

# Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti – Anno 2014

## 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:

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

per il rilascio impulsivo, e

$$C(x, t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4Dt}}\right) \text{ per } x-ut > 0 \quad (2)$$

$$C(x, t) = C_0 \text{ per } x-ut < 0 \quad (3)$$

per il rilascio continuo.

### Esecuzione

1. Scrivere l'equazione del trasporto in forma adimensionale definendo i parametri che controllano il problema (numero di Peclet e numero di Damkohler);
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 non accumulo 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 non accumulo, tenere conto che, poiché la condizione di non accumulo comporta la conservazione locale del lavoro di concentrazione ( $C/\tau = 0$ ), questa condizione va applicata ad una cella ghost al di fuori del dominio di calcolo. Servono quindi 2 celle ghost a valle del dominio di calcolo per l'implementazione: nella prima, la concentrazione calcolata con l'algoritmo utilizzato all'interno del dominio di calcolo deve risultare sempre nulla; nella seconda va implementata la condizione di non accumulo che permette di ottenere un valore di derivata variabile in corrispondenza dell'uscita fisica del dominio.
2. Quando si considera il termine di reazione, l'algoritmo di avanzamento numerico della soluzione  $C(i, n+1) = A_0 C(i-1, n) + A_1 C(i, n) + A_2 C(i+1, n)$  risulta modificato nel termine centrale  $A_1$  di una quantità che dipende dal numero di Damkholer 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  $(0, 1, 0, 0, \dots)$  non rappresenta al meglio l'impulso, utilizzare per  $C(x \simeq 0, t)$  (condizione al contorno di monte) e per  $C(x, t \simeq 0)$  (condizione iniziale, i valori calcolati con l'equazione 1. 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.