Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti – Anno 2018
Esercitazione n.3: 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 (Pulse release) in corrispondenza della sezione di monte del dominio (vedi 1-D Plug Flow Reactor, Elements of chemical reaction engineering, Fogler). Questa condizione 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 (Step release) in un sistema inizialmente a concentrazione nulla. Questa condizione potrebbe corrispondere al rilascio continuo di sostanze inquinanti a valle di uno scarico o la percolazione di inquinante attraverso strati 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). Indicate con x e t le coordinate spaziale e temporale, con K_x 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:

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

per il rilascio impulsivo, e

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

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 sovrapponibilità degli effetti è applicabile fintantoché l'equazione di trasporto risulta essere lineare nella concentrazione (cinetiche di trasformazione fino al primo ordine).

Esecuzione

1. Scrivere l'equazione tridimensionale del trasporto identificando le ipotesi alla base del problema in esame e le relative semplificazioni possibili;

2. Discretizzare le derivate spaziali e temporali come rapporti incrementali; ricavare una espressione esplicita per aggiornare il valore della concentrazione nel tempo ($C(ix, it+1) = A_0 \cdot C(ix-1, it) + A_1 \cdot C(ix, it) + A_2 \cdot C(ix+1, it)$); definire i coefficienti dello schema esplicito (A_0, A_1, A_2) per i diversi tipi di discretizzazione (backward, central e forward) utilizzabili per il termine convettivo esprimendoli in funzione di parametri adimensionali (numero di Courant, $Cr = U \cdot dt/dx$, numero di Peclet di griglia, $Pe_g = u \cdot dx/K_x$ e l'inverso del numero di Fourier, $\lambda = Cr/Pe_g = K_x dt/dx^2$);,

3. Utilizzare le relazioni riportate nell'articolo "Stability Criterion for Explicit Schemes (Finite-Difference Method) on the Solution of the Advection-Diffusion Equation" di L.F. Leon, P.M. Austria fornito come materiale didattico per selezionare la discretizzazione temporale in funzione della natura del problema (prevalente dispersione/convezione) e della discretizzazione spaziale scelta in modo da ottenere un algoritmo risolutivo convergente (soluzione non oscillante, limitata);

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 definizioni alternative di flusso nullo ottenibili come (i) gradiente nullo alla sezione di chiusura del dominio e (ii) flusso globale (convettivo e diffusivo) nullo alla sezione di chiusura del dominio);
5. Implementare in Octave il metodo esplicito con scelta del passo temporale in funzione delle tipologie di discretizzazione (backward, central o forward) utilizzabili;
6. Confrontare la soluzione numerica con la soluzione analitica (per il rilascio istantaneo, valutare sia il confronto con l'equazione 1 che con la soluzione ottenibile dall'equazione 2 sommando il contributo di step positivo e negativo shiftati di un passo temporale);
7. Valutare come cambia la forma della soluzione al variare di u e K_x;
8. Introdurre l'effetto della reazione, modificando il coefficiente A_1 dello schema numerico; confrontare la soluzione nel caso di reazione assente/attiva;
9. Scrivere l'equazione del trasporto in forma adimensionale definendo i parametri che controllano il problema (numero di Peclet, Pe, e numero di Damkholer, Da);
10. Modificare il programma in Octave in modo da avere uno schema numerico che risolva il problema in forma adimensionale;
11. 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;
12. Confrontare la soluzione numerica ottenuta con la soluzione analitica di riferimento opportunamente adimensionalizzata;

Utilizzando il foglio sviluppato, è richiesto di valutare l'evoluzione del profilo di concentrazione all'uscita del PFR per diverse condizioni di trasporto convettivo/dispersivo (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 ($Da = 0.001$, 0.01, 0.1) sia nel caso di $Pe = 0.5$ che $Pe = 5$.