

# Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti – Anno 2015

## Esercitazione n.2: trasporto di massa in sistema mono-dimensionale (PFR)

### Obiettivo dell'esercitazione

Implementare e utilizzare un modello monodimensionale che risolve l'equazione di trasporto-dispersione-reazione per una specie tracciante.

I casi di riferimento sono due:

- la propagazione di un rilascio impulsivo di tracciante in corrispondenza della sezione di monte del dominio (vedi 1-D Plug Flow Reactor, Elements of chemical reaction engineering, Fogler) che potrebbe rappresentare il rilascio accidentale di sostanze inquinanti lungo un'asta fluviale;
- la propagazione di un fronte di concentrazione in un sistema inizialmente a concentrazione nulla, che potrebbe corrispondere al rilascio continuo di sostanze inquinanti a valle di uno scarico.

Per entrambi questi casi esistono soluzioni analitiche dell'equazione di trasporto-dispersione che possono essere prese come riferimento per valutare la bontà del metodo numerico implementato (errore nella soluzione al variare delle scelte su metodo di discretizzazione e passi griglia). Indicate con  $x$  e  $t$  le coordinate spaziale e temporale, con  $D$  il coefficiente di diffusione/dispersione, con  $u$  la velocità convettiva, con  $M/A$  la massa rilasciata per unità di sezione del sistema e con  $C_0$  la concentrazione dello step, le soluzioni di riferimento definite su dominio infinito sono:

$$C_{pulse}(x, t) = \frac{M/A}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right) \quad (1)$$

per il rilascio impulsivo, e

$$C(x, t)_{step} = C_0 \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4Dt}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4Dt}}\right) \exp\left(\frac{ux}{D}\right) \right] \quad (2)$$

per il rilascio continuo. Nel caso di rilascio impulsivo, poichè la condizione al contorno numerica non coincide con una delta di Dirac, è meglio costruire la soluzione analitica di riferimento come  $C_{pulse}(x, t) = C_{step}(x, t) - C_{step}(x, t+1)$ , sovrapposizione lineare di step positivo e negativo shiftati di un passo temporale.

### Esecuzione

1. Scrivere l'equazione del trasporto in forma adimensionale definendo i parametri che controllano il problema (numero di Peclet e numero di Damkholer);

#### **Risoluzione con Excel**

2. Scrivere l'equazione in forma discreta per risolverla numericamente: implementare su Excel un algoritmo esplicito per il calcolo dell'evoluzione della concentrazione nel dominio monodimensionale utilizzando approssimazione backward, central o forward per la derivata prima, e approssimazione central per la derivata seconda della concentrazione;
3. Utilizzare i criteri di stabilità (vedi articolo "Criteri di stabilità per equazione ADE 1 D" nel materiale didattico) per la scelta del passo spaziale/temporale in modo di garantire l'accuratezza della soluzione numerica;
4. Definire le condizioni al contorno (profilo di concentrazione assegnato alla sezione di ingresso e flusso libero all'uscita) per il problema (considerare le due alternative di gradiente nullo e concentrazione nulla a distanza infinita come possibili alternative di implementazione);
5. Rappresentare graficamente (a) il profilo di concentrazione lungo il tubo ad alcuni istanti diversi e (b) l'evoluzione nel tempo del profilo di concentrazione in alcuni punti lungo il tubo;
- 6\* confrontare la soluzione numerica ottenuta con la soluzione analitica di riferimento; valutare come varia l'errore (risultato del modello numerico rispetto al risultato analitico) al variare dell'ampiezza del passo di integrazione spaziale e temporale;

Utilizzando il foglio sviluppato, è richiesto di valutare l'evoluzione del profilo di concentrazione all'uscita del PFR per diverse condizioni di trasporto convettivo/diffusivo (numero di Peclet). In particolare, si chiede di:

1. calcolare l'evoluzione del profilo all'uscita per diversi valori di Peclet (0.5, 5, 50, 500, 5000);
  2. discutere la scelta del modello di risoluzione adottato in base a criteri di efficienza numerica/costo computazionale;
  3. confrontare come si modifica il profilo di concentrazione nel caso in cui sia presente anche la reazione chimica ( $-Da = 0.1, 1, 10, 100$ ) sia nel caso di  $Pe = 0.5$  che  $Pe = 5$ .
- \* Come si modifica la soluzione se invece di un impulso in ingresso si considera un gradino di concentrazione?
- \* Ci sono casi in cui la scelta dei parametri numerici produce soluzioni "non fisiche"? (Evidenziare e discutere).

#### Note per l'implementazione

1. Per il punto 4 Implementazione numerica della condizione di concentrazione nulla a distanza infinita, tenere conto che, in funzione del tempo massimo a cui si vuole valutare la soluzione, si può valutare conservativamente la necessaria estensione del dominio calcolando il valore di  $x$  per cui il numero di Fourier è pari a 1 al tempo desiderato e raddoppiando la  $x$ .
2. Quando si considera il termine di reazione, l'algoritmo di avanzamento numerico della soluzione  $C(i, n+1) = A_0C(i-1, n) + A_1C(i, n) + A_2C(i+1, n)$  risulta modificato nel termine centrale  $A_1$  di una quantità che dipende dal numero di Damkohler e dal passo temporale della griglia.
3. Per il confronto tra soluzione numerica e soluzione analitica nel caso dell'impulso, considerato che per via della discretizzazione numerica la condizione al contorno (1,0,0,...) introduce quantità in massa diverse al variare del passo di integrazione  $dt$ , riscalarne la soluzione dello step in modo corrispondente. In questo modo si può garantire la congruenza tra la massa di specie  $C$  introdotta dalla condizione iniziale e al contorno con quella che la soluzione analitica propaga nel dominio di calcolo.

#### **Risoluzione con Matlab**

4. Utilizzare il tool pdepe per risolvere l'equazione ADRE in forma adimensionalizzata:
  - (a) Identificare la struttura della equazione alle derivate parziali da risolvere (funzione flusso,  $f$ , funzione sorgente,  $s$  e funzione pre-moltiplicatrice della derivata temporale,  $g$ ); identificare le funzioni  $p$  e  $q$  per implementare le condizioni al contorno di concentrazione imposta a monte e gradiente nullo a valle;
  - (b) Definire i parametri adimensionali,  $Pe$ , e  $Da$ , e la griglia spaziale e temporale;
  - (c) Estrarre la soluzione lungo il dominio spaziale ad una serie di istanti diversi per visualizzare la propagazione del gradino di concentrazione imposto a  $x=0$  a  $t=0$ .
  - (d) Estrarre la soluzione a  $x = 1$  al variare di  $t$  per confrontare la forma che assume al variare del numero di  $Pe$  in assenza ( $Da=0$ ) e in presenza di reazione chimica ( $Da \neq 0$ ).
  - (e) Confrontare la soluzione fornita da Matlab con quella numerica ( $C_{step}$ );