Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti — Anno 2016
Esercitazione n.2: risoluzione dell'equazione ADE con implementazione della funzione pdepe in Matlab

<u>Equazione da risolvere</u>

L'equazione da risolvere con Matlab è data da:

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}^2C}{\mathrm{d}x^2} + Da \cdot C \tag{1}$$

dove C, x e t sono concentrazione, coordinata spaziale e coordinata temporale adimensionalizzate e Pe e Da sono i numeri adimensionali di Peclet e Damkholer. Si cerca la soluzione dell'equazione nel dominio computazionale $x = [0 : 1]$ nel periodo temporale $t = [0 : 1]$ a partire da condizioni di concentrazione ovunque nulla a fronte di un aumento a gradino (da 0 a 1) della concentrazione in corrispondenza della sezione di ingresso ($x = 0$). La condizione al contorno di valle ($x = 1$) è flusso nullo ($\mathrm{d}C/\mathrm{d}x\ |_x = 1 = 0$).

<u>Funzione Matlab "pdepe"</u>

La funzione disponibile in Matlab per risolvere equazioni differenziali allederivate parziali è "pdepe" che fornisce la soluzione numerica di equazioni differenziali la cui forma generale è :

$$g(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) \cdot \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = +x^{-m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^m \cdot f(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x})\right] + s(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) \tag{2}$$

dove m è un numero che identifica la geometria del problema (0 per problema piano, 1 per simmetria cilindrica e 2 per simmetria sferica) g, f ed s sono funzioni che rappresentano rispettivamente un termine pre-moltiplicativo della derivata temporale, il termine di flusso e il termine di sorgente dell'equazione generale, esprimibili a mezzo delle coordinate spaziale e temporale, della concentrazione C, e del suo gradiente spaziale $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$. Per scrivere l'equazione che ci interessa risolvere nella forma prevista dall'equazione generale, è necessario definire opportunamente le funzioni g, f ed s. Considerato che l'equazione differenziale da risolvere può essere riscritta come:

$$1 \cdot \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[-C + \frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}\right] + Da \cdot C \quad \text{alternativa 1} \tag{3}$$

oppure come

$$1 \cdot \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}\right] + \left[-\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} + Da \cdot C\right] \quad \text{alternativa 2} \tag{4}$$

le funzioni g, f e s risultano essere:

- Alternativa 1: $g(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = 1.$, $f(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = -C + \frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}$, $s(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = Da \cdot C$,
- Alternativa 2: $g(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = 1.$, $f(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = \frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}$, $s(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = -\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} + Da \cdot C$,

Le condizioni al contorno utilizzate dalla funzione "pdepe" devono essere espresse nella forma generale:

$$p(x,t,C) + q(x,t) \cdot f(x,t,C,\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}) = 0 \tag{5}$$

dove la funzione f è il termine di flusso già definito mentre il valore delle funzioni p e q deve essere specificato opportunamente in corrispondenza del limite sinistro/inferiore xL e destro/superiore xR del dominio computazionale in modo da rappresentare le condizioni al contorno con cui si vuole risolvere l'equazione di partenza. Considerato che, per l'estremo inferiore del dominio xL si vuole avere un valore di concentrazione fissata, C_0:

$$C(xL) - C_0 = 0 \tag{6}$$

mentre per l'estremo inferiore si vuole imporre gradiente nullo:

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x}(x = xR) = 0 \tag{7}$$

le funzioni p e q vanno definite come segue:

- Alternativa 1: $p(x = xL, t, C) = C(xL) - C_0$, $q(x = xL, t) = 0.$; $p(x = xR, t, C) = 0.$, $q(x = xR, t) = 1.$;
- Alternativa 2: $p(x = xL, t, C) = C(xL) - C_0$, $q(x = xL, t) = 0.$; $p(x = xR, t, C) = C(xR)$, $q(x = xR, t) = 1.$;

Implementazione programma di calcolo in Matlab

Il programma in Matlab sarà costituito da uno *script* principale e da alcune *function* ausiliarie. Lo script principale (main.m) deve contenere la definizione dei domini spaziali e temporali, la chiamata alla funzione "pdepe" che risolve l'equazione alle derivate parziali di forma generalizzata e una parte per la visualizzazione dei risultati. Le funzioni ausiliarie serviranno a specificare la definizione delle varie funzioni richiamate da "pdepe" che consentono di particolarizzare l'equazione generale (funzioni f, g e s) secondo l'equazione che si vuole risolvere, definire le condizioni iniziali del sistema (C_0) e particolarizzare le condizioni al contorno ($p(xL)$, $q(xL)$, $p(xR)$ e $q(xR)$) secondo quelle scelte per il problema.

Scrittura script (main.m)

Dal menù New script, aprire la finestra per l'editing dello script. Il simbolo % permette di inserire linee che non vengono eseguite da Matlab e possono quindi servire a descrivere il contenuto delle diverse parti di codice (commenti o descrizione delle variabili usate). Il ; dopo la definizione di variabili serve per non fare restituire a schermo il risultato dell'assegnazione

% script main.m
% programma per risolvere l'equazione di Advection Diffusion Reaction in dominio piano utilizzando
% funzione pdepe di Matlab
% opzioni per la definizione del dominio spaziale: vettore riga x da 0 a 1,
% con un cento numero di punti intermedi
% opzione 1: lista di valori fissati:
x= [0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.];
% opzione 2: assegnazione di valori tra due estremi con passo fissato:
x= 0:0.2:1.; % da 0 a 1 con passo fisso 0.2
% opzione 3: assegnazione dei valori tra de estremi con numero di punti fissato:
nx =6;
xmin=0.;
xmax=1.;
x= linspace(xmin,xmax,nx); % da xmin a xmax con nx punti, passo $\Delta x = (xmax - xmin)/nx$
% le opzioni sono equivalenti in termini di effetto sulla definizione del vettore riga x
% definizione del dominio temporale: vettore riga t da 0 a 1, con un cento numero di punti
nt =60;
tmin=0.;
tmax=1.;
t=linspace(tmin,tmax,nt);
% particolarizzazione delle funzione pdepe
% identificazione della geometria di riferimento (m)
m=0;
% chiamata alla funzione pdepe
C=pdepe(m,pdefun,icfun,bcfun,x,t)
% in C, matrice di nx colonne e nt righe, vengono immagazzinati i valori di concentrazione
% soluzione dell'equazione differenziale valutata nei punti griglia discreti
% plottaggio dei risultati a due istanti diversi t1=5 e t2=20 lungo il dominio
% nella figura (1)
figure(1)
% intestazione assi x e y
xlabel ('x')
ylabel('concentrazione')
% estensione degli assi x e y, axis(xmin,xmax,ymin,ymax)
axis (0,1,0,1) % legenda delle curve
legend('t=5','t=20') plot(x,C(5,:),'-r',x,C(20,:),'-og')

```
% C(5,:) identifica la quinta riga della matrice (i valori di concentrazione nel dominio a quell'istante temporale)
% -r = con linea continua rossa, -og = con linea continua con simbolo cerchio verde
% plottaggio dei risultati a due distanze diverse x1=0.5 e x2=1.0 lungo il dominio
% nella figura (2)
figure(2)
% intestazione assi x e y
xlabel ('tempo')
ylabel('concentrazione')
% estensione degli assi x e y, axis(xmin,xmax,ymin,ymax)
axis (0,1,0,1) % legenda delle curve
legend('x=0.5','x=1.0') plot(t,C(:,0.5),'-r',t,C(:,1.0),'-og')
```

Scrittura funzioni utilizzate per particolarizzare pdepe

Dal menù New function, aprire la finestra per l'editing della funzione. Il firmato predefinito è :

```
function[output_args]=Untitled[input_args]
% descrizione della funzione
end
```

dove nella parentesi a sinistra vanno elencati i valori definiti dalla funzione, nella parentesi a destra i valori di ingresso alla funzione e Untitled va sostituito con il nome della funzione.

```
function[f,g,s] = pdefun[x,t,C,DCDx]
% definizione termini premoltiplicativo, flusso e sorgente per l'equazione ADE
% assegnazione valore numeri adimensionali di Pe e Da
Pe=0.5;
Da=0.; % caso senza reazione
% funzioni secondo opzione 2
g=1.;
f=1./Pe*DCDx; % DCDx è il gradiente della soluzione
s= -DCDx+Da*C
end

function[C0] = icfun[x]
% definizione condizione iniziale per l'equazione ADE
% assegnazione valore nullo a intero dominio
C0=0.;
end

function[pl,ql,pr,qr] = bcfun[xl,Cl,xr,Cr,t]
% definizione condizioni al contorno l=monte, r=valle, per l'equazione ADE
% funzioni p e q secondo opzione 2
pl=Cl-1.;
ql= 0.;
pr=Cr;
qr=1.;
end
```