

Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti – Anno 2016

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 o il rilascio accidentale e il trasporto di sostanze inquinanti attraverso strati verticali di terreno;
- 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 o all'interno di strati verticali di terreno.

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). Indicare 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

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

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. Il principio di sovrapposibilità degli effetti è applicabile fintantochè l'equazione di trasporto risulta essere lineare nella concentrazione (cinetiche di trasformazione fino al primo ordine).

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 eventualmente le due alternative di (i) gradiente nullo alla sezione di chiusura del dominio e (ii) concentrazione nulla a distanza infinita come possibili alternative di implementazione);

5. Rappresentare graficamente (a) il profilo di concentrazione lungo il dominio 1 D ad alcuni istanti diversi e (b) l'evoluzione nel tempo del profilo di concentrazione in alcuni punti lungo il dominio 1 D;
- 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, raddoppiando quindi la x ricavata.
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 , riscaldare 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});