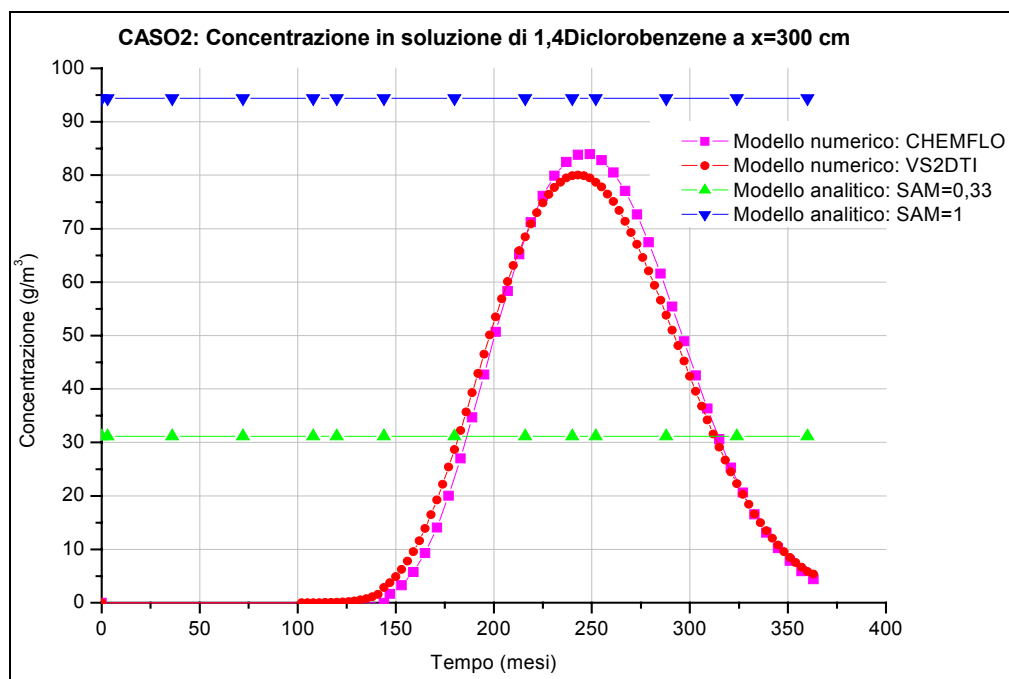


Figura R.3.19: Confronto modello analitico e numerico

R.3.3.3 Caso 3: Suolo contaminato da 1,4Diclorobenzene per uno spessore di 2 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 2 m di profondità, nella Tabella R.3-13 sono riportati i parametri del CASO 3 che variano rispetto a quelli esposti nella Tabella R.3-10 relativi al CASO 1.

Tabella R.3-13 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,67	-	-
L_F	3 m	300 cm	3 m
d_s	2 m	2 m	2 m

CASO 3 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 2 m di zona insatura. Applicando il modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 63,248 \text{ g / m}^3$$

CASO 3 (numerico)

Il grafico di Figura R.2.1 mostra il confronto dei risultati forniti dal Chemflo e dal VS2DTI per la concentrazione di 1,4Diclorobenzene in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Come si può notare dalla figura l'inquinante in esame raggiunge la zona satura ad un tempo superiore a 36 mesi, molto minore rispetto a quello registrato per il CASO1 e CASO 2 (numerico), ciò è dovuto al maggiore spessore della contaminazione. Il picco massimo di concentrazione rimane costante fino a quando l'inquinante non percola in falda (verificato da entrambi i software). Si noti come per le stesse profondità i due programmi presentino le stesse concentrazioni a parità di contaminazione iniziale, le curve rappresentative sono coincidenti.

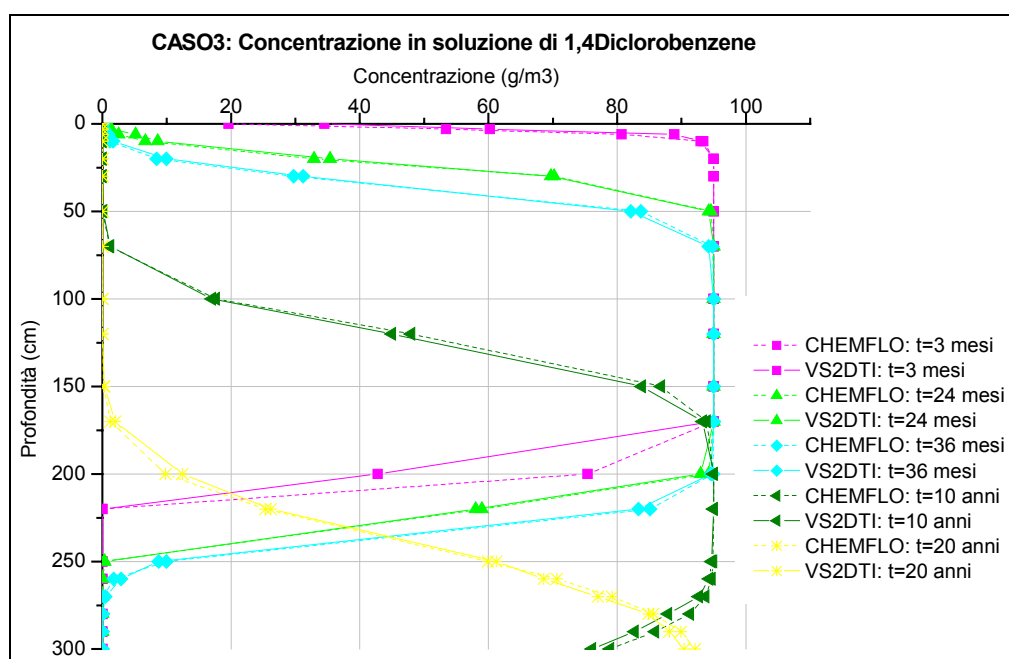


Figura R.3.20: Concentrazione in soluzione di 1,4Diclorobenzene al variare della profondità

Per il grafico in Figura R.3.21 valgono le stesse considerazioni fatte per la Figura R.3.17 e Figura R.3.19; la massima concentrazione di 1,4Diclorobenzene, alla profondità $x=300$ cm, si ottiene per un tempo compreso tra i 160 e i 220 mesi.

Il grafico di Figura R.3.21 mette inoltre a confronto i risultati ottenuti con il modello numerico (Chemflo e VS2DTI), analitico con SAM e analitico senza SAM. La concentrazione massima in soluzione del 1,4Diclorobenzene stimata dai due software, si noti come le due curve siano perfettamente coincidenti, è uguale a quella calcolata con il modello analitico con $SAM=1$.

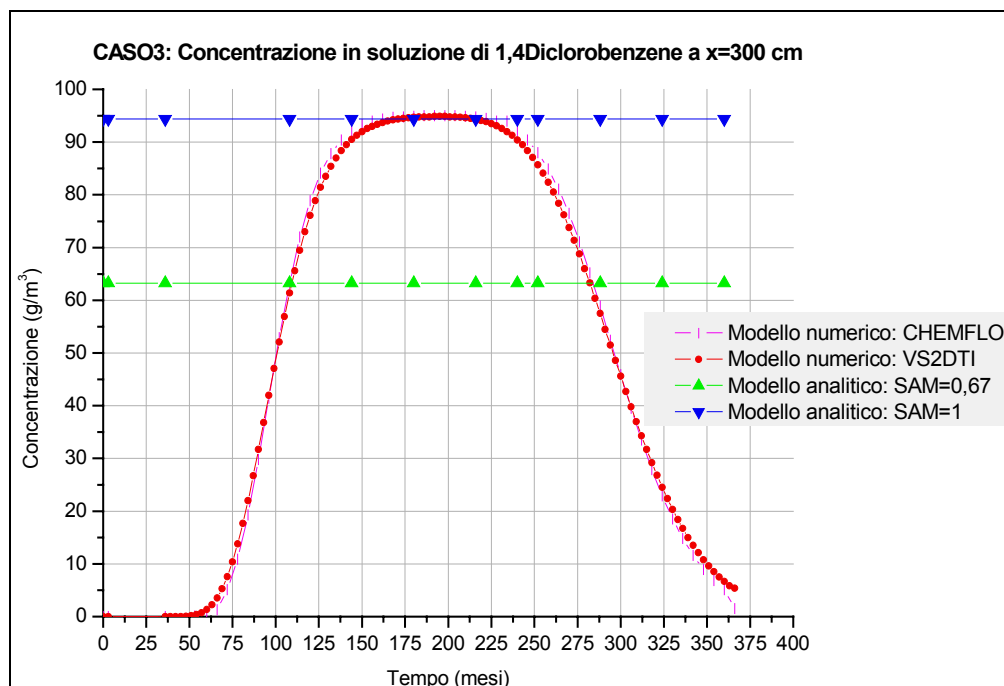


Figura R.3.21: Confronto modello analitico e numerico

R.3.4 Suolo contaminato d'Arsenico

Si ripetono le simulazioni CASO 1 e CASO 2 e CASO 3 però il suolo si considera contaminato d'Arsenico. Anche in questo caso come per 1,12,2Tetracloroetano, non è possibile usare per la simulazione una concentrazione 100 volte superiore ai limiti di riferimento della normativa vigente sui siti contaminati, che per suoli ad uso industriale e commerciale è di 50 mg/kg e quindi si dovrebbe considerare una concentrazione alla sorgente pari a 8500 g/m³, perchè il Chemflo accetta concentrazioni iniziali fino a 1000 g/m³.

$$C_s = C_s(mg/Kg) \cdot \rho_s(Kg/m^3) = 5000 \cdot 1,7 \cdot 10^3 = 8500 g/m^3$$

Per tale ragione consideriamo alla sorgente una concentrazione pari a 1000 g/m³ (590 mg/kg).

R.3.4.1 Caso 1: Suolo contaminato d'Arsenico per uno spessore di 3 cm

Nella seguente Tabella R. 3-14 sono riportate tutte le grandezze utilizzate per effettuare il confronto tra i modelli.

Tabella R.3-14 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
Θ_w	0,12 adim	0,12 adim	0,12 adim
$\Theta_{w,sat}$	-	0,35 adim	-
Θ_r	-	0,057 adim	0,057 adim
Θ_a	-	0,26 adim	-
Θ_T	-	-	0,38
ρ_s	1,7 g/cm ³	1,7 Mg/m ³ (*)	1,7E06 g/m ³ (**)
K_{sat}	-	2 cm/h (*)	0,02 m/h (**)
P	-	0,0147 cm/h (*)	1,47E-04 m/h (**)
f_{oc}	0,01	0,01	-
D_w	-	-	0
A	-	2 cm	0,02 m
H	-	-	-
K_s	29 ml/g	29 m ³ /Mg (*)	2,9E-5 m ³ /g (**)
K_{ws}	0,034 Kg/l	-	-
C_s	590 mg/Kg	1000 g/m ³	1000 g/m ³
Concentrazione di contaminante nell'acqua di infiltrazione	-	0	0
Costante di degradazione nel liquido	-	0	0
Costante di degradazione nel solido	-	0	0
Costante di produzione	-	0	-
SAM	0,01	-	-
L_F	3 m	300 cm (**)	3 m (**)
d_s	3 cm	3 cm	3 cm
α_p	-	0	0
Suolo finito	-	X (***)	-
Suolo omogeneo	-	X (***)	-
Tempo totale della simulazione	-	30 anni	30 anni
Intervallo di tempo per ogni output	-	3 mesi	3 mesi
Intervallo spaziale (<i>Mesh Distance</i>)	-	1 cm	1E-07 m
Intervallo temporale (<i>Mesh Time</i>)	-	0,5 h	0,001h

(*) Unità di misura richieste dal Chemflo.

(*) Unità di misura utilizzate nel VS2DTI.

(***) Sono delle opzioni richieste dal Chemflo in input per schematizzare il suolo.

CASO 1 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura. Applicando il modello analitico:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 0,201 \text{ g / m}^3$$

Nel caso in cui si trascuri l'effetto dell'attenuazione dovuto al SAM che tiene conto del percorso che l'inquinante fa per raggiungere il piano di falda (SAM=1), applicando modello analitico si ha:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 20,06 \text{ g / m}^3$$

CASO 1 (numerico)

Il grafico di Figura R.3.22 mostra il confronto dei risultati ottenuti, con il programma Chemflo e VS2DTI, per la concentrazione d'Arsenico in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati pari a t=10, 20, 30 anni.

E' possibile osservare come l'Arsenico in soluzione si muova con estrema lentezza, tanto che dopo un tempo di 30 anni, pari alla durata totale della nostra simulazione, non riesce ad arrivare al piano di falda. Il moto di percolazione lento dell'Arsenico, rispetto agli inquinanti esaminati in precedenza, in particolare Benzene e 1,1,2,2Tetracloroetano, i quali riescono ad arrivare in falda e in tempi minori dell'ordine di qualche anno, sarà esaminato in seguito.

Si noti inoltre come per le stesse profondità il Chemflo presenta concentrazioni maggiori rispetto al VS2DTI a parità di contaminazione iniziale, sulla natura di questo risultato si parlerà diffusamente nelle conclusioni della presente appendice. Bisogna altresì notare come le curve che rappresentano i risultati dei due programmi abbiano lo stesso andamento.

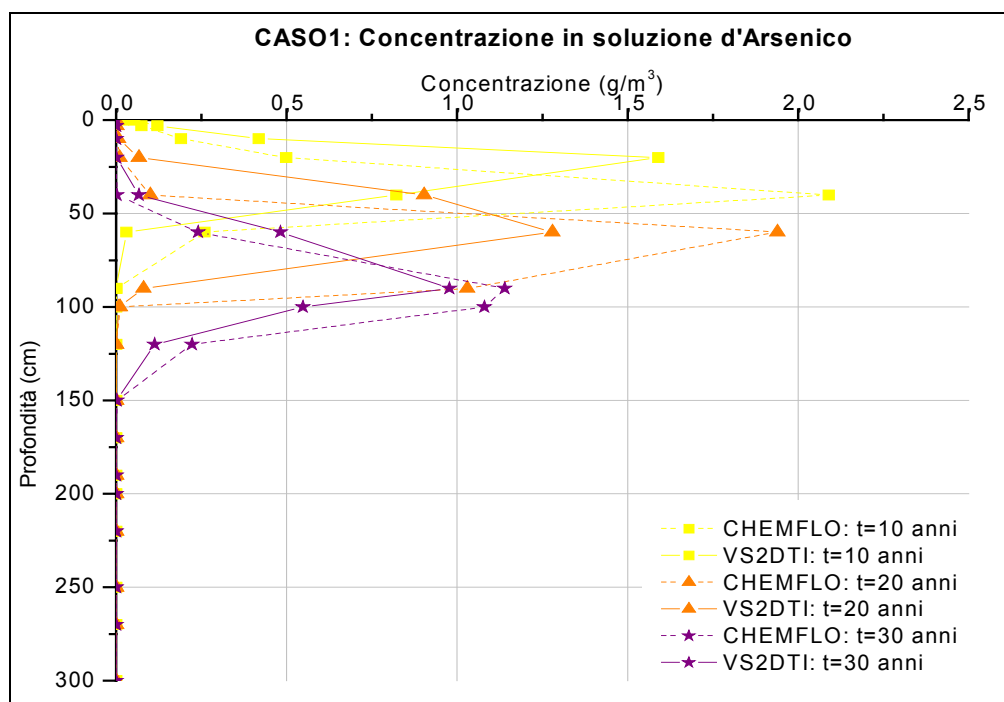


Figura R.3.22: Concentrazione in soluzione d'Arsenico al variare della profondità

In questo caso non vengono mostrati i grafici di confronto tra modello analitico con SAM=1, con SAM=0,01 e modello numerico (Chemflo e VS2DTI) alla profondità $x=300$ cm. In Tabella R.3-15 si evidenziano i valori di concentrazione in soluzione d'Arsenico a tale profondità valutati con il modello analitico e quelli numerici stimati dai software. Analizzando i dati riportati risulta evidente che a livello ingegneristico, quelli calcolati con il modello numerico, non hanno nessun significato, per tale ragione non ha senso costruire delle curve di confronto.

Tabella R.3-15: Caso1:Concentrazione in soluzione d'Arsenico a $x=300$ cm

	Concentrazione in soluzione	Unità di misura
Modello analitico SAM=1	20.06	g/m^3
Modello Analitico SAM=0.01	0.201	g/m^3
Modello numerico: CHEMFLO	$4,95\text{E-}29(*)$	g/m^3
Modello numerico: VS2DTI	$1,57\text{E-}24(*)$	g/m^3

(*) Si considera il valore massimo di concentrazione in soluzione d'Arsenico raggiunto alla profondità $x=300$ cm essendo gli output del software funzione del tempo.

R.3.4.2 Caso 2: Suolo contaminato d'Arsenico per uno spessore di 1 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 1 m di profondità, nella Tabella R.3-16 sono riportati i parametri del CASO 2 che variano rispetto a quelli esposti nella Tabella R.3-14 relativi al CASO1:

Tabella R.3-16 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
SAM	0,33	-	-
L _F	3 m	300 cm (**)	3 m
d _s	1 m	1 m	1 m

CASO 2 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura. Applicando il modello analitico:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 6,6198 \text{ g / m}^3$$

CASO 2 (numerico)

Il grafico di Figura R.3.23 mostra il confronto dei risultati ottenuti con il Chemflo e il VS2DTI per la concentrazione d'Arsenico in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Per effettuare il raffronto abbiamo messo in evidenza la concentrazione d'Arsenico in soluzione per tempi pari a 10, 20 e 30 anni, da cui risulta che il contaminante si muove più velocemente secondo il Chemflo rispetto al VS2DTI, nonostante ciò le curve assumono lo stesso andamento.

Anche in questo caso, l'Arsenico in soluzione si muove lentamente, tanto che dopo un tempo di 30 anni, pari alla durata totale della nostra simulazione, non riesce ad arrivare al piano di falda. Il picco massimo della concentrazione si raggiunge dopo 3 mesi (verificato da entrambe i software) e rimane costante al variare del tempo e della profondità.

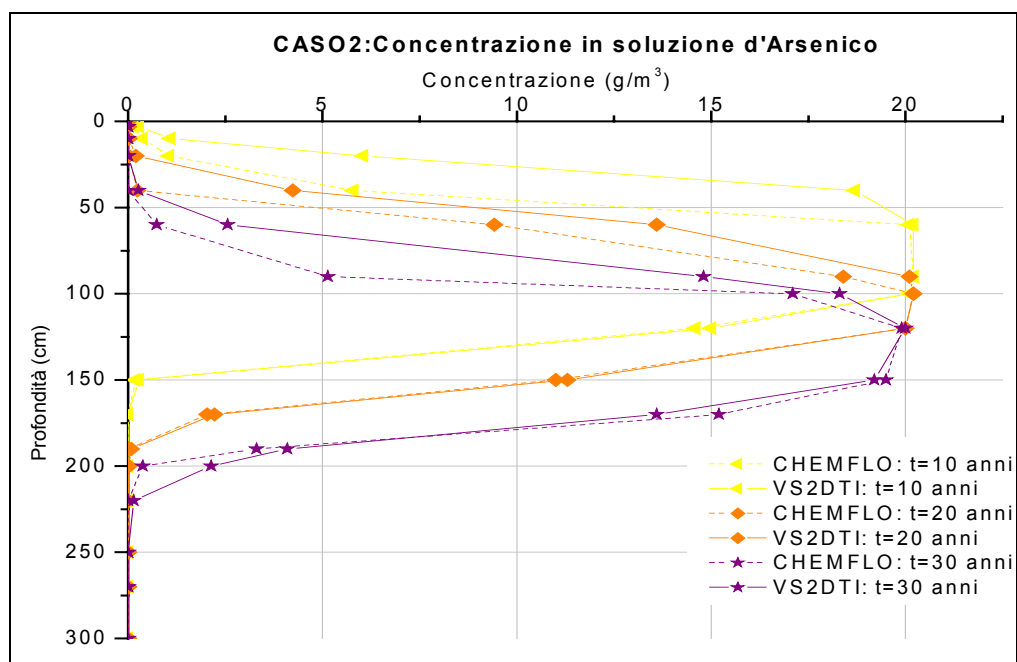


Figura R.3.23: Concentrazione in soluzione d'Arsenico al variare della profondità

Anche nel CASO2 non vengono mostrati i grafici di confronto tra modello analitico con $SAM=1$, con $SAM=0,33$ e modello numerico (Chemflo e VS2DTI) alla profondità $x=300$ cm perché come mostrato dalla Figura R.3.23 la concentrazione a tale profondità fornita dal Chemflo e dal VS2DTI è quasi trascurabile rispetto a quella fornita dal modello analitico, per cui tali grafici non risultano significativi. In Tabella R.3-17 si evidenziano le concentrazioni considerate.

Tabella R.3-17 - Caso2:Concentrazione in soluzione d'Arsenico a $x=300$ cm

Modello	Concentrazione in soluzione	Unità di misura
Modello analitico $SAM=1$	20,06	g/m^3
Modello analitico $SAM=0,33$	6,62	g/m^3
Modello numerico: CHEMFLO	2,312E-09 (*)	g/m^3
Modello numerico: VS2DTI	8,84E-09 (*)	g/m^3

(*) Si considera il valore massimo di concentrazione in soluzione d'Arsenico raggiunto alla profondità $x=300$ cm essendo gli output del software funzione del tempo.

R.3.4.3 Caso 3: Suolo contaminato d'Arsenico per uno spessore di 2 m

La simulazione viene ripetuta facendo variare lo spessore della contaminazione da 3 cm a 2 m di profondità, nella Tabella R.3-18 sono riportati i parametri del CASO 3 che variano rispetto a quelli esposti nella tab. 29 relativi al CASO1:

Tabella R.3-18 - Parametri utilizzati per effettuare la simulazione

PARAMETRI	MODELLI ANALITICI	CHEMFLO	VS2DTI
-----------	-------------------	---------	--------

SAM	0,67	-	-
L_F	3 m	300 cm	3 m
d_s	2 m	2 m	2 m

CASO 3 (analitico)

La concentrazione di contaminante è omogenea e interessa i primi 3 cm di zona insatura.

Applicando il modello analitico:

$$C'_{L1} = C_s \cdot k_{sw} \cdot SAM = 13,44 \text{ g / m}^3$$

CASO 3 (numerico)

Il grafico di Figura R.3.24 mostra il confronto dei risultati forniti dal software Chemflo e VS2DTI per la concentrazione d'Arsenico in soluzione, al variare della profondità e per intervalli di tempo fissati. Per effettuare il raffronto abbiamo messo in evidenza la concentrazione d'Arsenico in soluzione per tempi pari a 10, 20 e 30 anni, il picco massimo della concentrazione in soluzione, all'aumentare del tempo, rimane costante per tutta la simulazione di durata $t=30$ anni, ma si osserva a profondità maggiori. Nel CASO 3 il contaminante, avendo uno spessore di contaminazione più grande (pari a 2 m), e in proporzione una profondità della zona insatura incontaminata da attraversare minore, riesce a percolare in tutta l'area di studio, passando in falda, mentre nel CASO 1 e CASO 2 l'inquinante non riusciva a percolare in tutta la zona vadosa. Le curve d'involuppo che modellizzano gli output del software Chemflo e VS2DTI sono coincidenti.

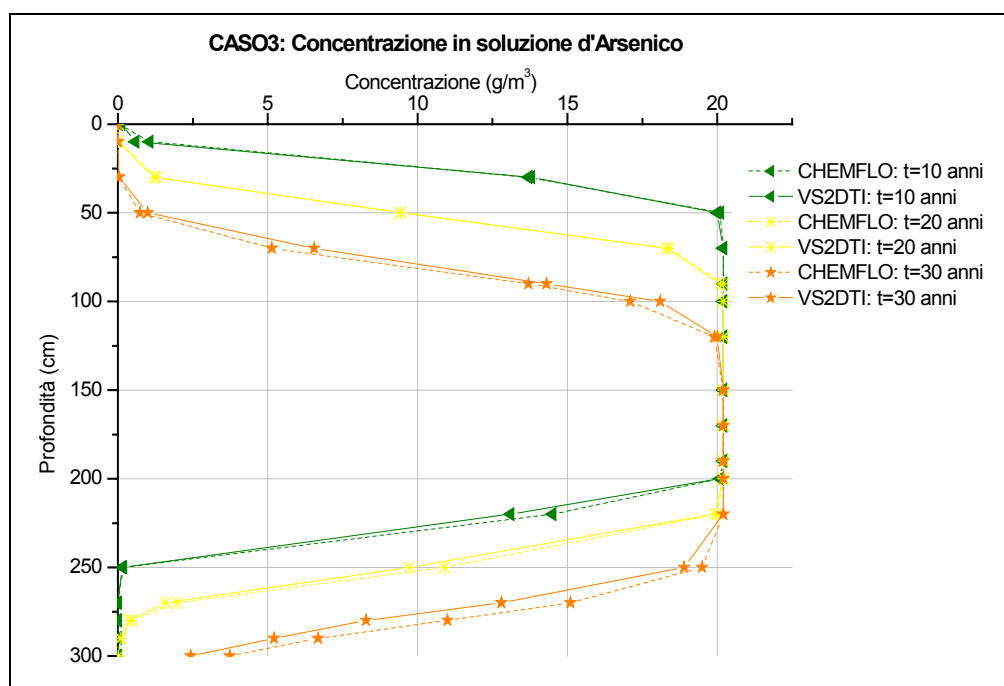


Figura R.3.24: Concentrazione in soluzione d'Arsenico al variare della profondità

Anche nel CASO3 non vengono mostrati i grafici di confronto tra modello analitico con SAM=1, con SAM=0,67 e modello numerico (Chemflo e VS2DTI) alla profondità $x=300$ cm perché come mostrato dalla Figura R.3.24 la concentrazione a tale profondità fornita dal Chemflo e dal VS2DTI è quasi trascurabile rispetto a quella fornita dal modello analitico, per cui tali grafici non risultano significativi. In Tabella R.3-19 si evidenziano le concentrazioni considerate.

Tabella R.3-19 - Caso3: Concentrazione in soluzione d'Arsenico a $x=300$ cm

Modello	Concentrazione in soluzione	Unità di misura
Modello analitico SAM=1	20,06	g/m ³
Modello analitico SAM=0,67	13,44	g/m ³
Modello numerico: CHEMFLO	3,74 (*)	g/m ³
Modello numerico: VS2DTI	2,43(*)	g/m ³

(*) Si considera il valore massimo di concentrazione in soluzione d'Arsenico raggiunto alla profondità $x=300$ cm essendo gli output del software funzione del tempo.

Il comportamento dell'Arsenico, diverso dagli altri contaminanti esaminati, può essere dovuto alle sue proprietà chimico- fisiche (Tabella R.3-1). Confrontandolo con le altre sostanze si osserva che è caratterizzato da un coefficiente di partizione k_s molto elevato, un coefficiente di diffusione in acqua D_w nullo e una costante di Henry H elevata. Il coefficiente di partizione elevato influisce sulla sua scarsa tendenza a passare in soluzione, favorendo l'adesione alla matrice solida e il ritardo

rispetto al moto dell'acqua; quindi il contaminante percola più lentamente attraverso il suolo. Il coefficiente di diffusione in acqua nullo limita il flusso di materia dovuto al gradiente di concentrazione, diminuendo la tendenza allo spanciamento dell'inquinante a differenti tempi e profondità. La costante di Henry elevata caratterizza la tendenza dell'Arsenico a passare facilmente in fase vapore, però ciò è valutato dal modello analitico ma non dal numerico, perché, come già detto, il Chemflo non considera la ripartizione in fase vapore e per poter assumere le stesse condizioni, in modo d'avere risultati paragonabili, neanche per il VS2DTI è stata considerata la fase vapore.

Si ricorda che per poter confrontare i risultati forniti dal modello analitico e numerico sono state effettuate delle prove in cui si è stato assunto sempre lo stesso tipo di suolo a cui è stato applicato ogni volta un contaminante diverso, quindi contraddistinto da proprie caratteristiche chimico-fisiche.

Per quanto riguarda i software, si è riscontrato che sia per il Chemflo che per il VS2DTI il parametro di maggior peso è il coefficiente di partizione k_s . In quanto esaminando i risultati ottenuti precedentemente, si osserva che il Benzene e 1,1,2,2Tetracloroetano che hanno un k_s simile hanno un andamento della concentrazione in soluzione nel suolo analogo. Il 1,4Diclorobenzene che ha un k_s intermedio tra i primi due contaminanti e l'Arsenico, ha un comportamento transitorio; perché nei tempi considerati riesce a percolare in tutta la zona insatura lisciviando in falda, come il Benzene e il 1,1,2,2Tetracloroetano, ma come l'Arsenico tende ad adsorbirsi maggiormente alla matrice solida. L'Arsenico a causa dell'elevato coefficiente di partizione k_s , non raggiunge la falda nei tempi considerati e inoltre si notano concentrazioni in soluzioni minori rispetto al 1,1,2,2Tetracloroetano, con il quale è stata assunta la stessa concentrazione iniziale al tempo $t=0$.

Per il modello analitico queste differenze sono meno evidenti perché il coefficiente di partizione k_s ha un peso minore nella determinazione della concentrazione in soluzione, in quanto si considera anche la fase vapore e quindi entra in gioco la costante di Henry.

R.3.5 Variazione della granulometria del terreno

In questo paragrafo viene mostrata la variazione del profilo delle concentrazioni nel tempo che giungono in falda, considerando diverse granulometrie del terreno per la zona insatura. Le simulazioni sono state effettuate con il programma VS2DTI e considerando una contaminazione da

benzene. di spessore pari ad 1 metro Tutte le caratteristiche del terreno sono quelle della classificazione USDA come riportato nel documento principale (par. 3.2.2 e par. 3.2.3)

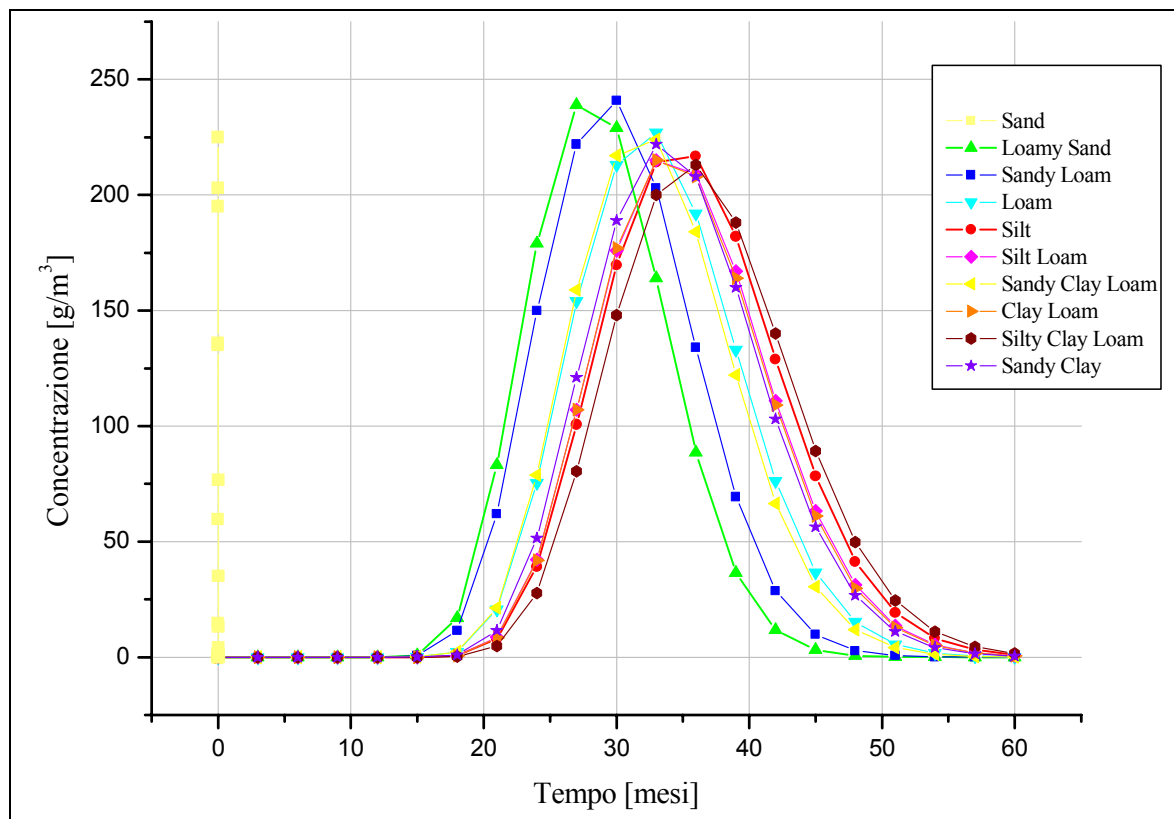


Figura R.3.25 : Curve di sfondamento per il benzene al variare della granulometria

In Figura R.3.25 vengono mostrati gli andamenti, in funzione del tempo, della concentrazione di benzene in soluzione, alla profondità $x = 300$ cm, al variare della granulometria del terreno. Si nota come man mano che si incrementa il tenore di frazione fine nel terreno, aumenta il tempo che impiega l'inquinante a giungere in falda. Si passa infatti dai 14 mesi del Loamy Sand ai 18 mesi del Sandy Clay. Inoltre all'aumentare della componente argillosa si ha uno spanciamento della campana.

Come si può notare la sabbia appare come una linea verticale, questo perché la lisciviazione da terreni composti unicamente da sabbie avviene in maniera repentina (circa 20 ore) come indicato in Figura R.3.26.

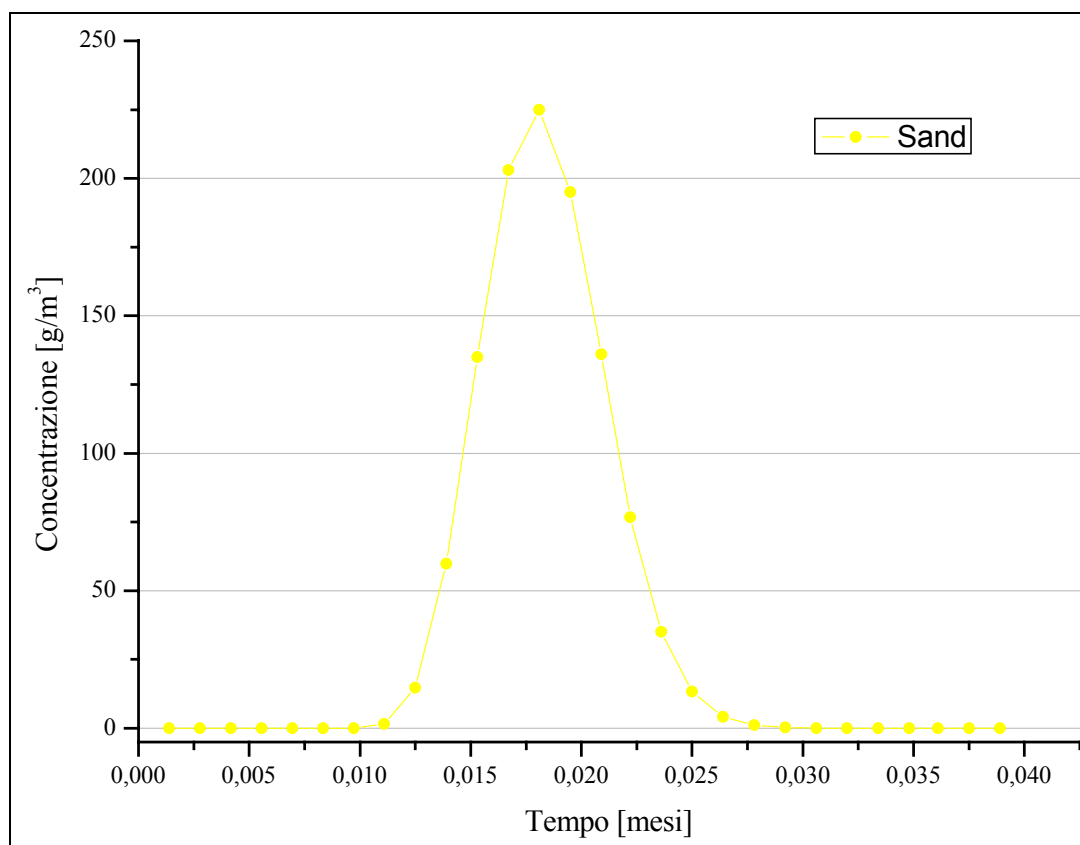


Figura R.3.26 : Curva di sfondamento del benzene per la sabbia.

R.3.6 Variazione della frazione organica nel terreno

Una delle ipotesi del modello di lisciviazione e del modello SAM è che il suolo insaturo abbia un tenore di carbonio organico costante a partire dal top della sorgente di contaminazione fino al livello di falda. Poiché in realtà il tenore di carbonio organico è significativo nei primi strati di suolo e decresce con la profondità si è voluta effettuare una simulazione considerando la variabilità del carbonio organico. Si ricorda che tale parametro influenza il processo di adsorbimento delle sostanze organiche sulle particelle di suolo e che quindi una drastica riduzione del carbonio organico con la profondità potrebbe influenzare significativamente il processo di lisciviazione. Infatti si ricorda che il coefficiente di partizione k_d dipende dal contenuto di carbonio organico attraverso la seguente relazione:

$$k_d = f_{oc} \cdot k_{oc}$$

In questa appendice è stato simulato, ai fini della valutazione dell'attenuazione naturale, il comportamento di un suolo a granulometria omogenea, ma con un contenuto di carbonio organico che diminuisce linearmente con la profondità a partire da un valore di 0,01 (default per la zona insatura) fino ad arrivare ad un valore di 0,001 (default per la zona satura).

In Figura R.3.27 viene riportato l'andamento, in funzione del tempo, della concentrazione in soluzione di benzene a $x = 300$ cm nel caso di k_d variabile con la profondità. La simulazione è stata condotta considerando un metro di suolo contaminato da benzene ($C = 340$ mg/l) e un terreno di tipo Loamy Sand.

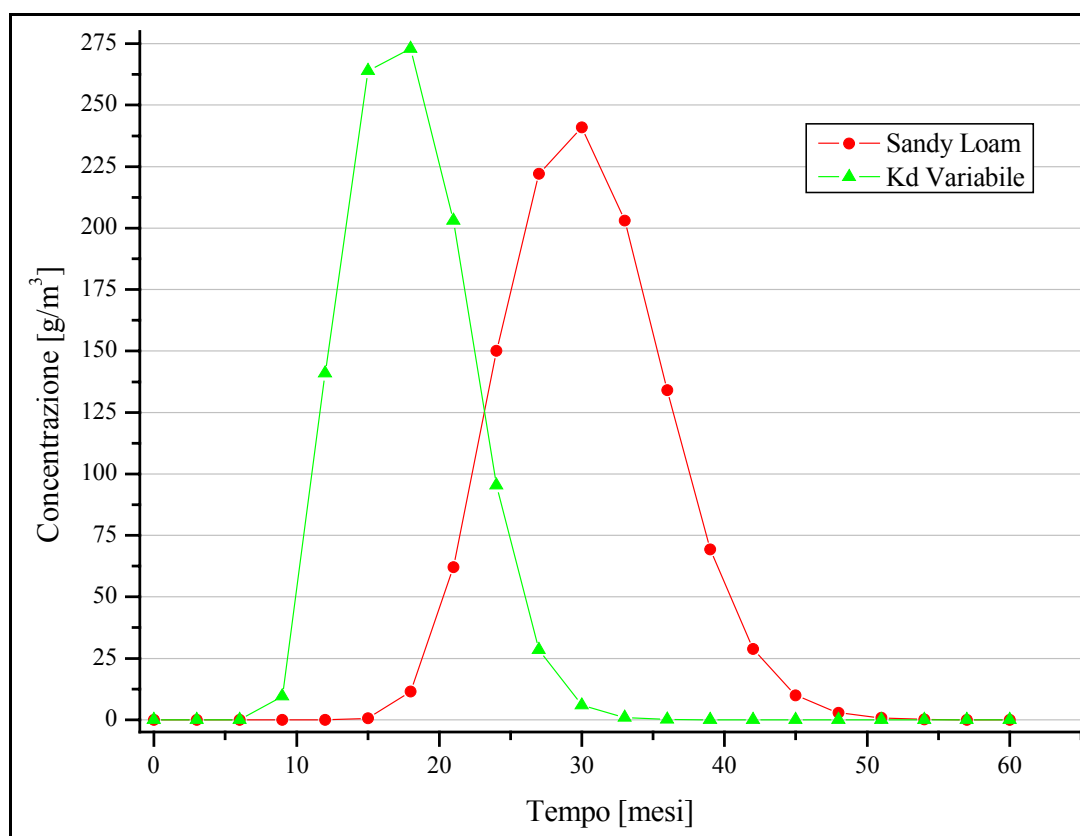


Figura R.3.27 : Curva di sfondamento del benzene al variare del k_d nel terreno.

Come si può notare dalla figura sopra riportata, il contaminante, nel caso di riduzione del carbonio organico con la profondità, impiega un tempo inferiore per giungere in falda (6 mesi) rispetto al caso di k_d costante con la profondità (15 mesi). Questo potrebbe essere dovuto al fatto che a causa della diminuzione del coefficiente di ripartizione suolo/acqua all'aumentare della profondità diminuisce la capacità di una sostanza chimica di legarsi al terreno e quindi la lisciviazione avviene in maniera più veloce.

Confronto tra approccio analitico e numerico

In questo capitolo sono riportati i risultati ottenuti a seguito del confronto tra modello analitico e numerico in termini di Rischio Sanitario associato all'ingestione d'acqua di falda contaminata.

Utilizzando solo i valori di concentrazione determinati dai due approcci non si ottengono delle soluzioni confrontabili, in quanto il modello numerico fornisce dei valori di concentrazione dipendenti dal tempo mentre l'analitico è indipendente dalla variabile temporale.

È necessario ricordare che le concentrazioni stimate nel capitolo precedente, sia nel caso di modelli analitici che numerici, sono relative all'eluato nella zona insatura, invece in questa fase è necessario stimare quelle nell'acquifero. Quindi, è necessario conoscere anche le caratteristiche della zona satura; nella Tabella R.3-20 sono riportati i parametri della zona satura considerando i valori di default contenuti nel presente documento.

Tabella R.3-20 - Parametri fisici della zona satura

CARATTERISTICHE DEL TERRENO ZONA SATURA	
W	4500 cm
V_{gw}	2500 cm/anno
δ_{gw}	200 cm

I contaminanti considerati sono il Benzene, il 1,1,2,2Tetracloroetano, il 1,4Diclorobenzene e l'Arsenico. Tali sostanze sono cancerogene quindi il Rischio è stato calcolato nel modo seguente:

$$R = C_{poe} \cdot EM \cdot SF \quad (R.6)$$

Nella Tabella R.3-21 sono riportati i parametri utili per la stima della portata effettiva di esposizione.

Tabella R.3-21 - Fattori di esposizione: Valori di default

INDICI PER IL CALCOLO DI EM (Com/Ind)			
Simbolo	Modello analitico	Modello numerico	Unità di misura
IR	1	1	l/giorno
EF	250	250	giorni/anno
ED	30	30	anni
BW	70	70	Kg
AT	70	70	anni

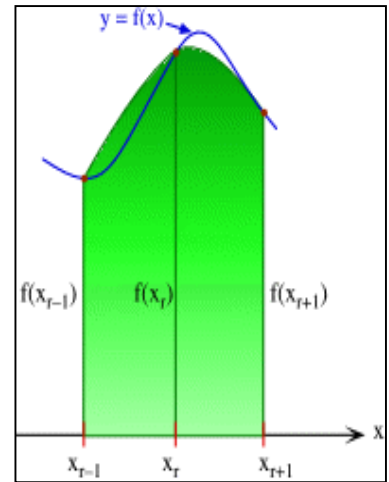
C_{poe} è la concentrazione calcolata in corrispondenza del punto d'esposizione, che in questo caso è la concentrazione in falda. Per valutare tale concentrazione è stata applicata l'equazione (R.7) contenuta nel presente documento, la quale tiene conto della diluizione che il contaminante subisce, una volta raggiunto il piano di falda, nel passaggio tra terreno insaturo e terreno saturo:

$$C_{poe} = \frac{C'_{L1}}{LFD} \quad (R.7)$$

In cui LDF è il fattore di diluizione:

$$LDF = 1 + \frac{V_{gw} \cdot \delta_{gw}}{I_{ef} \cdot W} \quad (R.8)$$

Inoltre per il caso numerico, non avendo a disposizione un unico valore di concentrazione alla base dell'insaturo, bensì un andamento della stessa variabile nel tempo, al fine di stimare la concentrazione ad ogni determinato intervallo di tempo è stato utilizzato il **metodo di integrazione numerica di Cavalieri-Simpson** [Pagani, Salsa, 1999]. Esso consiste nell'approssimare la funzione integranda in ogni intervallino della suddivisione con archi di parabole. Precisamente, data la suddivisione $D(x_0, x_1, \dots, x_n)$ indichiamo con x_r ($r=1, 2, \dots, n$) il punto medio dell'intervallino $[x_{r-1}, x_{r+1}]$. Considerando la parabola, con asse parallelo all'asse y , e passante per i punti: $[x_{r-1}; f(x_{r-1})]$, $[x_r; f(x_r)]$, $[x_{r+1}; f(x_{r+1})]$, la sua equazione potrà scriversi nella forma:



$$f(x) = \alpha(x - x_r)^2 + \beta(x - x_r) + \gamma \quad \text{con} \quad x_{r-1} \leq x \leq x_{r+1}$$

da cui si ricava l'espressione di Cavalieri-Simpson:

$$\int_{x_{r-1}}^{x_{r+1}} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_{r+1}) + f(x_{r-1}) + 4f(x_r)] \quad (R.9)$$

$$2h = \frac{b+a}{n} \quad (R.10)$$

$2h$ = ampiezza intervallino;

b, a = estremi dell'intervallo;

n = numero d'intervalli.

Applicando tale procedura si ottiene la stima del Rischio per ogni singolo intervallo di tempo. Il Rischio totale, associato all'intero arco temporale, è stato individuato mediante la somma dei rischi relativi ad ogni singolo intervallo di tempo:

$$R_{Tj} = \sum_{i=1}^n R_{ij} \quad (R.11)$$

$$R_{ij} = (C_{poe})_i \cdot ED \cdot \frac{IR \cdot EF}{AT \cdot BW} \cdot SF \quad (R.12)$$

Per il calcolo del rischio è stato inoltre utilizzato il software BP-RISC ver. 4.0 della British Petroleum. Tale programma comprende al suo interno un modello per il calcolo della lisciviazione da suolo insaturo (Vadose Zone model) che verrà brevemente illustrato per maggior chiarezza.

Il modello simula il trasporto di contaminante attraverso la zona insatura e utilizzando le equazioni di van Genuchten.

Nel modello vengono considerate i seguenti processi di fate and transport:

- ✓ Sorgente finita ben miscelata;
- ✓ Volatilizzazione e trasporto diffusivo di vapori dalla sorgente alla superficie;
- ✓ Lisciviazione;
- ✓ Trasporto advettivo della fase disciolta;
- ✓ Dispersione della fase disciolta;
- ✓ Adsorbimento;
- ✓ Decadimento del primo ordine.

In tale modello per poter risolvere le equazioni di van Genuchten la costante di decadimento del primo ordine deve essere obbligatoriamente inserita in input, altrimenti il modello da risultati non realistici.

Di seguito vengono riportate le assunzioni alla base del modello e le limitazioni della sua applicazione:

1. Il Vadose Zone model simula il trasporto della fase disciolta in verticale verso la falda e della fase vapore verso la superficie. Non viene simulato il movimento dei NAPLs;
2. il modello è monodimensionale e descrive le perdite per volatilizzazione e lisciviazione dalla sorgente;
3. la zona vadosa è considerata omogenea al di sotto della sorgente (può essere considerata una lente unicamente al di sopra della sorgente). La conducibilità idraulica è calcolata come funzione del contenuto di umidità che si assume costante per tutto lo strato di suolo insaturo;
4. la sorgente di contaminazione ha una concentrazione uniforme nel volume definito dall'utente;
5. non vengono considerate fluttuazioni della tavola d'acqua. La profondità dell'acquifero è considerata fissa.

R.3.7 Confronto per Benzene, 1,1,2,2Tetracloroetano e 1,4Diclorobenzene

Nella *Tabella R.3-22* sono riportati i parametri necessari per la valutazione del Rischio:

Tabella R.3-22 - Parametri per il calcolo del Rischio

Parametri	Unità di misura	Modello analitico	Modello numerico
SF (Benzene)	(mg/Kg giorno) ⁻¹	5,50E-02	5,50E-02
SF (1,1,2,2Tetracloroetano)	(mg/Kg giorno) ⁻¹	2,00E-01	2,00E-01
SF (1,4Diclorobenzene)	(mg/Kg giorno) ⁻¹	2,40E-02	2,40E-02
LDF	adim.	4,7	4,7
EM	l/ Kg giorno	4,20E-3	4,20E-3
2h	anni	-	0,25 (*)

(*)Parametro necessario per applicare l'integrazione numerica con il metodo di Cavalieri-Simpson.

Nelle

Tabella R.3-23, Tabella R.3-24, Tabella R.3-25 si riporta il Rischio calcolato applicando il modello analitico (senza SAM e con SAM), il modello numerico (Chemflo e VS2DTI) per la stima della concentrazione in soluzione e quello ottenuto tramite una simulazione con il programma BP-RISC, considerando diversi spessori di contaminazione (CASO1, CASO2, CASO3).

Tabella R.3-23 - Valutazione del Rischio - Benzene

ANALISI DI RISCHIO					
	Rischio analitico senza SAM	Rischio analitico con SAM	Rischio numerico: CHEMFLO	Rischio numerico: VS2DTI	BP-RISC
Caso 1	1,36E-02	1,35E-04	7,62E-05	2,45E-05	---
Caso 2		4,48E-03	4,40E-04	4,37E-04	9,7E-04
Caso 3		9,09E-03	8,79E-04	8,75E-04	5E-03

Tabella R.3-24 - Valutazione del Rischio - 1,1,2,2Tetracloroetano

ANALISI DI RISCHIO					
	Rischio analitico senza SAM	Rischio analitico con SAM	Rischio numerico: CHEMFLO	Rischio numerico: VS2DTI	BP-RISC
Caso 1	1,22E-01	1,22E-03	1,64E-04	1,19E-04	---
Caso 2		4,03E-02	4,71E-03	4,69E-03	2,6E-06
Caso 3		8,2E-02	9,40E-03	9,39E-03	1,1E-03

Tabella R.3-25: Valutazione del Rischio - 1,4Diclorobenzene

ANALISI DI RISCHIO					
	Rischio analitico senza SAM	Rischio analitico con SAM	Rischio numerico: CHEMFLO	Rischio numerico: VS2DTI	BP-RISC
Caso 1	2,02E-03	2,03E-05	1,89E-05	1,31E-5	---
Caso 2		6,68E-04	5,58E-04	5,55E-04	2,8E-07
Caso 3		1,36E-03	1,11E-03	1,12E-03	3E-05

Nelle Figura R.3.28, Figura R.3.29, Figura R.3.30 sono riportati sotto forma di grafico i valori contenuti nelle tabelle precedenti.

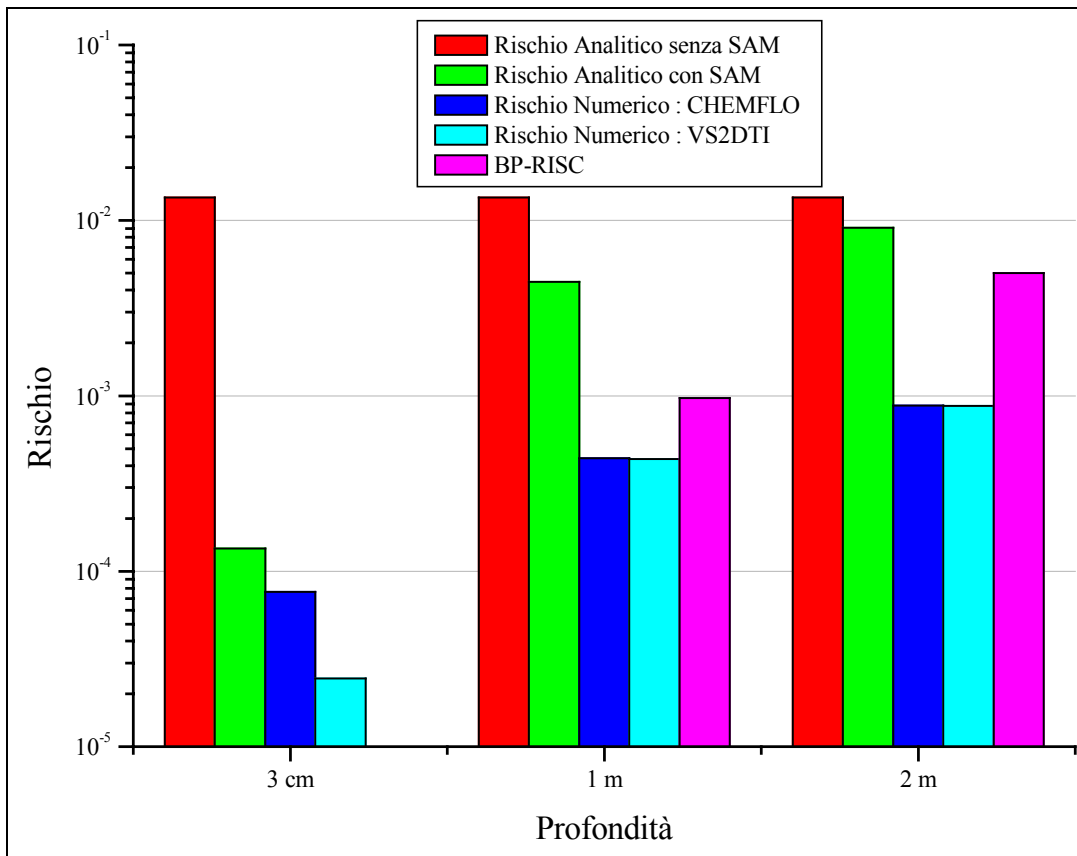


Figura R.3.28: Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda - Benzene

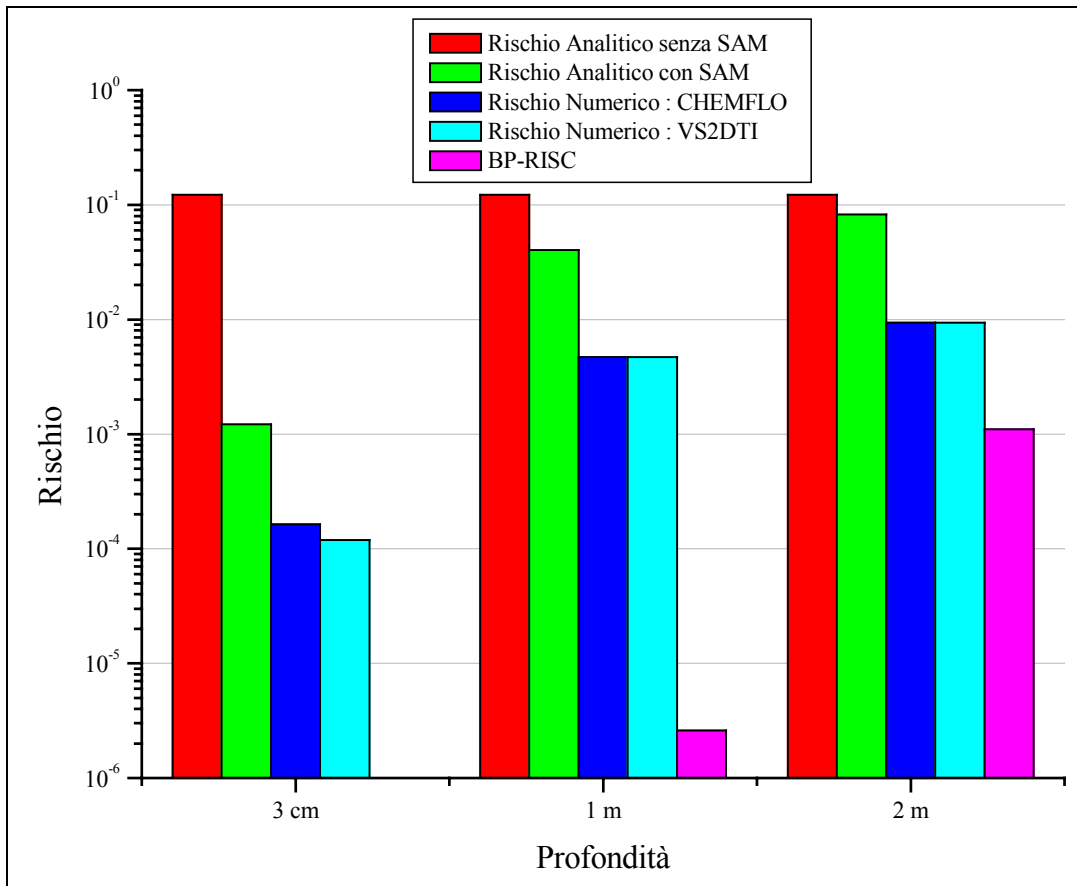


Figura R.3.29: Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda - 1,1,2,2Tetracloroetano

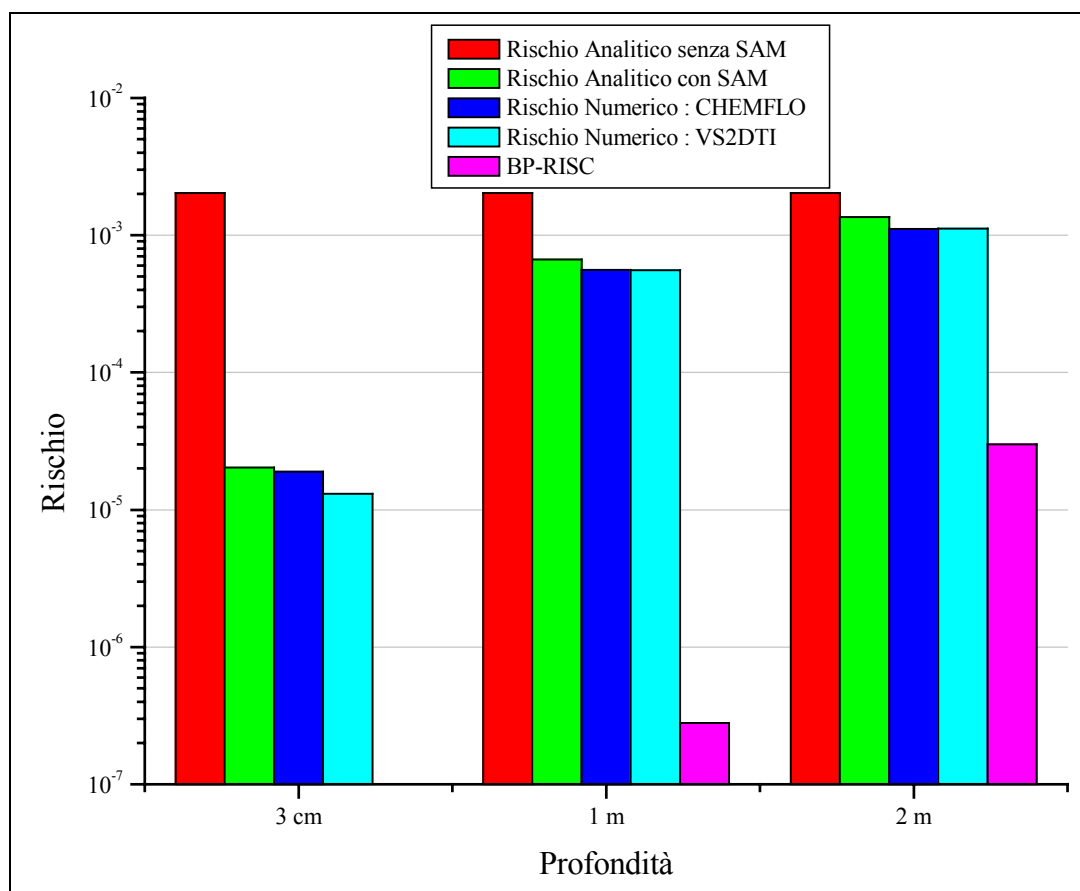


Figura R.3.30: Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda - 1,4Diclorobenzene

Le tre figure (R.3.1, R.3.2, R.3.3) mostrano il Rischio Sanitario calcolato utilizzando il modello analitico senza SAM, con SAM, il modello numerico (Chemflo e VS2DTI) e quello calcolato attraverso una simulazione effettuata con BP-RISC. Si osserva che il Rischio quantificato con il modello analitico senza SAM è più conservativo rispetto agli altri. Inoltre per tutte e tre le applicazioni (CASO 1, CASO 2, CASO 3) assume sempre lo stesso valore, ciò è dovuto al fatto che non considerare il SAM, significa non tener conto del percorso che l'inquinante fa per raggiungere la falda, quindi per uno stesso suolo, qualunque sia lo spessore di contaminazione si otterrà sempre lo stesso valore del Rischio. Risulta evidente che calcolare il Rischio Sanitario con tale modello non permette di rappresentare nel modo migliore il Rischio a cui è realmente sottoposto un individuo. Applicando il modello analitico con SAM si osserva che all'aumentare dello spessore di contaminazione aumenta il Rischio associato. Comunque, il Rischio calcolato con il modello analitico risulta sempre maggiore di quello calcolato con il modello numerico.

Come già detto, il modello analitico prevede che in falda arrivi per tutto il periodo dello studio la stessa concentrazione di contaminante, invece il modello numerico presume che per un primo periodo l'inquinante non riesca a percolare fino alla base della zona insatura, in una seconda fase, si

registra il passaggio completo ma graduale in falda, ed infine si può considerare la zona vadosa incontaminata, quindi in falda non arriverà più contaminante. Si ricorda che il Rischio viene calcolato considerando una durata di esposizione *ED* di 30 anni. Quindi con un modello analitico, si presume che per 30 anni il recettore sia a contatto con una determinata concentrazione costante di contaminante, invece con il numerico si suppone che il recettore sia esposto al contaminante, e quindi soggetto a Rischio, solo per un delimitato arco di tempo compreso nei 30 anni; di conseguenza anche se è esposto (nel nostro caso l'esposizione è dovuta ad ingestione) a concentrazioni maggiori rispetto a quelle previste dall'analitico le assume in tempi ristretti e il Rischio totale risulta sempre minore rispetto a quello valutato con un approccio analitico.

Si noti, inoltre, che il Rischio valutato con il modello numerico assume circa lo stesso valore sia se si usa il software Chemflo che il software VS2DTI.

Si può notare come il Rischio ottenuto dalla simulazione con il software RISC risulti in ogni caso meno conservativo rispetto a quello ottenuto con l'analitico senza SAM ed a quello analitico con SAM. Per il 1,1,2,2-Tetracloroetano e l'1,4-Diclorobenzene si osserva come il Rischio ottenuto dal software sia anche di diversi ordini di grandezza più basso rispetto a quello ottenuto con l'approccio numerico, questo si può spiegare a causa di un problema del programma che necessita obbligatoriamente da parte dell'utente l'inserimento della biodegradabilità dei contaminanti nella zona insatura (imposta come nulla nelle altre simulazioni).

Non è stato possibile simulare il Rischio con uno spessore di 3 cm a causa di problemi collegati al software.

Si riporta infine il rischio calcolato con l'approccio numerico per le diverse tipologie di suolo e per il caso con foc variabile con la profondità (Figura R.3.31). Come si può notare al variare delle diverse condizioni, la variazione del rischio sanitario derivante dall'ingestione di acqua di falda associata è minima.

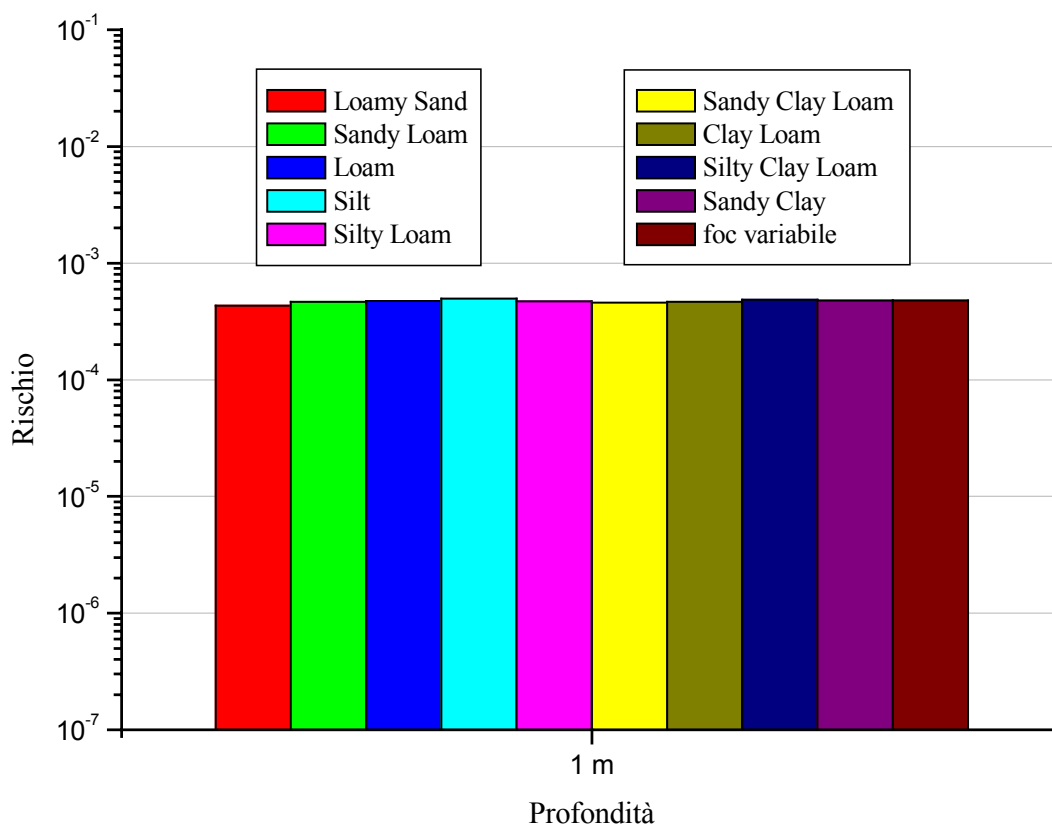


Figura R.3.31 : Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda, Benzene, Granulometria variabile

R.3.8 Confronto per Arsenico

Nel paragrafo R.2.4 abbiamo discusso ampiamente del comportamento dell'Arsenico, mettendo in evidenza che con il metodo numerico il contaminante nel CASO1 (spessore del contaminante 3 cm) e nel CASO2 (spessore del contaminante 1 m) non arriva in falda dopo una simulazione di durata 30 anni, e nel CASO3 (spessore del contaminante 2 m) pur riuscendo a raggiungere l'acquifero, si riscontrano concentrazioni in soluzione irrilevanti rispetto alla quantità valutata con il modello analitico. Quindi in tutte e tre le prove non è possibile calcolare il Rischio per ingestione d'acqua di falda con il metodo numerico, per cui non si può effettuare un confronto tra tale modello e quello analitico.

R.3.9 Sintesi dei risultati

In Tabella R.3-26 è riportata una sintesi degli output derivanti dal calcolo del Rischio Sanitario, applicando il modello analitico (senza SAM e con SAM) il modello numerico (Chemflo e VS2DTI) ed il software BP-RISC, per gli inquinanti considerati.

Tabella R.3-26 - Risultati dell'Analisi di Rischio

Contaminanti	Profondità contaminazione	Rischio analitico senza SAM	Rischio analitico con SAM	Rischio numerico: CHEMFLO	Rischio numerico: VS2DTI	BP-RISC
Benzene	3 cm	1,35E-02	1,35E-04	7,62E-05	2,45E-05	---
	1 m		4,48E-03	4,40E-04	4,37E-04	9,7E-04
	2 m		9,08E-03	8,79E-04	8,75E-04	5E-03
1,1,2,2Tetracloroetano	3 cm	1,22E-01	1,22E-03	1,64E-04	1,19E-04	---
	1 m		4,03E-02	4,71E-03	4,69E-03	2,6E-06
	2 m		8,2E-02	9,40E-03	9,39E-03	1,1E-03
1,4Diclorobenzene	3 cm	2,03E-03	2,03E-05	1,89E-05	1,31E-5	---
	1 m		6,68E-04	5,58E-04	5,55E-04	2,8E-07
	2 m		1,36E-03	1,11E-03	1,12E-03	3E-05

Lo studio riportato nella presente appendice ha come fine il raggiungimento dei seguenti obiettivi:

1. Verificare la conservatività degli output ottenuti con l'applicazione di un dato modello analitico rispetto a quelli ottenuti a mezzo di modelli numerici.
2. Confermare la necessità di considerare il coefficiente di attenuazione del suolo SAM nell'applicazione del modello analitico.

Esaminando i valori presenti nella Tabella R.3-26, risulta evidente che tali obiettivi sono stati raggiunti. Infatti, per tutti i contaminanti esaminati, il modello analitico senza SAM porta ad una sovrastima del Rischio rispetto a quello valutato considerando l'analitico con SAM. Esso risulta essere il più conservativo e il meno rappresentativo della realtà. Però, anche se, il modello analitico con SAM è meno conservativo del modello analitico senza SAM, calcola un rischio maggiore rispetto al modello numerico. Infatti, si osserva in tutti i casi esaminanti, che il modello numerico è

quello che stima un Rischio minore. Come già spiegato in precedenza ciò è dovuto al fatto che esso considera l'acquifero contaminato solo nel momento in cui il contaminante liscivia effettivamente in falda e non in tutto il periodo di studio.

R.4 Osservazioni conclusive

Il seguente lavoro è stato svolto in due fasi successive:

1. si è studiato il fenomeno di percolazione del contaminante attraverso la zona insatura di suolo mediante l'applicazione di modelli analitici e numerici;
2. si è stimata la quantità d'inquinante giunto in falda, e di conseguenza si è valutato il Rischio a cui è sottoposto l'individuo a causa di tale contaminazione.

Il modello concettuale, della zona satura e insatura, è stato realizzato utilizzando i valori di default contenuti nel presente documento sia per la geometria del sito, per la sorgente di contaminazione che per le proprietà fisiche del suolo. Per il modello analitico è stato applicato quanto riportato nel paragrafo 3.3.1. Per il modello numerico nella prima fase è stato necessario l'utilizzo di software, illustrati nella presente appendice, i quali calcolano la concentrazione in soluzione risolvendo le equazioni con il metodo delle differenze finite. Per la valutazione del Rischio è stato applicato quanto riportato nel capitolo 4.

A conclusione della prima fase di lavoro è emerso che:

- Il modello numerico richiede un numero di dati in input maggiore di quelli richiesti dal modello analitico. In particolare, si è evidenziato che uno dei parametri che maggiormente influenza il movimento del contaminante all'interno del mezzo insaturo è il coefficiente di partizione k_s .
- Il modello numerico ha bisogno di specifici software d'ausilio per prevedere il destino del contaminante.

I software utilizzati simulano il fenomeno di percolazione delle sostanze attraverso il mezzo insaturo. Tali programmi sono stati scaricati gratuitamente da internet, e il loro funzionamento è stato ricavato dall'analisi dei relativi manuali d'uso. L'uso dei software non è stato molto semplice, in quanto i manuali in alcuni punti non sono molto completi. Infatti durante l'elaborazione delle

simulazioni si sono presentati alcuni problemi che sono stati risolti tramite supposizioni e deduzioni. Per esempio:

- CHEMFLO: la concentrazione totale in input deve essere compresa in un range di 0 e 1000 g/m³, quindi non si può usare il Chemflo nel caso in cui si abbia un suolo contaminato con una concentrazione maggiore di 1000 g/m³. Inoltre, il coefficiente di partizione k_s può assumere un valore massimo pari a 1000 g/m³, ciò significa che il software non può essere utilizzato per tutti i contaminanti, infatti abbiamo sostituito il Benzo(a)pirene con il 1,4Diclorobenzene.
- VS2DTI: non è chiaro se la concentrazione di contaminante richiesta in ingresso sia relativa alla quantità totale o in soluzione di contaminante. Dopo varie prove e il confronto con il Chemflo si è ritenuto corretto introdurre in input la concentrazione di contaminante in soluzione.

I risultati, della concentrazione in soluzione del contaminante, forniti dai software non sono sempre perfettamente coincidenti, ciò dipende dalla sensibilità e dalla calibrazione del programma. Si è osservato che per una contaminazione di spessore 1 m e 2 m i due programmi Chemflo e VS2DTI danno degli output molto simili. In alcuni casi le curve riportate nel paragrafo 2 coincidono, in altri quella rappresentativa del Chemflo è leggermente traslata indietro rispetto a quella del VS2DTI. La discordanza maggiore negli output si riscontra per uno spessore di contaminazione pari a 3 cm. Ciò è dovuto al fatto che lo spessore della contaminazione iniziale, nel VS2DTI, è inserito graficamente ed essendo trascurabile rispetto alla profondità del suolo causa dei problemi al software.

Dalla seconda fase del lavoro, in cui si è calcolato il Rischio Sanitario associato ad ingestione d'acqua di falda con contaminazione nota, si possono trarre le seguenti conclusioni:

- Il modello analitico risulta più conservativo del numerico.
- Se consideriamo un modello analitico è opportuno prevedere l'uso del SAM.