

Corso di Dinamica e Modellistica degli Inquinanti – Anno 2019 Esercitazione n.2.1: trasporto di massa in sistema mono-dimensionale (PFR)

I. OBIETTIVO DELL'ESERCITAZIONE

- A. 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 i casi esistono soluzioni analitiche dell'equazione di trasporto-dispersione che possono essere utilizzate per valutare la bontà del metodo numerico implementato, ovvero lo scostamento tra soluzione numerica e soluzione analitica in funzione della scelta del metodo di discretizzazione e dell'ampiezza dei passi di integrazione.
- B. Valutare come cambia la forma della soluzione in condizioni di prevalente trasporto convettivo o diffusivo/dispersivo.
- C. Valutare l'effetto della reazione.

II. DESCRIZIONE

L'equazione del trasporto che descrive il problema del rilascio di un inquinante in un dominio monodimensionale come un fiume si può ottenere semplificando l'equazione tridimensionale del trasporto avendo assunto x allineato nella direzione principale del flusso ($(u, v, w) = (u, 0, 0)$), y verticale e z trasversale. Indicare con t la coordinata temporale, con K_x il coefficiente di diffusione/dispersione, con u la velocità convettiva in direzione x , ipotizzando di voler valutare la concentrazione dell'inquinante mediata sulla sezione, l'equazione del trasporto si riduce a:

$$\frac{dC}{dt} + u \frac{dC}{dx} = K_x \frac{d^2C}{dx^2} + \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1)$$

dove l'ultimo termine tiene conto della reazione, $\partial C/\partial t = KC$, per esempio descritta da una cinetica del primo ordine. La soluzione dell'equazione è definita per $x = [0 : L]$ e $t = [0 : t_{max}]$. L'equazione del trasporto è del primo ordine in t e del secondo ordine in x e risulta lineare in C (anche in presenza del termine di reazione, per cinetiche fino al primo ordine). Le possibili scale dei tempi rispetto alle quali valutare il trasporto sono date dalla scala convettiva e diffusiva, rispettivamente date da:

$$t_{conv} = \frac{L}{u} \text{ e } t_{diff} = \frac{L^2}{K_x} \quad (2)$$

Per risolvere l'equazione bisogna conoscere il valore iniziale di concentrazione (condizione iniziale) e definire due condizioni al contorno da applicare ai confini del dominio. A partire da un campo di concentrazione inizialmente nullo ovunque, la condizione al contorno di monte ($x = 0$) corrispondente al caso di un rilascio impulsivo o continuo è data da

$$C(0, t) = \delta(t)\delta(x)M/AL \text{ per rilascio impulsivo} \quad (3)$$

dove δ è la Delta di Dirac, e M/A è la massa rilasciata per unità di sezione del sistema, $[kg/m^2]$, $M/AL = C_{mix}$, kg/m^3m è la concentrazione di perfetto mescolamento, e

$$C(0, t) = C_0 \text{ per rilascio continuo} \quad (4)$$

dove C_0 rappresenta la concentrazione del rilascio continuo, $[kg/m^3]$. La condizione al contorno di valle può essere scritta come:

$$\frac{dC}{dx} \Big|_{L=0} \text{ C.C. di Neuman, flusso diffusivo nullo} \quad (5)$$

oppure

$$\frac{dC}{dx} \Big|_L + a \cdot uC(L) = 0 \text{ C.C. di Robin, non accumulo} \quad (6)$$

Entrambe le condizioni permettono di propagare a valle un profilo di concentrazione. Il primo, determinando un gradiente nullo del profilo all'uscita, rende il profilo di concentrazione all'uscita "piatto". Il secondo, con $a = 0.5$, propaga in modo quasi indeformato il profilo di concentrazione proveniente da monte attraverso la sezione di valle.

III. SOLUZIONI ANALITICHE DI RIFERIMENTO

Le soluzioni di riferimento definite su dominio continuo sono:

$$C_{pulse}(x, t) = \frac{M/A}{\sqrt{4\pi K_x t}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4K_x t}\right) \quad (7)$$

per il rilascio impulsivo e

$$C_{step}(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4K_x t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4K_x t}}\right) \exp\left(\frac{ux}{K_x}\right) \right] \quad (8)$$

per il rilascio continuo. La soluzione di riferimento per rilascio impulsivo presuppone l'immissione di una massa M nel dominio di calcolo in modo concentrato ed istantaneo. La soluzione di riferimento per rilascio continuo presuppone il mantenimento di un valore di concentrazione costante nella sezione di monte.

IV. ADIMENSIONALIZZAZIONE DELL'EQUAZIONE DI TRASPORTO

Per adimensionalizzare l'equazione consideriamo come grandezze di riferimento la lunghezza L del dominio per la coordinata spaziale x e il tempo di trasporto convettivo $t_{conv} = L/u$ per la coordinata temporale t . Per adimensionalizzare la concentrazione della specie possiamo prendere come valore di riferimento quella di perfetto mescolamento, $C_{ref} = C_{mix}$, oppure quella all'ingresso, $C_{ref} = C_0$. La scelta viene fatta in base al tipo di problema da risolvere (rilascio impulsivo o continuo). Sostituendo alle variabili dell'Equazione 1 la loro versione adimensionale si ottiene:

$$\frac{C_{ref} \cdot u}{L} \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{t}} + u \frac{C_{ref}}{L} \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}} = K_x \frac{C_{ref}}{L^2} \frac{d^2\tilde{C}}{d\tilde{x}^2} + kC_{ref}\tilde{C} \quad (9)$$

e dividendo per $C_{ref}u/L$ si ottiene:

$$\frac{d\tilde{C}}{d\tilde{t}} + \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}} = K_x \frac{K_x L}{uL^2} \frac{d^2\tilde{C}}{d\tilde{x}^2} = \frac{1}{Pe} \frac{d^2\tilde{C}}{d\tilde{x}^2} + Da\tilde{C} \quad (10)$$

Il gruppo adimensionale $Pe = uL/K_x$ è detto numero di Peclet. Il suo valore esprime il rapporto tra la velocità del trasporto convettivo e diffusivo: se $Pe \gg 1$ il trasporto convettivo è prevalente rispetto a quello diffusivo, se $Pe < 1$ il trasporto prevalente è diffusivo/dispersivo. Il gruppo adimensionale $Da = kL/u$ è detto numero di Damkohler. Il suo valore esprime il rapporto tra la velocità della reazione e la velocità di trasporto convettivo. In assenza di reazione, $Da = 0$; per reazione che riduce la massa della specie inquinante nel sistema, $Da < 0$.

Usando le stesse quantità di riferimento è possibile riscrivere in forma adimensionale anche le soluzioni analitiche dell'equazione del trasporto disponibili per rilascio impulsivo e continuo, che diventano:

$$\tilde{C}_{pulse}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \sqrt{\frac{Pe}{4\pi\tilde{t}}} \exp\left(-\frac{Pe(\tilde{x}-\tilde{t})^2}{4\tilde{t}}\right) \quad (11)$$

per il rilascio impulsivo e

$$\tilde{C}_{step}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{Pe}{4\tilde{t}}} (\tilde{x} - \tilde{t}) \right) + \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{Pe}{4\tilde{t}}} (\tilde{x} + \tilde{t}) \right) \exp(Pe\tilde{x}) \right] \quad (12)$$

per il rilascio continuo. Al variare del numero di Pe cambia la forma della soluzione dell'equazione. Per $Pe \gg 1$, il profilo usato come condizione al contorno di monte viene propagato quasi rigidamente lungo il dominio fino alla sezione di uscita. Per Pe inferiori, a questa traslazione (effetto del trasporto convettivo), si sovrappone una progressiva erosione dei gradienti di concentrazione (smussamento del profilo) dovuto alla diffusione/dispersione. In presenza di reazione, $Da < 0$, si sovrappone un ulteriore effetto di progressiva riduzione della massa presente all'interno del sistema (riduzione del valore locale di concentrazione in ogni punto del dominio, proporzionale al tempo di residenza).

V. DISCRETIZZAZIONE DELL'EQUAZIONE DEL TRASPORTO

La risoluzione numerica dell'equazione è ottenuta per un numero discreto di punti del dominio spaziale e temporale. La versione discreta dell'equazione si ottiene sostituendo alle derivate spaziali e temporali la loro approssimazione alle differenze finite, ottenute come rapporto incrementale dei valori discreti. Indicate con l'indice i le posizioni discrete nello spazio $x_i, i = 1, N_x$ e con l'indice n i livelli discreti nel tempo $t_n, n = 1, N_t$, e con Δx e Δt gli incrementi della posizione e del tempo, la derivata nel tempo viene approssimata come:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C(i, n+1) - C(i, n)}{\Delta t} \quad (13)$$

mentre la derivata nello spazio può essere approssimata come:

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C(i+1, n) - C(i, n)}{\Delta x} \text{ approssimazione Forward} \quad (14)$$

oppure

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C(i+1, n) - C(i-1, n)}{2\Delta x} \text{ approssimazione Central} \quad (15)$$

oppure

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C(i, n) - C(i-1, n)}{\Delta x} \text{ approssimazione Backward} \quad (16)$$

Per la derivata seconda si usa:

$$\frac{d^2C}{dx^2} = \frac{C(i+1, n) - 2C(i, n) + C(i-1, n)}{\Delta x^2} \text{ approssimazione Central} \quad (17)$$

La valutazione delle derivate spaziali al livello temporale n e la valutazione della sola derivata temporale al livello $n+1$ permette di trasformare l'equazione differenziale in una equazione algebrica che può essere risolta in modo esplicito. La forma dell'equazione è :

$$C(i, n+1) = A_0 C(i-1, n) + A_1 C(i, n) + A_2 C(i+1, n) \quad (18)$$

dove l'espressione dei coefficienti A_0, A_1 e A_2 dipende dalla scelta dello schema di discretizzazione, come riassunto in Tabella I. Per lo schema Forward si ottiene:

$$A_0 = \frac{\Delta t K_x}{\Delta x^2} ; \quad A_1 = 1 + \frac{u\Delta x}{\Delta t} - 2 \frac{\Delta t K_x}{\Delta x^2} ; \quad A_2 = -\frac{u\Delta x}{\Delta t} + \frac{\Delta t K_x}{\Delta x^2} \quad (19)$$

I due gruppi adimensionali che compaiono nei coefficienti sono il numero di Courant, $Cr = u\Delta x/\Delta t$ e l'inverso del numero di Fourier, $\lambda = \Delta t K_x/\Delta x^2$. In termini di gruppi adimensionali, i coefficienti risultano:

$$A_0 = \lambda ; \quad A_1 = 1 + Cr - 2\lambda ; \quad A_2 = -Cr + \lambda \quad (20)$$

Gli stessi gruppi compaiono anche nelle espressioni ottenibili con gli altri schemi di discretizzazione, come riassunto in Tabella I.

Il rapporto $Cr/\lambda = u\Delta x/K_x$ ha la stessa forma del numero di Peclet già definito ma a differenza di questo dipende dalla discretizzazione del dominio Δx , per cui viene indicato come Pe_g numero di Peclet di griglia, con $Pe_g = Pe/N_x$.

Schema	A_0	A_1	A_2	G	Applicabilità
Backward	$\lambda + Cr$	$1 - Cr - 2\lambda$	λ	1	$Pe_g > 0$
Central	$\lambda + Cr/2$	$1 - 2\lambda$	$-Cr/2 + \lambda$	0	$Pe_g < 2$
Forward	λ	$1 + Cr - 2\lambda$	$-Cr + \lambda$	-1	$Pe_g < 1$

TABLE I: Coefficienti e intervallo di applicabilità algoritmo numerico.

VI. SELEZIONE DEL PASSO DI DISCRETIZZAZIONE SPAZIALE E TEMPORALE

Riscrivere l'equazione alle derivate continue in termini di differenze finite comporta

- l'espansione in serie di Taylor delle derivate;
- l'eliminazione di termini di ordine superiore al primo.

L'equazione alle differenze finite è quindi una versione troncata dell'equazione originaria, e la soluzione numerica è una approssimazione della soluzione continua. La bontà dell'approssimazione è valutabile secondo diversi aspetti:

- consistenza: uno schema numerico è consistente se al tendere a zero delle ampiezze dei passi di discretizzazione spaziale e temporale l'errore di troncamento tende a zero e l'equazione approssimata corrisponde all'equazione di partenza;
- convergenza: uno schema numerico è convergente se al tendere a zero delle ampiezze dei passi di discretizzazione spaziale e temporale la soluzione dell'equazione approssimata corrisponde alla soluzione dell'equazione di partenza;
- stabilità : uno schema numerico è stabile se non amplifica l'errore numerico con l'avanzamento del calcolo.

La scelta dello schema con cui approssimare le derivate e la scelta dei passi di discretizzazione spaziale e temporale non possono essere fatte in modo indipendente se si vuole garantire la stabilità della soluzione numerica ottenibile con un algoritmo di tipo esplicito. Se il trasporto è dominato dalla convezione, per avere un algoritmo stabile deve risultare $Cr < 1$. Se invece il trasporto è dominato dalla diffusione/dispersione, per avere un algoritmo stabile deve risultare $\lambda < 0.5$. Questi criteri possono essere condensati in un valore limite per il numero di Courant espresso in funzione del Pelet griglia dato da:

$$Cr_{lim} = \frac{Pe_g}{2 + GPe_g} \quad (21)$$

La costante G assume un valore diverso in funzione dello schema di discretizzazione applicabile, che dipende dal valore del numero di Pelet di griglia, come riassunto nelle ultime due colonne della Tabella I.

VII. RILASCIO IMPULSIVO E CONFRONTO CON SOLUZIONE ANALITICA

La soluzione analitica valida per il rilascio impulsivo presuppone una concentrazione infinita a $x = 0$ a $t = 0$ (impulso di Dirac). Nell'implementazione numerica, la condizione al contorno viene applicata fissando un valore di concentrazione finito ($M/A \cdot dx$) nella sezione di monte a $t = 0$. Il valore finito di concentrazione adottato al punto di rilascio, unito alla possibilità che non tutta massa introdotta all'istante iniziale rimanga all'interno del dominio di calcolo (se la massa è immessa dalla sezione di monte, in parte può muoversi contro-corrente per diffusione, non entrando di fatto nel dominio) fanno sì che la soluzione numerica e analitica ottenute simulando un rilascio impulsivo possano risultare sostanzialmente diverse tra di loro. Se il rilascio impulsivo è fatto all'interno del dominio, in modo che tutta la massa sia a $t = 0$ presente all'interno del dominio di calcolo, la soluzione numerica e analitica sono confrontabili. Se il rilascio impulsivo è fatto in corrispondenza della sezione di monte, per ricavare una soluzione analitica che possa essere confrontabile con la soluzione numerica si può costruire una soluzione analitica alternativa a partire da quella valida per il rilascio continuo. L'impulso di concentrazione finita è infatti assimilabile alla sovrapposizione lineare di due step di concentrazione, uno positivo e uno negativo, ritardati di un tempo Δt uno rispetto all'altro. Essendo l'equazione del trasporto lineare, vale il principio di sovrapposizione degli effetti e la soluzione analitica per l'impulso di concentrazione finita può essere calcolato come sovrapposizione lineare della soluzione dello step positivo immesso a $t = 0$ e uno step negativo di pari concentrazione immesso a $t = \Delta t$. Indicata con $C_{step}(x, t)$ la soluzione dello

step positivo, quella dello step negativo ritardato è data da $-C_{step}(x, t - \Delta t)$ e la soluzione analitica di confronto è $C_{pulse, finito} = C_{step}(x, t) - C_{step}(x, t - \Delta t)$.

Se si simula un rilascio impulsivo in corrispondenza della sezione di monte, la soluzione numerica risulterà confrontabile con la soluzione analitica ottenuta dalla sovrapposizione degli step positivo e negativo. Se si simula un rilascio impulsivo in un punto collocato all'interno del dominio, la soluzione numerica risulterà confrontabile con la soluzione analitica valida per il rilascio impulsivo. Se si simula l'ingresso da monte di un profilo di concentrazione che corrisponde alla soluzione analitica valutata a $x = 0$, la soluzione numerica risulterà confrontabile con la soluzione analitica valida per il rilascio impulsivo.

VIII. FORMULAZIONE ALTERNATIVA PER LA CONDIZIONE AL CONTORNO DI VALLE

La condizione di gradiente nullo impone un profilo di concentrazione orizzontale (a derivata nulla) nella sezione di valle. Questo determina una deformazione della soluzione numerica rispetto alle soluzioni analitiche. La condizione al contorno alternativa descritta dall'equazione 6 può essere implementata approssimando con le differenze finite l'equazione:

$$\frac{C(N_x + 1, it + 1) - C(N_x, it + 1)}{\Delta x} + 0.5 \cdot uC(N_x, it + 1) = 0 \rightarrow C(N_x + 1, it + 1) = C(N_x, it + 1) \frac{2}{2 + Peg} \quad (22)$$

IX. EFFETTO DELLA REAZIONE

Per incorporare l'effetto della reazione è sufficiente modificare la definizione del coefficiente A_1 dello schema risolutivo. Nell'equazione in forma adimensionalizzata, il termine di reazione è $-Da\tilde{C}$, per cui $A_{1, react} = A_{1, no react} - Da$. Confrontare la variazione dei profili al variare del tasso di reazione.