

TECNICHE DI MODELLAZIONE DI REATTORI DI DISINFEZIONE CON AGENTI CHIMICI: DALL'IDDF ALLA CFD

Alessandra Galbiati¹, Andrea Turolla¹, Marco Maria Rossi²,
Stefano Malavasi², Manuela Antonelli^{1,*}

¹ Politecnico di Milano, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale, Sezione Ambientale.

² Politecnico di Milano, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale, Sezione Idraulica.

Sommario – Il processo di disinfezione ricopre un ruolo fondamentale negli impianti di potabilizzazione e depurazione. Un importante strumento di supporto alla progettazione e all'ottimizzazione di questa fase è la modellazione del processo, basata su un approccio convenzionale, come l'Integrated Disinfection Design Framework (IDDF), o su un approccio avanzato, come la fluidodinamica computazionale (Computational Fluid Dynamics, CFD). Nel presente lavoro, le due tecniche modellistiche, IDDF e CFD, sono state applicate per la modellazione a scala pilota di un reattore di contatto aperto a setti, confrontando le loro prestazioni nella descrizione del processo di disinfezione e svolgendo un'analisi di sensitività sui principali parametri operativi e cinetici. Una prima parte del lavoro si è concentrata sulla corretta applicazione delle due tecniche modellistiche, utilizzando i dati sperimentali disponibili per scopi di calibrazione, mentre nella seconda parte le due tecniche modellistiche sono state confrontate. Entrambi gli approcci sono risultati strumenti efficaci nel caso si disponga di dati sperimentali affidabili, indispensabili per la messa a punto e la corretta applicazione dei modelli. La scelta dell'approccio più idoneo non è univoca, ma dipende fondamentalmente dell'obiettivo del lavoro e dalle risorse computazionali disponibili. Per quanto un approccio semplificato come l'IDDF abbia dimostrato di essere uno strumento efficace per la stima dei fenomeni coinvolti nei processi di decadimento dell'ipoclorito di sodio, inattivazione batterica e formazione di sottoprodotti, questo trascurava qualsiasi informazione circa gli effetti locali, a differenza della CFD che ha invece evidenziato come la loro identificazione sia indispensabile per determinare e quantificare possibili fonti di non idealità.

Parole chiave: inattivazione batterica, ipoclorito di sodio, modellazione reattoristica, fluidodinamica computazionale.

MODELLING TECHNIQUES FOR CHEMICAL DISINFECTION REACTORS: FROM IDDF TO CFD

Abstract – Disinfection process plays a crucial role in water and wastewater treatment and an important tool to support design and optimization of this unit is process modeling, based on a conventional approach, as Integrated Disinfection Design Framework (IDDF), or an emerging advanced approach, as Computational Fluid Dynamics (CFD). In the present work, the two modeling techniques, IDDF and CFD, were applied to

the modeling at pilot scale of an open chicane reactor, their performances in disinfection process description were compared and a sensitivity analysis on the fundamental operating and kinetic parameters was carried out. The first part of the work focused on the proper application of the two modeling techniques, using available experimental data for calibration purposes, while in the second part, the two modeling techniques were compared. Both the approaches proved to be effective tools if reliable experimental data are available, being essential for model calibration and proper application. The choice of the most suitable approach is not univocal, but it is basically related to the aim of the work and to the availability of computational resources. A simplified approach as IDDF proved to be an effective tool to estimate the phenomena involved in sodium hypochlorite decay, disinfection performance and disinfection by-products formation, but it neglects any information about local effects, unlike CFD, being their identification crucial to determine and quantify possible sources of non-ideality.

Keywords: microbial inactivation, sodium hypochlorite, reactor modelling, computational fluid dynamics.

Ricevuto il: 23-12-2016. Accettazione il 18-4-2017.

1. INTRODUZIONE

La disinfezione chimica è uno dei processi di più lontana introduzione nel trattamento delle acque di approvvigionamento e di scarico, risalendo al 1902 il primo utilizzo documentato del cloro nella potabilizzazione delle acque presso l'impianto di Middelkerke in Belgio (MWH, 2012). La diffusione di questa pratica può essere considerata tra i principali progressi in materia di profilassi igienico-sanitaria del secolo scorso, essendo stata in grado da sola di determinare un aumento considerevole dell'aspettativa di vita (Sedlak, 2014). D'altra parte, attualmente la spinta all'innovazione tecnologica risulta molto limitata rispetto ad altri trattamenti, soprattutto per l'elevato grado di consolidamento di processi che complessivamente presentano scarsa complessità tecnologica e ridotta necessità di ottimizzazione. Quest'ultimo aspetto è in gran parte ascrivibile a un quadro normativo riferito ad indicatori convenzionali, quali i batteri coliformi, verso i quali non sono di solito imposti limiti partico-

* Per informazioni: Piazza Leonardo da Vinci 32, 20133 – Milano – Tel. 02.23996407, Fax 02.23996499, e-mail: manuela.antonelli@polimi.it.

larmente stringenti, come nel caso dello scarico in acque superficiali in Italia (5.000 UFC/100 mL riferito ad *E. coli*). Solo il crescente interesse verso pratiche di riuso delle acque reflue e l'individuazione di sottoprodotti di disinfezione (DBPs) hanno rappresentato nell'ultimo ventennio uno stimolo alla promozione di nuove tecnologie e all'utilizzo ottimizzato delle tecnologie in essere.

Inoltre, più recentemente si stanno delineando alcune nuove linee di ricerca e di sviluppo, essenzialmente riconducibili a tre ambiti: (1) l'insorgenza di nuove problematiche di tipo sanitario-ambientale, come la scoperta di ceppi batterici resistenti agli antibiotici (Rizzo et al., 2013); (2) la disponibilità di nuovi strumenti e tecnologie, come la fluidodinamica computazionale e i processi di disinfezione combinati o avanzati (González et al., 2012; Rodríguez-Chueca et al., 2015); (3) la definizione di nuovi vincoli normativi o l'adeguamento di limiti già esistenti.

L'obiettivo primario di un reattore di disinfezione è di mettere efficacemente a contatto il disinfettante con i microrganismi, così da esporre i patogeni a una dose di disinfettante sufficiente a determinarne il tasso di inattivazione desiderato. Le prestazioni idrauliche sono solitamente considerate un buon indicatore dell'efficienza di inattivazione, in quanto un reattore con condizioni fluidodinamiche ottimali permette un adeguato ed uniforme contatto tra disinfettante e microrganismi (Carlson et al., 2001). Storicamente, la progettazione dei reattori si è basata sull'assunzione che il reattore dovesse avere un comportamento il più possibile simile a un flusso a pistone ideale (FP ideale), nel quale si assume che tutti gli elementi fluidi scorrano lungo il reattore in percorsi paralleli a velocità costante, dalla sezione di ingresso a quella di uscita (Levenspiel, 1999). Per questo i reattori di contatto sono tradizionalmente progettati come vasche a setti, ovvero in forma di canali con un notevole sviluppo longitudinale rispetto alla sezione di passaggio. Usualmente, per ridurre l'effettiva lunghezza di tali vasche, si costruiscono molteplici inversioni a gomito (MWH, 2012), ottenendo così dei canali paralleli. Bisogna però tenere in considerazione che il flusso all'interno di una vasca a setti è influenzato significativamente dalle condizioni al contorno e dai gradienti di velocità, i quali ostacolano il raggiungimento di condizioni ideali di funzionamento (Gualtieri, 2007). Per questo motivo, a causa dell'introduzione delle inversioni di flusso, in un reattore reale si verifica frequentemente lo scostamento degli elementi fluidi dal percorso ideale,

a causa di cortocircuiti, ricircoli o formazione di zone morte. Nell'approccio modellistico convenzionale, per tener conto di tale fenomeno, è necessario includere la componente di dispersione del flusso, che considera gli effetti di viscosità alle pareti e di turbolenza (Rauen et al., 2012). Perciò le procedure convenzionalmente utilizzate per la modellazione di reattori di disinfezione si basano sulla determinazione della distribuzione dei tempi di residenza (Residence Time Distribution, RTD) e sull'approssimazione del comportamento reattoristico a modelli ideali, facendo solitamente riferimento a reattori con flusso a pistone in presenza di dispersione assiale, oppure ad un certo numero di reattori completamente miscelati posti in serie (MWH, 2012). Questo è anche il caso dell'approccio tradizionalmente utilizzato per la modellazione delle reazioni chimiche, ovvero il cosiddetto Integrated Disinfection Design Framework (IDDF), che permette di risolvere le equazioni caratteristiche del sistema e di ottenerne una soluzione integrata (Ducoste et al., 2001). Le assunzioni semplificative restituiscono una descrizione globale del comportamento reattoristico, anche grazie alla fluidodinamica complessivamente elementare dei reattori di disinfezione. Questo approccio modellistico, per quanto si sia mostrato efficace e sia stato ampiamente validato alla scala reale, presenta due fondamentali limiti (Greene et al., 2004): (1) una forte incertezza rispetto alle non idealità reattoristiche quali, ad esempio, la presenza di cortocircuiti o zone morte; (2) la non determinazione puntuale delle grandezze che descrivono il processo, come la concentrazione del disinfettante o dei microrganismi, che comporta una sostanziale mancanza di informazione rispetto allo sviluppo locale dei fenomeni all'interno del reattore.

In contrapposizione, va sottolineato il crescente interesse verso gli strumenti di fluidodinamica computazionale (Computational Fluid Dynamics, CFD), che consentono di ovviare ad entrambi questi limiti, dal momento che i valori delle variabili di interesse sono individuati in ogni punto del dominio e, pertanto, possono essere identificate le zone in cui si verificano scostamenti significativi dal comportamento reattoristico desiderato oppure nelle quali i fenomeni caratteristici si verificano con una determinata intensità. In estrema sintesi, la CFD permette di risolvere simultaneamente le equazioni caratteristiche di un sistema all'interno di domini di forma e dimensioni arbitrarie, così da dare una descrizione locale dei fenomeni d'interesse (Versteeg e Malalasekera, 2007). In

passato, la CFD è già stata applicata efficacemente per la simulazione di reattori di disinfezione (Zhang et al., 2014), e ha evidenziato importanti potenzialità nella modellazione combinata dei fenomeni caratterizzanti il processo, quali fluidodinamica, trasporto delle specie d'interesse e reazioni chimiche relative al decadimento del disinfettante, all'inattivazione batterica e allo sviluppo di sottoprodotti di disinfezione. Di conseguenza, questo approccio può supportare un'ottimizzazione del processo, sia in fase di progettazione che in fase gestione, da molteplici punti di vista, come la minimizzazione nell'uso del disinfettante e nella formazione dei sottoprodotti di disinfezione, a fronte della contestuale massimizzazione dell'inattivazione batterica.

Nel presente lavoro ci si propone di sviluppare un confronto tra l'approccio IDDF e CFD per un reattore tradizionale la cui geometria vuole approssimare un flusso a pistone ideale, considerato la configurazione più appropriata per la disinfezione chimica. Nel dettaglio, è stato studiato un reattore aperto a setti alla scala pilota, utilizzando ipoclorito di sodio come disinfettante ed *E. coli* quale microrganismo indicatore. La modellazione con entrambi gli approcci IDDF e CFD ha coinvolto quattro fasi fondamentali e consecutive: l'analisi del comportamento fluidodinamico, lo studio del decadimento del disinfettante, dell'inattivazione batterica e la produzione di sottoprodotti. È stata infine condotta un'analisi di sensitività sui modelli IDDF e CFD, al fine di studiare e confrontare le risposte di modelli caratterizzati da metodi di risoluzione numerica differenti, al variare di uno o più parametri operativi e cinetici in ingresso.



2. MATERIALI E METODI

2.1. Caso di studio e prove sperimentali

Lo studio ha riguardato una vasca a setti a scala pilota (Figura 1a) composta da 5 canali a pelo libero ($4,50 \text{ m} \times 0,29 \text{ m}$) con quattro inversioni di flusso ($V = 2,3 \text{ m}^3$), in cui la portata ($Q = 4,5 \text{ m}^3/\text{h}$; Hydraulic Retention Time, $\text{HRT} = 30 \text{ min}$) è immessa ad un'estremità per mezzo di un tubo orizzontale ($D = 4,5 \text{ cm}$) posizionato centralmente nella sezione; in uscita l'acqua sfiora alla fine del quinto canale attraverso uno stramazzo, che regola l'altezza del pelo libero a circa 35 cm. Il regime del flusso varia tra un moto completamente turbolento all'ingresso ($\text{Re} = 3,5 \cdot 10^4$) e un moto turbolento di transizione ($\text{Re} = 5,07 \cdot 10^3$) nella sezione del canale, dove la velocità media è pari a $1,25 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$.

Sono state svolte prove di tracciante sul reattore pilota con l'obiettivo di calibrare i modelli. Le prove sono state eseguite iniettando impulsivamente 0,5 L di un soluto conservativo (cloruro di sodio, NaCl a 280 g/L) prima della sezione di ingresso a cui è stata garantita la miscelazione per mezzo di un miscelatore statico posto tra il punto di iniezione e l'ingresso in vasca. Il punto di campionamento è stato posto in corrispondenza della metà dell'ultimo canale nel centro della sezione (Figura 1b).

2.2. Tecniche di modellazione

L'approccio IDDF è stato implementato attraverso Mathworks MATLAB R2015a e Microsoft Excel, mentre l'approccio CFD è stato sviluppato utilizzando il software ANSYS Fluent 15.0.

La modellazione IDDF è stata strutturata in quattro passaggi, che nello specifico fanno riferimento



Figura 1 – Vasca a setti a scala pilota: (a) immagine, (b) sviluppo tridimensionale della geometria, in cui sono indicati il punto di campionamento nel corso delle prove, e le sezioni di ingresso ed uscita

al comportamento idraulico del reattore, al decadimento del disinfettante, all'inattivazione batterica e alla formazione di sottoprodotti. Invece, la modellazione CFD è stata sviluppata in cinque passaggi che riguardano il comportamento fluidodinamico, il trasporto di soluto, il decadimento del disinfettante, l'inattivazione batterica e la formazione di sottoprodotti. In entrambi gli approcci, una volta definiti i migliori modelli fluidodinamici, questi sono stati utilizzati per implementare le cinetiche di decadimento, inattivazione e formazione di sottoprodotti.

2.2.1. Analisi idrodinamica con approccio IDDF

Sono stati utilizzati due modelli per riprodurre le curve RTD sperimentali: un modello di reattore con flusso a pistone caratterizzato da dispersione assiale (Dispersion Flow Model, DFM) e un modello che prevede un numero di reattori completamente miscelati in serie (Tank In Series, TIS); è stato poi sviluppato un modello basato sulla combinazione di un Completely Stirred Tank Reactor (CSTR) e un DFM in serie (CSTR+DFM). Le equazioni per i modelli DFM e TIS sono riportate di seguito (Levenspiel, 1999):

$$DFM: E(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \cdot d}} \cdot e^{-\frac{(1-\theta)^2}{4 \cdot d}} \text{ per } d \leq 0,01 \quad (1)$$

$$E(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \cdot \theta \cdot d}} \cdot e^{-\frac{(1-\theta)^2}{4 \cdot \theta \cdot d}} \text{ per } d > 0,01 \quad (2)$$

$$TIS: E(\theta) = \frac{n \cdot (n-\theta)^{(n-1)}}{(n-1)!} \cdot e^{-n \cdot \theta} \quad (3)$$

dove:

$E(\theta)$ curva RTD normalizzata (-);

θ tempo normalizzato con il tempo medio di residenza (t_{medio}) (-);

d numero di dispersione (parametro incognito del modello DFM) (-);

n numero di CSTR in serie (parametro incognito del modello TIS) (-).

A partire dalla stima del numero di dispersione d è possibile calcolare il coefficiente di dispersione D in m^2/s , rappresentativo delle condizioni fluidodinamiche in ogni punto del reattore (MWH, 2012):

$$D = v \cdot L \cdot d \quad (4)$$

dove:

v velocità media del fluido (m/s);

L lunghezza (m).

Il tempo medio di residenza si stima sulla base dei dati sperimentali con la seguente formulazione (MWH, 2012):

$$t_{medio} = \frac{\int_0^t t \cdot C dt}{\int_0^t C dt} \quad (5)$$

Tuttavia, al fine di ottenere un adattamento buono e affidabile, sia per il modello DFM che per il modello TIS è stato necessario considerare il tempo medio di residenza come un'ulteriore parametro del modello da stimare.

L'equazione dell'integrale di convoluzione usata per implementare il modello CSTR+DFM è la seguente (Levenspiel, 1999):

$$C_{conv}(t) = \int_0^t C_{CSTR}(t-t') \cdot E(t')_{DFM} \cdot dt' \quad (6)$$

dove:

$C_{conv}(t)$ concentrazione dopo la convoluzione dei modelli CSTR e DFM (mg/L);

$C_{CSTR}(t-t')$ concentrazione uscente dal volume di CSTR ed in ingresso al volume di DFM (mg/L);

$E(t')_{DFM}$ curva RTD per il volume di DFM (equazioni 1 e 2).

Nel caso dell'ultimo modello descritto, i parametri incogniti sono i volumi di CSTR e DFM (V_{CSTR} e V_{DFM}) e il numero di dispersione d del DFM.

I parametri di tutti i modelli presentati sono stati stimati applicando una regressione non lineare ai minimi quadrati per ottimizzare l'adattamento ai dati sperimentali.

2.2.2. Definizione del modello CFD

La vasca di disinfezione è stata modellata sviluppando un modello tridimensionale in un sistema Euleriano nelle seguenti fasi: (i) è stato identificato il modello di turbolenza più appropriato con simulazioni allo stato stazionario ed è stata verificata l'indipendenza dalla griglia dei parametri caratteristici del campo di moto, (ii) il trasporto di un tracciante conservativo è stato modellato eseguendo simulazioni in condizioni transitorie per riprodurre le prove sperimentali, (iii) sono stati implementati modelli cinetici in condizioni di stato stazionario per simulare il decadimento del disinfettante, l'inattivazione batterica e la formazione di sottoprodotti.

Le simulazioni sono state effettuate utilizzando un computer equipaggiato con un processore Intel i7-4790 con frequenza 3.60 GHz e 32 GB di memoria RAM. Per quanto riguarda i residui, valori uguali o inferiori a 10^{-6} si sono ritenuti appropria-

ti per raggiungere la convergenza, assieme alla stabilizzazione dei valori delle variabili all'interno del dominio computazionale per un numero di iterazioni di almeno 10^4 . I tempi di calcolo sono risultati variabili tra uno e due giorni per le simulazioni fluidodinamiche e di trasporto di tracciante, mentre le simulazioni delle cinetiche di decadimento del disinfettante e di formazione dei sottoprodotti sono state completate in pochi minuti. Infine, le simulazioni di inattivazione batterica hanno richiesto alcune ore per andare a convergenza. La discretizzazione della geometria reattoristica è stata eseguita generando 3 griglie, contraddistinte da differenti dimensioni delle celle e, quindi, da un numero di elementi variabile tra circa 700.000 e 1.250.000. L'indipendenza della griglia è stata osservata per la griglia intermedia, costituita da circa 1.200.000 elementi di forma esaedrica, con dimensione caratteristica di 10 mm nel primo canale e 15 mm nel resto del dominio. Per rifinire la griglia in corrispondenza della sezione d'ingresso, dove si osservano i gradienti maggiori delle grandezze fluidodinamiche, la geometria è stata suddivisa in volumi di dimensioni inferiori e di forma irregolare, ciascuno costituito da celle di dimensione caratteristica, di grandezza progressivamente più piccola all'avvicinarsi alla sezione d'ingresso. Per quanto concerne il comportamento idrodinamico, i campi di turbolenza e velocità sono stati simulati risolvendo le equazioni del campo di moto con l'approccio Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS), ovvero per mezzo delle equazioni di Navier-Stokes mediate nel tempo. Le equazioni caratteristiche che descrivono il moto di un fluido incomprimibile sono l'equazione di continuità e l'equazione del momento, così espresse:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} + \frac{\partial U_j}{\partial x_j} + \frac{\partial U_k}{\partial x_k} = 0 \quad (7)$$

$$\rho \left(\frac{\partial U_i^2}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i U_j}{\partial x_j} + \frac{\partial U_i U_k}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu_{eff} \cdot \left(\frac{\delta^2 U_i}{\delta x_i^2} + \frac{\delta^2 U_i}{\delta x_j^2} + \frac{\delta^2 U_i}{\delta x_k^2} \right) \quad (8)$$

dove:

$U_{i,j,k}$ componenti medie della velocità (m/s);

$x_{i,j,k}$ direzioni spaziali (m) con $i, j, k = 1, 2, 3$;

ρ densità (kg/m^3);

P pressione media (Pa);

μ_{eff} viscosità effettiva ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$) data dalla somma della viscosità dell'acqua μ e da quella turbolenta μ_T dei vortici.

Gli sforzi di Reynolds sono stati riprodotti per mezzo di un modello di turbolenza del tipo k- ϵ RNG, ritenuto più idoneo per bassi numeri di Reynolds (Fluent 12.0, 2009) e quindi il migliore in termini di stabilità e consistenza. La sua funzione è quella di riprodurre l'effetto della turbolenza nel flusso attraverso due equazioni che descrivono l'energia cinetica k del fluido e il suo tasso di dissipazione ϵ . È stato infine necessario fissare le condizioni al contorno del flusso sui quattro confini fisici del dominio:

- non si è ritenuto necessario applicare al flusso di ingresso un profilo completamente sviluppato, ma è stata semplicemente imposta la velocità media nel tubo di ingresso pari a 0,7734 m/s;
- allo stramazzo in uscita è stato imposto il valore di pressione ambiente;
- alle pareti solide è stata imposta una velocità nulla, mentre il comportamento del fluido in prossimità di queste ultime è stato trattato con *enhanced wall function*;
- il pelo libero dell'acqua è stato assimilato a una superficie rigida orizzontale priva di attriti, a cui è stata applicata una condizione di simmetria (velocità e gradienti normali nulli).

Per quanto riguarda le simulazioni del trasporto di tracciante, il soluto conservativo è stato assimilato a uno scalare passivo privo d'influenza sul campo di velocità e si è assunto che la sua distribuzione non fosse influenzata da interazioni di tipo elettrostatico tra le particelle. Il suo trasporto è stato simulato risolvendo in transitorio l'equazione RANS di advezione-diffusione:

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \vec{U} \cdot \text{grad}(C) - \Gamma \cdot \text{div}(\text{grad}(C)) = 0 \quad (9)$$

dove:

C concentrazione media all'interno di una cella dello scalare (kg/m^3);

Γ coefficiente di dispersione di massa ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$).

Il coefficiente Γ è dato dalla somma di due contributi: la diffusione molecolare e la diffusione turbolenta, quest'ultima dovuta ai vortici turbolenti che caratterizzano il flusso. Per calibrare il modello sui dati sperimentali, è stato svolto uno studio parametrico sul numero di Schmidt turbolento (Sc_T), la cui formula è riportata nell'equazione (10), che definisce la relazione tra advezione e diffusione turbolenta:

$$Sc_T = \frac{\mu_T}{D_T} \quad (10)$$

dove:

μ_T viscosità turbolenta;

D_T diffusività turbolenta.

Il numero di Schmidt è stato assunto isotropico e costante durante ciascuna simulazione. Partendo dal campo di moto ottenuto dalla simulazione in stazionario è stata impostata una simulazione non stazionaria con time-step di 0.1 secondi e le seguenti condizioni al contorno: una concentrazione uniforme e costante del tracciante alla sezione d'ingresso per la durata di 30 secondi, ottenuta a partire dalla massa di soluto immessa nelle prove sperimentali; successivamente, la concentrazione è stata posta uguale a zero. Alle pareti solide è stata imposta una condizione di flusso nullo.

Infine, per le simulazioni di decadimento, di inattivazione batterica e di formazione di sottoprodotti sono state introdotte delle equazioni di advezione-diffusione analoghe alla (8), in cui a destra dell'uguale compaiono dei termini di sorgente volumetrica atti a rappresentare le specifiche reazioni di interesse. Si noti che le cinetiche di inattivazione e di formazione dei sottoprodotti sono funzione della concentrazione di cloro residuo, per cui la loro modellazione dipende da quella del decadimento del disinfettante. Le simulazioni sono state eseguite allo stato stazionario adottando il numero di Schmidt che meglio si adattava ai dati sperimentali e imponendo condizioni al contorno analoghe al caso di trasporto conservativo.

2.2.3. Cinetiche di decadimento, inattivazione e formazione di sottoprodotti

Il decadimento dell'ipoclorito di sodio può essere simulato efficacemente con un modello cinetico di primo ordine (Feben e Taras, 1951), che è il più semplice in letteratura e uno dei più utilizzati. Questo modello descrive il profilo di concentrazione con un decadimento esponenziale nel tempo senza prevedere alcun consumo ossidativo iniziale. La forma integrale del modello è:

$$Cl \text{ libero} = C_0 \cdot e^{-k_D \cdot t_c} \quad (11)$$

dove:

$Cl \text{ libero}$ concentrazione di cloro residuo (mg/L);

C_0 concentrazione iniziale di cloro attivo (mg/L);

k_D costante cinetica di primo ordine (min^{-1});

t_c tempo di contatto (min).

L'inattivazione batterica è stata simulata con il modello di Hom modificato in modo da includere la cinetica di decadimento di primo ordine, che por-

ta alla soluzione gamma incompleta del modello di Hom (Haas e Joffe, 1994):

$$\ln\left(\frac{N_t}{N_0}\right) = -k_H \cdot C_0^n \cdot t_c^m \cdot \left(\frac{1 - e^{-\frac{k_D \cdot t_c \cdot n}{m}}}{\frac{k_D \cdot t_c \cdot n}{m}}\right)^m \quad (12)$$

dove:

N_t numero di microrganismi al tempo di contatto t_c (CFU/100 mL);

N_0 numero iniziale di microrganismi (CFU/100 mL);

k_H costante di inattivazione di Hom ($(\text{mg/L})^{-n} \cdot (\text{min})^{-m}$);

n, m coefficienti empirici (-).

Le principali reazioni responsabili dello sviluppo dei sottoprodotti durante la clorazione riguardano l'interazione del disinfettante con la sostanza organica naturale (Natural Organic Matter, NOM), che può portare allo sviluppo di molecole organiche clorate (Deborde e von Gunten, 2008). Sottoprodotti tossici tipici della disinfezione con cloro libero sono i trialommetani (Total TriHaloMethanes, TTHMs). In presenza dello ione bromuro (Br⁻), che sostituisce progressivamente gli atomi di cloro, è anche possibile la formazione di composti brominati, più tossici rispetto a quelli clorurati. La formazione dei sottoprodotti è stata simulata con il modello cinetico sviluppato da Sohn et al. (2004) a partire dalla base di dati pubblicata da US EPA nel 1998, nel quale la formazione di TTHMs è descritta da una cinetica a due fasi, una di reazione veloce e una lenta. Tenuto conto dell'HRT del reattore in esame (30 minuti), si è ritenuto ragionevole supporre la sola presenza della prima fase di reazione veloce. La forma integrata del modello cinetico di formazione dei TTHMs per il presente caso di studio può essere quindi definita come segue:

$$TTHM = A_{TTHM} \cdot C_0 \cdot (1 - e^{-k_D \cdot t_c})$$

$$\text{con } A_{TTHM} = \frac{k_{1a}}{k_D} \quad (13)$$

$$\ln(A_{TTHM}) =$$

$$= -2,11 - 0,87 \cdot \ln\left(\frac{C_0}{DOC}\right) - 0,41 \cdot$$

$$\cdot \ln(NH_3 - N) + 0,21 \cdot \ln(C_0) + 1,98 \cdot \ln(pH) \quad (14)$$

dove:

$TTHM$ concentrazione di trialommetani totali ($\mu\text{g/L}$);

A_{TTHM} parametro cinetico risultante dal rapporto tra la k_{1a} , che rappresenta la costante cine-

tica delle reazioni veloci nella prima fase di formazione dei TTHMs, e k_D ;

DOC concentrazione di carbonio organico disciolto (mg/L);

NH₃-N concentrazione di ammoniaca (mg/L come N);

pH condizioni di pH (-).

Il carbonio organico disciolto (Dissolved Organic Carbon, DOC) è utilizzato quale parametro indicatore della presenza di NOM ed è possibile supporre che sia equivalente al carbonio organico totale (Total Organic Carbon, TOC), in quanto il DOC corrisponde generalmente a oltre il 95% del TOC per la maggior parte delle fonti idriche (Sohn et al., 2004).

2.2.4. Parametri modellistici e analisi di sensitività

I valori dei parametri utilizzati per l'implementazione delle cinetiche di decadimento, inattivazione batterica, formazione di TTHMs e le condizioni di minimo e massimo per lo sviluppo dell'analisi di sensitività sono riportati in Tabella 1.

Va tenuto presente che sono stati utilizzati quali parametri di decadimento del disinfettante e di inattivazione batterica valori che assumono il cloro presente nella sola forma di cloro libero, caso tipico delle acque di approvvigionamento e stimati nel lavoro di Haas et al. (1995).

L'analisi di sensitività è stata condotta sui modelli IDDF e CFD per studiarne le risposte al variare di uno o più parametri cinetici e operativi in ingresso. Ciascun parametro è stato fatto variare di una medesima proporzione rispetto al valor medio, mantenendolo però sempre coerente con i limiti imposti dalle condizioni di esercizio degli esperimenti batch condotti da Haas et al. (1995) e con gli intervalli di applicabilità imposti dal modello cinetico sviluppato da Sohn et al. (2004). I parametri dei modelli cinetici sono stati perturbati uno alla volta, mantenendo fisse le condizioni medie

per quelli restanti (metodo One Variable At a Time, OVAT) e la loro sensitività è stata poi valutata impiegando l'indice Normalized Sensitivity Index (NSI) (Hamby, 1994):

$$NSI = \frac{OUTPUT_{max} - OUTPUT_{min}}{OUTPUT_{max}} \cdot \frac{\delta_{max}}{\delta_{max} - \delta_{min}} \quad (15)$$

dove:

$OUTPUT_{max}$ valore massimo della risposta del modello;

$OUTPUT_{min}$ valore minimo della risposta del modello;

δ_{max} valore massimo del parametro del modello;

δ_{min} valore minimo del parametro del modello.

3. RISULTATI E DISCUSSIONE

3.1. Analisi idrodinamica

L'analisi idrodinamica condotta con l'approccio IDDF prevede la calibrazione dei diversi modelli matematici sulla curva RTD sperimentale. Le curve stimate per i modelli DFM e TIS sono mostrate in Figura 2a, dove tuttavia si può notare che entrambe non si adattano in modo accurato ai dati sperimentali. È inoltre possibile osservare un effetto di anticipo del tempo medio di residenza rispetto a quello teorico (27 minuti), in quanto il valore stimato da entrambi i modelli DFM e TIS è risultato inferiore (Tabella 2). Allo stesso tempo è però interessante notare che è stato ottenuto un valore ridotto del coefficiente d e un valore elevato del coefficiente n , come riportato in Tabella 2, ad indicare quindi che l'effetto di dispersione sul regime di moto è relativamente basso e il reattore potrebbe essere quasi assimilabile a un flusso a pistone ideale. Dunque, secondo i modelli DFM e

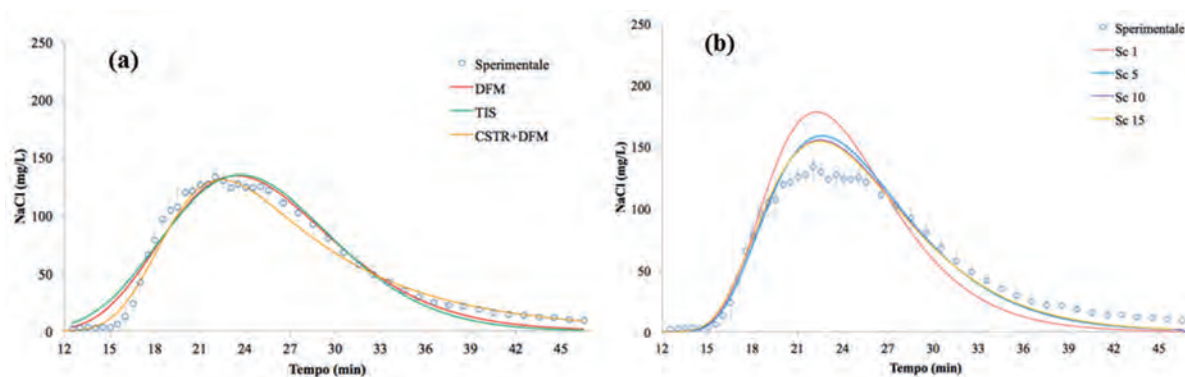


Figura 2 – Curve RTD generate nella sezione di campionamento a confronto con i dati sperimentali: (a) modelli DFM, TIS e CSTR+DFM, (b) simulazioni CFD in funzione del numero turbolento di Schmidt

Tabella 1 – Valori (MEDIA) dei parametri utilizzati per modellare i processi di decadimento del disinfettante, inattivazione batterica, formazione di TTHMs, e condizioni minime e massime (MIN, MAX) utilizzate per sviluppare l'analisi di sensitività

		MIN	MEDIA	MAX
Cinetica di decadimento di ordine uno (Haas et al., 1995 – Fiume Willamette)	C_0 (mg/L)	2	2,5	3
	k_D (min^{-1})	0,024	0,048	0,072
Cinetica di inattivazione di Hom (Haas et al., 1995 – Fiume Willamette)	N_0 (Numero per L)	10^4	10^5	10^6
	k_H ($(\text{mg/L})^{-n} \text{min}^{-m}$)	3,25	6,50	9,75
	C_0 (mg/L)	2	2,5	3
	n (-)	0,205	0,410	0,615
	m (-)	0,032	0,064	0,096
Cinetica di formazione di TTHMs (Sohn et al., 2004)	C_0 (mg/L)	2	2,5	3
	DOC (mg/L)	1,2	4,15	7,1
	$\text{NH}_3 - \text{N}$ (mg/L)	0,065	0,378	0,690
	pH (-)	7,17	7,26	7,34

TIS la geometria reattoristica analizzata permetterebbe la buona approssimazione con un reattore con flusso a pistone, pur permanendo rilevanti non idealità, come suggerito dalla stima del tempo medio di residenza.

Al fine di migliorare la descrizione del comportamento idraulico del reattore, è stato valutato un ulteriore modello basato sulla combinazione di un CSTR e di un DFM, che ha portato ad ottenere risultati soddisfacenti, come mostrato in Figura 2a. Questo modello è in grado di descrivere anche la coda finale dei dati sperimentali, dovuta alla presenza di zone morte nel reattore, che determinano un lento rilascio di parte della massa di tracciante temporaneamente intrappolata nelle regioni stagnanti del reattore.

In Tabella 2 sono mostrati i risultati della fase di calibrazione dei modelli DFM, TIS e CSTR+DFM sui dati sperimentali.

Sulla base dei parametri stimati con i modelli DFM, TIS e CSTR+DFM, è stata poi calcolata la percentuale di zone morte per ciascun modello implementato: il volume di zona morta è risultato pari al 10,7%, 7,3% e 16,7% rispettivamente.

Per quanto riguarda l'analisi CFD della geometria reattoristica studiata, in assenza di misure di velocità e di turbolenza, la scelta del modello fluidodinamico si è basata sull'applicazione del modello più idoneo al caso in esame, come spiegato nel paragrafo 2.2.2. Un risultato descrittivo dell'analisi CFD è riportato in Figura 3, dove è mostrato il contour del campo di velocità per la sezione orizzontale posta a metà dell'altezza d'acqua e per le sezioni verticali poste a metà del primo e dell'ultimo canale. Nella stessa figura sono individuate alcune

Tabella 2 – Risultati della calibrazione dei modelli DFM, TIS e CSTR+DFM: numero di dispersione (d), numero di reattori in serie (n), tempo medio di residenza (t_{medio}), volume di CSTR (V_{CSTR}) e volume di DFM (V_{DFM})

Modello	d (-)	n (-)	t_{medio} (min)	V_{CSTR} (L)	V_{DFM} (L)
DFM	0,028	-	24	-	-
TIS	-	19	25	-	-
CSTR+DFM	0,011	-	22,5	590	1407

non idealità caratteristiche del reattore analizzato, ovvero cortocircuiti, zone morte e ricircoli.

Cortocircuiti e zone morte sono considerati le cause principali della riduzione delle prestazioni di un processo di disinfezione (Kim et al., 2013). I cortocircuiti si creano in regioni caratterizzate da elevate velocità, che forzano parte del fluido ad abbandonare più velocemente il reattore seguendo percorsi preferenziali (Teixeira and Siqueira, 2008). Le zone morte sono costituite da porzioni di volume in cui la miscelazione è insufficiente, come angoli o zone circostanti ai setti. In entrambi i casi si determina un utilizzo inefficiente del volume di reattore, che porta alla diminuzione del tempo di residenza rispetto a quello teorico (Lloyd et al., 2003), fenomeno ben evidente osservando anche solo qualitativamente i dati sperimentali di tracciante in Figura 2, che mostrano un anticipo del tempo medio di residenza, rispetto a quello teorico. Le non idealità del flusso sono responsabili della presenza di regioni con condizioni lontane da quelle tipiche di un FP ideale, non solo in termini di tempo di residenza, ma anche in termini di con-

centrazione di disinfettante. Entrambe le manifestazioni di non idealità potrebbero condurre sia alla diminuzione delle prestazioni di inattivazione, con implicazioni relative alla violazione dei limiti normativi, sia a una maggiore formazione di sottoprodotti. Infine, setti e inversioni di flusso contribuiscono ad aumentare le non idealità del reattore, rendendo più difficoltoso prevederne il comportamento idrodinamico con un modello matematico.

In particolare, sulla base dei risultati in Figura 3, è possibile fare le seguenti considerazioni:

- la sezione di ingresso genera una regione caratterizzata da velocità molto elevate nella prima metà del primo canale, nonché una zona di ricircolo nella parte superiore in prossimità del pelo libero (Figura 3c), e richiede quindi un'attenta progettazione; infatti quando la sezione di ingresso è molto più piccola di quella del reattore si forma un getto;
- la configurazione della sezione di uscita è fondamentale per minimizzare lo sviluppo di zone locali di accelerazione nel campo di moto, considerato che la velocità tende ad aumentare proporzionalmente al rapporto tra la sezione del canale e quella dello stramazzo; in questo caso, dalle immagini non emerge in modo evidente l'effetto dovuto alla zona di richiamo dello stramazzo;
- le inversioni di flusso causano la formazione di cortocircuiti in prossimità delle pareti esterne dei canali, zone morte agli angoli delle inversioni e subito dietro le pareti dei setti, come evidenziato in Figura 3b.

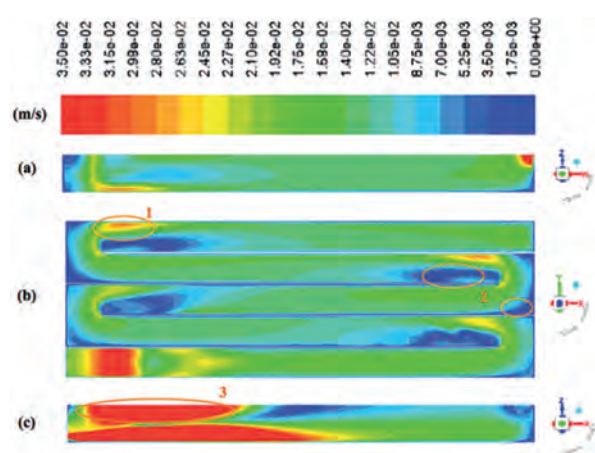


Figura 3 – Campo di velocità nel reattore di contatto: (a) sezione verticale a metà larghezza dell'ultimo canale, (b) sezione orizzontale a metà dell'altezza d'acqua del reattore, (c) sezione verticale a metà larghezza del primo canale, dove sono evidenziati cortocircuiti (1), zone morte (2) e ricircoli (3)

Per quanto riguarda invece i fenomeni di trasporto di un tracciante conservativo, questi ultimi sono stati analizzati con l'approccio CFD per verificare il modello idrodinamico individuato, non avendo a disposizione misure di velocità né di turbolenza che permettessero la validazione del campo di moto. Prima di tutto, è importante sottolineare che deve essere scelto un numero di Schmidt turbolento idoneo per poter ottenere risultati affidabili. Non ci sono studi che riportino un valore standard per il numero di Schmidt turbolento, essendo necessario uno studio parametrico preliminare per identificare il valore che meglio si adatta ai dati sperimentali. La risposta del sistema allo stimolo impulsivo in ingresso è stata studiata nella sezione posta alla metà dell'ultimo canale del reattore, calcolando il valore medio di concentrazione del tracciante sulla sezione, in funzione del tempo, al variare del numero di Schmidt turbolento. Le curve RTD simulate con la CFD a confronto con i dati sperimentali sono mostrate in Figura 2b. Sulla base dei risultati ottenuti possono quindi essere fatte alcune considerazioni di carattere generale:

- piccole variazioni di Sc_T generano cambiamenti significativi nella forma delle curve, in particolare per valori ridotti di Sc_T ;
- aumentando Sc_T il picco di concentrazione decresce e si avvicina ai valori sperimentali e di conseguenza le curve di tracciante simulate si adattano meglio ai dati sperimentali per valori di Sc_T più elevati;
- nessuno dei tempi medi di residenza stimati è risultato maggiore di quello teorico e ciò indica la possibile prevalenza di effetti di cortocircuito e zone morte sui processi di miscelazione;
- la curva che meglio si adatta ai dati sperimentali corrisponde a Sc_T 10, in quanto ulteriori incrementi del suo valore non hanno condotto a miglioramenti significativi nella qualità del risultato. Nonostante il buon adattamento delle curve RTD simulate tramite l'approccio CFD, va sottolineato che per tutti i numeri di Sc_T testati la CFD non è mai stata in grado di cogliere il fenomeno della coda di concentrazione finale.

In conclusione, come emerge già dalla letteratura esistente, le molteplici differenze tra gli approcci IDDF e CFD rispetto alla modellazione del comportamento fluidodinamico possono influenzare significativamente i risultati delle fasi di modellazione successive, e quindi la valutazione complessiva del processo di disinfezione. È dunque fondamentale un'accurata analisi fluidodinamica per poter poi sviluppare le successive fasi di modellazione delle

reazioni chimiche di decadimento, inattivazione e formazione di sottoprodotti. Quando viene utilizzato l'approccio IDDF, l'analisi idrodinamica del reattore è basata sull'assunzione del tempo di residenza idraulico e viene impiegata la curva RTD. In questo caso il reattore è considerato come una scatola nera e uno studio di trasporto di soluto, solitamente una prova di tracciante, è impiegato per analizzare le differenze tra il comportamento del reattore nel suo insieme rispetto al caso ideale. Questo approccio modellistico non fornisce quindi una descrizione locale del reattore, che permetterebbe invece di identificare le regioni responsabili del comportamento non ideale. Al contrario, quando viene impiegato un approccio CFD, sviluppato in un sistema Euleriano, l'idrodinamica del reattore è descritta risolvendo in ogni elemento del dominio computazionale le equazioni di governo del flusso per la determinazione del campo di velocità, permettendo così una descrizione locale dei fenomeni di trasporto di massa; parimenti, una prova di tracciante è necessaria per la calibrazione dei parametri del modello o per la validazione dei risultati delle simulazioni numeriche, quando non siano disponibili o fattibili misure dirette di velocità.

Tuttavia, va sottolineato che questi due approcci mostrano significative differenze anche in termini di tempo di calcolo e potenza computazionale richiesti, così come per la tipologia e l'accuratezza dei dati sperimentali di validazione necessari. È quindi fondamentale definire in anticipo l'obiettivo dell'analisi (prestazioni del processo o adeguamento del reattore) e il livello di complessità del reattore da modellare e dei relativi fenomeni di trasporto. Per quanto riguarda le prestazioni del processo di disinfezione, un approccio convenzionale come l'IDDF è sufficientemente accurato per descrivere in modo adeguato l'idrodinamica del reattore di disinfezione quando si hanno a disposizione dati sperimentali di tracciante affidabili per la calibrazione del modello. Per quanto riguarda invece l'adeguamento di un reattore, solo la CFD può aiutare a individuare zone critiche all'interno del reattore e permettere la valutazione dell'effetto di possibili interventi.

3.2. Cinetiche chimiche

Una volta valutati gli aspetti idrodinamici, il decadimento dell'ipoclorito di sodio, l'inattivazione batterica e la formazione di TTHMs possono essere simulate sia con IDDF che con CFD, e confrontate con i risultati attesi nel caso si assuma

l'ipotesi di reattore FP ideale. Nel caso IDDF, le cinetiche di primo ordine, di Hom e di produzione di TTHMs sono state sviluppate con il modello idrodinamico che meglio descrive la curva RTD sperimentale (CSTR+DFM), in modo da tenere in considerazione le non idealità del reattore. Nel caso della CFD, le medesime cinetiche sono state implementate sul modello di turbolenza individuato quale più efficace e adottando il numero di Schmidt che ha fornito un miglior adattamento ai dati sperimentali ($Sc_T = 10$). La concentrazione delle specie simulate, ovvero decadimento del disinfettante, inattivazione batterica, formazione di TTHMs, è stata calcolata nelle sezioni di monitoraggio in corrispondenza della metà di ogni canale per mezzo delle equazioni (11), (12) o (13) per il più semplice approccio FP ideale, combinando le curve RTD stimate in ogni singola sezione con le equazioni (11), (12) o (13) per l'approccio IDDF, e monitorando la concentrazione mediata sull'intera sezione, attraverso l'inserimento di una superficie di monitoraggio, per il più avanzato approccio CFD.

Per l'approccio IDDF è stato possibile risalire alle curve RTD di ogni singola sezione, ipotizzando costante il rapporto tra V_{CSTR} e V_{DFM} e stimando il numero di dispersione d per ogni sezione secondo l'equazione (4), a partire dal valore precedentemente stimato del coefficiente di dispersione D nella sezione di campionamento.

Nei paragrafi seguenti sono riportati i risultati della simulazione del decadimento del cloro libero, dell'inattivazione batterica e della formazione di TTHMs nelle condizioni medie riportate in Tabella 1. I punti in Figura 4, 6 e 8 si riferiscono alle sezioni di mezzeria dei cinque canali, mentre l'ultimo fa riferimento all'intensità del fenomeno in corrispondenza della sezione di uscita dal reattore.

3.2.1. Decadimento del disinfettante

Il decadimento del cloro libero stimato con i differenti approcci (FP ideale, IDDF e CFD) è mostrato in Figura 4 per le condizioni medie di dosaggio (Tabella 1).

Non si osservano differenze significative tra i tre approcci modellistici e ciò suggerisce che, se l'obiettivo della simulazione è la sola quantificazione del cloro libero residuo in acqua, non è strettamente necessaria un'analisi idrodinamica, ma anche il più semplice approccio FP ideale può essere adeguato allo scopo.

Questo risultato è piuttosto inaspettato per il caso di studio, in quanto l'analisi CFD ha individuato

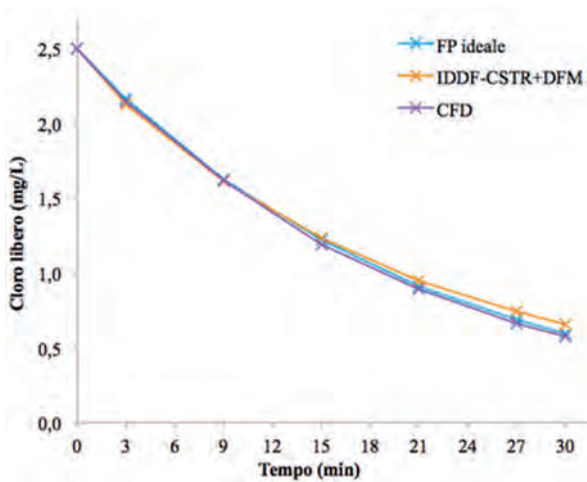


Figura 4 – Valori simulati di decadimento del cloro libero lungo il reattore, stimati con la cinetica di primo ordine utilizzando gli approcci FP ideale, IDDF e CFD, dove il valore al tempo finale corrisponde alla concentrazione di cloro residuo allo scarico

in modo puntuale regioni di non idealità che, determinando una variazione del tempo di residenza rispetto al caso ideale, comportano una variazione (aumento o diminuzione) del tempo a disposizione del disinfettante per decadere e pertanto una distribuzione non uniforme della sua concentrazione, come mostrato dal contour in Figura 5.

Ad esempio, nelle regioni individuate come zone morte o ricircoli (2 e 3) il disinfettante mostra concentrazioni inferiori a quelle attese, mentre in quelle individuate come cortocircuiti (1), dunque come percorsi preferenziali, lo stesso presenta concentrazioni superiori a quelle attese.

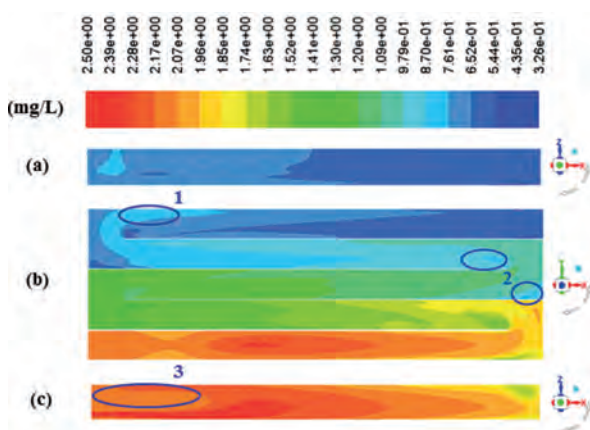


Figura 5 – Distribuzione della concentrazione di disinfettante nel reattore (mg/L): (a) sezione verticale a metà larghezza dell'ultimo canale, (b) sezione orizzontale a metà dell'altezza d'acqua del reattore, (c) sezione verticale a metà larghezza del primo canale, dove è evidenziato l'effetto dovuto a cortocircuiti (1), zone morte (2) e ricircoli (3)

3.2.2. Inattivazione batterica

In Figura 6 sono mostrati i risultati di inattivazione batterica per gli approcci FP ideale, IDDF e CFD, nelle condizioni medie di dosaggio (Tabella 1).

Contrariamente al decadimento del cloro libero, sono stati ottenuti risultati di inattivazione batterica differenti adottando i tre approcci modellistici, e in particolare l'approccio CFD è risultato il più cautelativo. Si può infatti osservare come in generale sia l'approccio FP ideale che quello IDDF conducano a una stima superiore dei valori dei log di inattivazione, che decrescono adottando l'approccio CFD. Ciò potrebbe essere legato al diverso metodo di risoluzione numerica per la predizione dei tempi di residenza nel caso CFD, rispetto agli approcci FP ideale e IDDF. Analizzando però in generale i risultati dell'inattivazione batterica, i tre metodi modellistici mostrano il medesimo andamento, suggerendo quindi che gli approcci FP ideale e IDDF potrebbero sostituire in modo adeguato gli strumenti CFD, nel caso fosse necessaria solo una stima globale delle prestazioni del processo. In Figura 7 è mostrato il contour del livello di inattivazione all'interno del reattore, simulato con l'approccio CFD.

Il contour mostra che, nonostante le non idealità individuate all'interno del reattore, il processo di inattivazione simulato raggiunge comunque il massimo livello di abbattimento già entro la fine del primo canale.

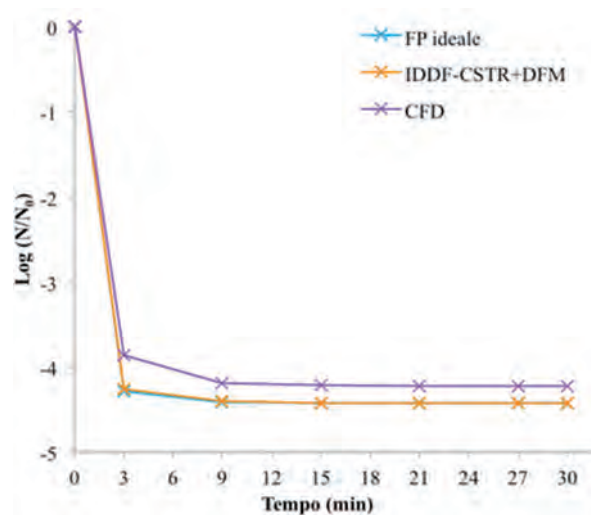


Figura 6 – Valori simulati di inattivazione batterica lungo il reattore, stimati con il modello di Hom integrato con la cinetica di primo ordine utilizzando gli approcci FP ideale, IDDF e CFD, dove il valore al tempo finale corrisponde al livello di inattivazione raggiunto in uscita dal reattore

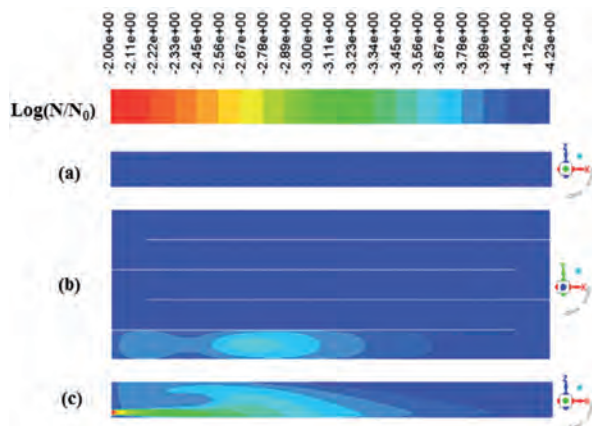


Figura 7 – Distribuzione del livello di inattivazione nel reattore ($\text{Log}(N/N_0)$): (a) sezione verticale a metà larghezza dell'ultimo canale, (b) sezione orizzontale a metà dell'altezza d'acqua del reattore, (c) sezione verticale a metà larghezza del primo canale

3.2.3. Formazione di sottoprodotti

I risultati relativi alla formazione di TTHMs ottenuti con i diversi approcci modellistici implementati (FP ideale, IDDF e CFD), in corrispondenza delle condizioni medie di dosaggio (Tabella 1), sono mostrati in Figura 8.

La stima della formazione di sottoprodotti non mostra marcate differenze tra i tre metodi modellistici implementati. Anche in questo caso gli approcci FP ideale e IDDF potrebbero quindi essere idonei per una valutazione globale della formazione di TTHMs, tenendo sempre conto dei limiti modellistici relativi alla non identificazione puntuale

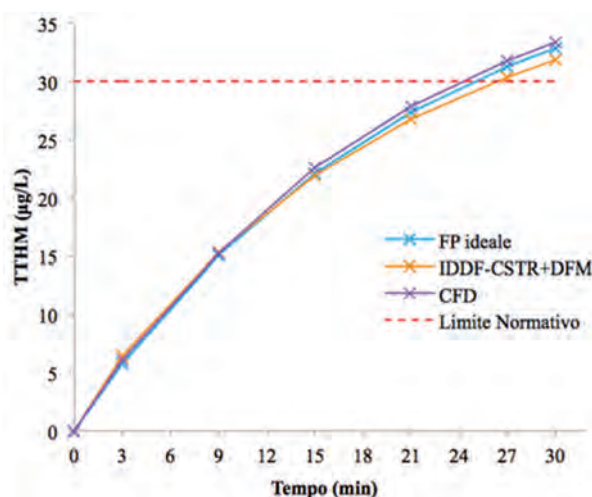


Figura 8 – Valori simulati per la formazione di TTHMs lungo il reattore, stimati con il modello cinetico sviluppato da Sohn et al. (2004) utilizzando gli approcci FP ideale, IDDF e CFD con indicato il limite normativo italiano pari a $30 \mu\text{g/L}$ (D.Lgs 2 febbraio 2001, n. 31)

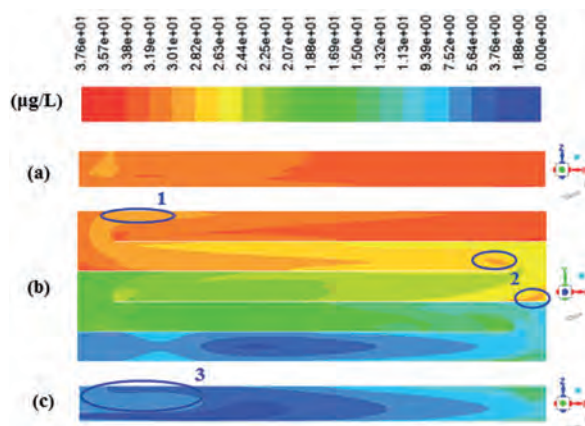


Figura 9 – Distribuzione della concentrazione di TTHMs ($\mu\text{g/L}$): (a) sezione verticale a metà larghezza dell'ultimo canale, (b) sezione orizzontale a metà dell'altezza d'acqua del reattore, (c) sezione verticale a metà larghezza del primo canale, dove è evidenziato l'effetto dovuto a cortocircuiti (1), zone morte (2) e ricircoli (3)

di effetti locali di non idealità. Considerando in generale l'andamento della produzione di sottoprodotti nel tempo, va sottolineato che simulazioni di questo tipo possono rivelarsi uno strumento utile ed efficace per prevedere eventuali sforamenti dei limiti normativi, come mostrato in Figura 8. Nel presente caso di simulazione si può infatti osservare come tutti i metodi modellistici implementati prevedano un superamento della soglia limite imposta dalla normativa italiana negli ultimi minuti del trattamento (24 minuti per l'approccio CFD e 26,3 minuti per l'approccio IDDF). In Figura 9 è riportato il contour della concentrazione di TTHMs nel reattore, simulata con l'approccio CFD.

Nelle regioni in cui il disinfettante ha a disposizione più tempo per entrare in contatto e reagire con la NOM, ovvero in corrispondenza di zone morte e ricircoli (2 e 3), la concentrazione di TTHMs simulata risulta superiore rispetto alle aree adiacenti, mentre nelle regioni di cortocircuito (1) si osserva l'effetto opposto. Tali informazioni risultano di particolare importanza per poter tener conto di un eventuale rilascio di TTHMs dalle zone morte o di ricircolo.

3.3. Analisi di sensitività

L'analisi di sensitività condotta per i modelli IDDF e CFD ha permesso di mettere in luce i parametri che più influenzano la risposta in termini di decadimento del disinfettante, inattivazione batterica e formazione di TTHMs. Sono quindi riportati in Figura 10 i valori dell'indice NSI per i parametri considerati.

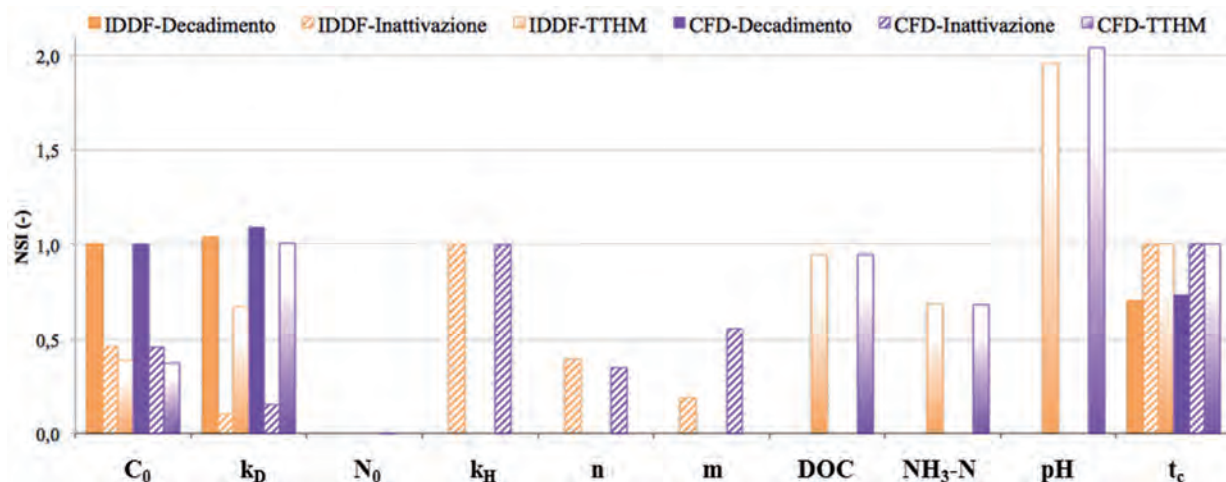


Figura 10 – Valori dell'indice NSI per i parametri coinvolti nei processi di decadimento del disinfettante (C_0 , k_D , t_c), inattivazione batterica (C_0 , k_D , N_0 , k_H , n , m , t_c) e formazione di TTHMs (C_0 , k_D , DOC, NH_3-N , pH, t_c) per i modelli IDDF-CSTR+DFM e CFD

Al fine di mettere in luce i parametri risultati più influenti sui modelli IDDF e CFD, è possibile fare le seguenti considerazioni di carattere generale:

- il decadimento del disinfettante è prevalentemente influenzato dalla dose iniziale di cloro e dalla costante cinetica k_D piuttosto che dal tempo di contatto; il processo di inattivazione non è influenzato dalla variazione del numero di microrganismi in ingresso (in termini di log di inattivazione), mentre risulta particolarmente sensibile sia alla variazione della dose iniziale di cloro che ai parametri cinetici k_H , n e m ;
- la formazione di TTHMs risulta invece fortemente soggetta all'influenza del pH e ciò può essere legato al fatto che all'aumentare della basicità della matrice acquosa l'equilibrio del cloro attivo in soluzione si sposta verso la forma dissociata dello ione ipoclorito (ClO^-), caratterizzato da un forte potere ossidante (MWH, 2012). Un altro fattore particolarmente influente è la concentrazione di DOC, rappresentativa della NOM e quindi della sostanza organica ossidabile. Sebbene in misura minore, anche la costante cinetica k_D e la concentrazione di ammoniaca influenzano la formazione di TTHMs: la prima fornisce infatti un'indicazione circa il decadimento del cloro libero, in parte anche a seguito delle reazioni di formazione dei TTHMs, mentre la seconda dà un'informazione circa l'ammoniaca che potenzialmente può reagire a formare clorammine, disincentivando così la produzione di TTHMs, tipici sottoprodotti del cloro libero;
- il tempo di contatto rientra tra i parametri operativi più influenti, in particolare per l'inattivazione batterica e la formazione di TTHMs. Tuttavia,

va sottolineato che il maggiore contributo è fornito nei primi minuti, probabilmente perché i processi sono stati simulati ipotizzando la sola presenza di cloro libero, caratterizzato da cinetiche di reazione particolarmente veloci.

Per quanto riguarda il confronto tra le risposte dei modelli IDDF e CFD a fronte delle medesime variazioni parametriche, in generale i due approcci mostrano risultati confrontabili. Le uniche differenze apprezzabili si rilevano in corrispondenza di un parametro coinvolto nella cinetica di inattivazione (m) e di uno coinvolto nella formazione di TTHMs (k_D), le cui variazioni risultano più impattanti sull'approccio CFD.

4. CONCLUSIONI

Sulla base dei risultati ottenuti è possibile asserire che gli approcci FP ideale e IDDF possono essere strumenti efficaci per una stima sia dei fenomeni di trasporto e diffusione di tracciante, che del decadimento del cloro libero, delle prestazioni di disinfezione e della formazione di sottoprodotti. Questi modelli, facili da calibrare e in grado di restituire risposte in tempi brevi, possono dunque essere considerati un valido strumento per la valutazione globale delle prestazioni di disinfezione, al pari della CFD che necessita invece di simulazioni più complesse e onerose in termini di tempo e risorse computazionali.

Tuttavia, gli approcci modellistici semplificati forniscono solo una stima globale delle prestazioni del processo, tralasciando qualsiasi dettaglio circa fenomeni locali all'interno del reattore, informazioni che possono invece essere fornite solo attraverso

so lo sviluppo di un'analisi CFD. Quest'ultimo approccio modellistico dovrebbe però essere utilizzato quando la descrizione locale dei fenomeni di interesse diventa un fattore cruciale per ridurre potenziali fonti di non idealità, per migliorare le prestazioni di disinfezione e per la progettazione di eventuali adeguamenti del reattore. Infatti, proprio sulla capacità di individuare tali fonti di non idealità si basa la progettazione efficace di reattori ottimizzati, in grado di migliorare le prestazioni complessive del processo.

Infine, l'analisi di sensitività ha fatto emergere i parametri operativi e cinetici le cui variazioni influenzano maggiormente la risposta dei modelli IDDF e CFD in termini di decadimento, inattivazione e formazione di sottoprodotti. Tale analisi ha fornito indicazioni utili circa il peso che ciascun parametro assume all'interno dello stesso modello (IDDF o CFD) e circa eventuali differenze tra le previsioni delle prestazioni di disinfezione utilizzando i due approcci modellistici, a parità di condizioni di perturbazione.

5. RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- Amy G., Siddiqui M., Ozekin K., Zhu H.-W., Wang C. Empirical based models for predicting chlorination and ozonation byproducts: haloacetic acids, chloral hydrate, and bromate. EPA report CX 819579, 1998.
- Carlson K., Pier D., Bellamy W., Carlson M., Ducoste J., Amy G., Rakness K., (2001) Implementation of The Integrated Disinfection Design Framework. AWWA Research Foundation, American Water Works Association.
- Crittenden J.C., Trussel R.R., Hand D.W., Howe K.J., Tchobanoglous G., Borchardt J.H. (2012) MWH's water treatment. Principles and design. 3rd edition. John Wiley & Sons, Inc.
- Deborde M., & Von Gunten, U. R. S. (2008) Reactions of chlorine with inorganic and organic compounds during water treatment-kinetics and mechanisms: a critical review. Water research, 42(1), 13-51.
- Decreto Legislativo 2 febbraio 2001, n. 31, "Attuazione della direttiva 98/83/CE relativa alla qualità delle acque destinate al consumo umano (G.U 3 Marzo 2001, n. 52)
- Ducoste J., Carlson K., Bellamy W. (2001) The integrated disinfection design framework approach to reactor hydraulics characterization. J. Water SRT – Aqua, 50, 245-261.
- Feben D., Taras M.J., 1951. Studies on chlorine demand constants., Journal Am Water Works Association 43, 922-932.
- ANSYS Fluent 15.0 (2013) Theory Guide.
- González A., Gehr R., Vaca M., López R. (2012) Disinfection of an advanced primary effluent with peracetic acid and ultraviolet combined treatment: a continuous-flow pilot plant study. Water Environ. Res., 84, 247-253.
- Greene D.J., Farouk B., Haas C.N. (2004) CFD design approach for chlorine disinfection processes. AWWA J., 96, 138-150.
- Gualtieri C., 2007. Analysis of the effect of baffles number on a contact tank efficiency with Multiphysics 3.3. In: Proceedings of the COMSOL User Conference 2007, Napoli.
- Haas C.N., & Joffe J. (1994) Disinfection under dynamic conditions: modification of Hom's model for decay. Environmental science & technology, 28(7), 1367-1369.
- Haas C.N., Joffe J., Anmangandla U., Hornberger J.C., Heath M.S., & Glicker J. (1995) Development and validation of rational design methods of disinfection. In Development and validation of rational design methods of disinfection. AWWAR.
- Hamby D.M. (1994) A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models. Environmental monitoring and assessment, 32(2), 135-154.
- Kim D., Stoesser T., Kim J.H. (2013) Modeling aspects of flow and solute transport simulations in water disinfection tanks., Applied Mathematical Modelling 37, 8039-8050.
- Levenspiel O. (1999) Chemical Reaction Engineering. Third edition, John Wiley & Sons.
- Lloyd B.J., Leitner A.R., Vorkas C.A., Gugesarajah R.K. (2003) Under-performance evaluation and rehabilitation strategy for waste stabilization ponds in Mexico. Water Science and Technology 48, 35-43.
- Rauen W.B., Angeloudis A., & Falconer R.A. (2012) Appraisal of chlorine contact tank modelling practices. Water research, 46(18), 5834-5847.
- Rizzo L., Manaia C., Merlin C., Schwartz T., Dagot C., Ploy M.C., Michael I., Fatta-Kassinos D. (2013) Urban wastewater treatment plants as hotspots for antibiotic resistant bacteria and genes spread into the environment: a review. Sci. Total Environ., 447, 345-360.
- Rodríguez-Chueca J., Ormad M.P., Mosteo R., Sarasa J., Ovelheiro, J.L. (2015) Conventional and advanced oxidation processes used in disinfection of treated urban wastewater. Water Environ. Res., 87, 81-88.
- Sedlak D. (2014) Water 4.0. The past, the present and the future of the world's most vital resource. Yale University Press.
- Sohn, J., Amy, G., Cho, J., Lee, Y., & Yoon, Y. (2004) Disinfectant decay and disinfection by-products formation model development: chlorination and ozonation by-products. Water Research, 38(10), 2461-2478.
- Teixeira E.C., Do Nascimento Siqueira R. (2008) Performance assessment of hydraulic efficiency indexes. Journal of Environmental Engineering 134, 851-859.
- Versteeg H.K., Malalasekera W. (2007) An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. 2nd edition. Prentice Hall.
- Zhang J., Tejada-Martinez, Zhang Q. (2014) Developments in computational fluid dynamics-based modeling for disinfection technologies over the last two decades: a review. Environ. Modell. Softw., 58, 71-85.

RINGRAZIAMENTI

La ricerca presentata è parte del progetto DRINKABLE (grant nr. 2014-1285) finanziato da Fondazione CARIPLO. Gli autori ringraziano Eleonora Clerici per il supporto dato nella definizione delle griglie di calcolo.



INGEGNERIA DELL'AMBIENTE

per il 2017 è sostenuta da:

