
BOLLETTINO UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

MARIA CAROLINA DACOME

Modelli matematici e simulazione numerica di processi di biodegradazione di idrocarburi in suoli inquinati

*Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 1-A—La
Matematica nella Società e nella Cultura (1998), n.1S (Supplemento
Tesi di Dottorato), p. 181–184.*

Unione Matematica Italiana

[<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_1998_8_1A_1S_181_0>](http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_1998_8_1A_1S_181_0)

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Modelli matematici e simulazione numerica di processi di biodegradazione di idrocarburi in suoli inquinati.

MARIA CAROLINA DACOME

La tesi costituisce un lavoro di **modellistica matematica e software matematico per l'industria**.

La tesi infatti è stata realizzata nell'ambito di una collaborazione, regolarmente approvata dal Collegio Docenti del Dottorato di ricerca in Matematica Computazionale ed Informatica Matematica di Padova, tra l'autrice e la società TEMA S.p.A., gruppo ENI.

La suddetta collaborazione è stata realizzata all'interno di un progetto di ricerca, finanziato in parte dalla UE, avente come tema la bonifica di terreni contaminati da prodotti petrolchimici.

Al suddetto progetto hanno partecipato società italiane del gruppo ENI e società francesi. L'obiettivo raggiunto dalla parte di progetto seguito da TEMA, e nel cui ambito la tesi è stata portata a termine, è costituito dalla realizzazione di un **modello matematico e software numerico che simula fenomeni di flusso, trasporto e biodegradazione di idrocarburi nei terreni**. Infatti la tecnica di bonifica scelta è stata il risanamento mediante trattamento microbiologico, nota anche con il termine inglese di bioremediation. La bioremediation sfrutta la capacità dei batteri di utilizzare come substrato di crescita, e quindi come fonte di energia, gli inquinanti organici biodegradabili.

La partecipazione dell'autrice al progetto ha riguardato diversi aspetti: la definizione delle specifiche per la modellizzazione matematica dei processi di biodegradazione, la scelta dello schema numerico per la risoluzione del sistema finale di equazioni, la verifica delle funzionalità introdotte nel modello, la analisi di sensitività del modello rispetto ai parametri microbiologici, il confronto con dati sperimentali.

La tesi è organizzata in sette capitoli.

Nel primo capitolo viene descritta la modellizzazione matematica di fenomeni di flusso multifase e trasporto multicomponente, che rappresenta la schematizzazione fisica più adatta per descrivere scenari ambientali caratterizzati da idrocarburi.

L'equazione macroscopica di conservazione della massa di una data specie i presente in una fase p , che è alla base dei suddetti modelli, ha la seguente forma:

$$(1) \quad \frac{\partial}{\partial t}(\phi S_p \rho_p x_i^p) + \nabla \cdot (\rho_p x_i^p \vec{u}_p) + \nabla \cdot (\vec{J}_i^p) = E_i^p + G_i^p$$

dove

– ϕ = porosità (definita come il rapporto tra il volume dei vuoti ed il volume totale) [adimensionale]

– x_i^p = frazione di massa della specie i nella fase p , che consiste nel rapporto tra la massa della specie i e la massa totale di tutte le specie contenute nella fase p [adimensionale]

– S_p = saturazione della fase p (definita come il rapporto tra il volume occupato dalla fase p ed il volume dei vuoti) [adimensionale]

– ϱ_p = densità di massa della fase p

– J_i^p = flusso non-advettivo della specie i nella fase p

– E_i^p = termine di trasferimento di massa della specie i da o alla fase p dovuto a scambi tra fasi diverse

– G_i^p = rappresenta il tasso di produzione/scomparsa della specie i nella fase p , dovuto a reazioni chimiche, quali ad esempio la **biodegradazione**.

Le equazioni di conservazione per ciascuna specie vengono ottenute sommando le equazioni 1 su tutte le fasi. Si ottiene così:

$$(2) \quad \sum_p \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\phi S_p \varrho_p x_i^p) + \nabla \cdot (\varrho_p x_i^p \vec{u}_p) + \nabla \cdot (\vec{J}_i^p) \right\} = \sum_p G_i^p$$

dove $p = g, w, o, s$ (gas, water, oil, soil). Il primo dei due termini a membro destro della equazione 1 scompare.

I capitoli 2 e 3 contengono una dettagliata presentazione della formalizzazione matematica dei processi che possono contribuire al fenomeno della biodegradazione.

Il capitolo 4 descrive la conclusione dell'attività di modellizzazione matematica della biodegradazione. Infatti, nel suddetto capitolo, viene descritto il modello matematico della biodegradazione al quale si è approdati attraverso una attività le cui prime fasi sono descritte nei capitoli 2 e 3 e che è stata completata con il confronto con gli sperimentatori.

Il modulo di bioremediation che si è deciso implementare deve essere in grado di simulare la *biodegradazione (naturale o assistita)* di una *miscela di N idrocarburi*, presenti sia *in fase disciolta* (caso 1) che *in fase liquida non acquosa* (in inglese NAPL: NonAqueousPhaseLiquid) (caso 2), ad opera di *una sola popolazione batterica aerobica* (un solo gruppo trofico). Posto

$$R_i^p = \mu_i^d M_d, \quad R_i^r = \mu_i^r M_r$$

essendo

$$\mu_i^d = \mu_{i \max}^d \left(\frac{C_i^d}{K_i^d + C_i^d} \right) \left(\frac{O}{K_o + O} \right)$$

$$\mu_i^r = \mu_{i \max}^r f_{cxi} \left(\frac{C_i^r}{K_i^r + C_i^r} \right) \left(\frac{O}{K_o + O} \right)$$

e

$$D^d = d^d M_d, \quad D^r = d^r M_r F(A_{ow})$$

le equazioni della biodegradazione diventano

$$(3) \quad \frac{dM_d}{dt} = \sum_{i=1}^N R_i^d - D^d$$

$$(4) \quad \frac{dM_r}{dt} = \sum_{i=1}^N R_i^r - D^r$$

dove M_d , C_i^d rappresentano rispettivamente le concentrazioni di biomassa (massa/unità di volume di suolo poroso) e inquinante (substrato) i -esimo (massa/unità di volume della fase acquosa) nella fase acquosa; C_i^r , M_r sono rispettivamente le concentrazioni degli idrocarburi in fase oleosa (massa/unità di volume di suolo poroso), e della biomassa; O dell'ossigeno disciolto.

L'insieme delle equazioni della biodegradazione viene chiamato *modulo di bioremediation*.

Il modello di flusso e trasporto accoppiato con il modulo di bioremediation risulta costituito, oltre che dalle equazioni 3 e 4, dalle equazioni 2 modificate aggiungendo i seguenti termini al membro destro delle rispettive equazioni:

$$(5) \quad (\text{contaminante } i): -(R_i^d + R_i^r) \frac{1}{Y_i M_i}$$

$$(6) \quad (\text{ossigeno}): - \sum_{i=1}^N (R_i^d + R_i^r) \frac{X_i}{Y_i M_o}$$

dove M_o = peso molecolare (massa molare) dell'ossigeno.

Il capitolo 5 contiene la descrizione dello schema numerico utilizzato per la risoluzione del modello di flusso e trasporto. Per la risoluzione numerica del modello di flusso multifase e trasporto multicomponente accoppiato con il modulo di bioremediation erano possibili almeno due strategie:

1. Metodi ad un passo.
2. Metodi a due passi.

Dopo una accurata valutazione dei pro e contro di ciascuno delle due strategie la scelta è caduta sulla prima classe di metodi, ed in particolare il metodo adottato è stato quello esplicito.

Il capitolo 6 contiene una dettagliata analisi di sensitività del modulo di bioremediation rispetto ai parametri che lo caratterizzano nei due scenari di biodegradazione presi in considerazione (biodegradazione idrocarburi disciolti in fase acquosa, biodegradazione di idrocarburi in fase olio).

In particolare, nel caso del modulo di bioremediation l'analisi di sensitività serve anche ad esplorare l'influenza che le variazioni di valore dei singoli parametri possono avere sul risultato previsto di applicazioni di bioremediation.

Il capitolo 7 infine contiene i risultati di simulazioni di casi di interesse dal punto di vista ambientale, realizzate con il modello di flusso e trasporto accoppiato con il modulo di bioremediation.

In particolare vengono riportati i risultati di simulazioni che riproducono i dati sperimentali di un evento di contaminazione/decontaminazione eseguito presso il

Centro Ricerche Ambientali di Marina di Ravenna. Nel seguente grafico vengono visualizzati i risultati delle simulazioni eseguite con il modello numerico ed i dati sperimentali. Come si può notare i risultati delle simulazioni sono assai soddisfacenti.

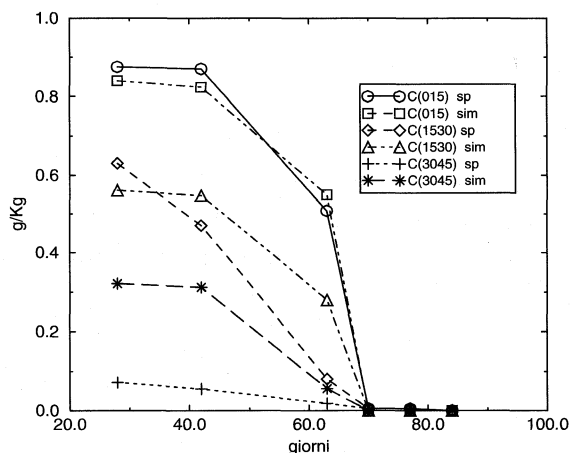


Fig. 1. – Confronto tra i dati sperimentali e i risultati delle simulazioni.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ABRIOLA L.M. and PINDER G.F., *A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds, 1. Equation Development*, Water Resources Research, **21** (1985), 11-18.
- [2] ABRIOLA L.M. and PINDER G.F., *A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds, 2. Numerical Simulation*, Water Resources Research, **21** (1985), 19-26.
- [3] AZIZ K. and SETTARI A., *Petroleum Reservoir Simulation*, Applied Science, London (1979).
- [4] CHEN Y., ABRIOLA L.M., ALVAREZ P.J.J., ANID P.J. and VOGEL T.M., *Modeling Transport and Biodegradation of Benzene and Toluene in Sandy Aquifer Material* Water Resources Research, **28** (1992), 1833-1847.

Indirizzo: Via Gramsci 49 - 20097 San Donato - Milano

e-mail: maria.dacome@agip.it

Dottorato in Matematica Computazionale ed Informatica Matematica

(sede amministrativa: Padova) - Ciclo VIII

Direttore di ricerca: Prof. Renato Spigler, Università Roma III

Correlatore: Dott. Roberto Serra

(direttore Centro Ricerche Ambientali Montecatini di Ravenna)