

EQUAZIONE DIFFUSIVA
MONODIMENSIONALE STAZIONARIA



Corso di Modellistica della Qualità Fluviale

Prof. S. Marsili Libelli

Anno accademico 2005-2006

Studente: Giulia Ercolani

INTRODUZIONE

L'equazione diffusiva stazionaria, la cui soluzione descrive l'andamento della concentrazione di un inquinante lungo un tratto fluviale in condizioni stazionarie, ricopre un ruolo centrale nella risoluzione dell'equazione diffusiva monodimensionale generale, per la quale è infatti necessario avere a disposizione il profilo iniziale della concentrazione dell'inquinante lungo il tratto fluviale esaminato. Poiché spesso non si hanno a disposizione misure dirette per la costruzione il profilo iniziale, si utilizza la soluzione stazionaria, scelta che permette di evitare transitori troppo lunghi e di mantenersi coerenti con il modello.

Equazione diffusiva monodimensionale generale:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k \cdot C$$

Equazione diffusiva monodimensionale stazionaria:
$$\frac{d^2 C}{dx^2} = \frac{u}{D} \cdot \frac{dC}{dx} + \frac{k}{D} \cdot C$$

Dove $C =$ concentrazione dell'inquinante $\left[\frac{M}{V} \right]$

$u =$ velocità della corrente $\left[\frac{L}{t} \right]$

$D =$ coefficiente di diffusione $\left[\frac{L^2}{t} \right]$

$k =$ cinetica $[t^{-1}]$

$t =$ coordinata temporale $[t]$

$x =$ coordinata spaziale $[L]$

L'equazione stazionaria risulta particolarmente complessa da trattare a causa della sua instabilità. E' perciò interessante studiare l'andamento dei suoi autovalori al variare dei parametri presenti nell'equazione.

STUDIO DELL'ANDAMENTO DEGLI AUTOVALORI:

Utilizzando la coordinata spaziale "z" normalizzata sulla lunghezza totale del tratto L, si ottiene la seguente formulazione per l'equazione diffusiva stazionaria:

$$\frac{d^2 C}{dz^2} = \frac{uL}{D} \cdot \frac{dC}{dz} + \frac{kL^2}{D} \cdot C \quad \text{poiché} \quad dz = \frac{dx}{L}$$

Da cui si ricava l'equazione di secondo grado:
$$s^2 - \frac{uL}{D} s - \frac{kL^2}{D} = 0$$

Le cui radici, cioè gli autovalori del modello, sono:

$$s = \frac{\frac{uL}{D} \pm \sqrt{\left(\frac{uL}{D}\right)^2 + 4\frac{kL}{D}}}{2}$$

Osservando l'espressione appena trovata si può dedurre che:

- Le due radici sono sempre entrambe reali, poiché sotto radice si ha sempre una quantità positiva, in quanto somma di due quantità a loro volta sempre positive:

$$\frac{uL}{D} > 0 \text{ e } 4\frac{kL^2}{D} > 0 \text{ sempre.}$$

- Si hanno sempre una radice positiva ed una negativa, poiché in un caso si ha la somma di due quantità positive: $\frac{uL}{D}$ e la radice del delta; mentre nell'altro a $\frac{uL}{D}$ si sottrae una quantità maggiore di esso, in quanto il delta è dato proprio dalla somma tra il quadrato di $\frac{uL}{D}$ e una quantità positiva $\left(4\frac{kL^2}{D}\right)$.

Fatte queste osservazioni si procede a studiare l'andamento delle due radici in funzione dei vari parametri presenti nel modello.

Si fissano i seguenti valori per la diffusione, la velocità della corrente e la lunghezza del tratto:

$$D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$u = 0.001 \text{ m/s}$$

$$L = 100000 \text{ m}$$

Inoltre si fissa come valore per il coefficiente della cinetica chimica: $k = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$

ANDAMENTO DEGLI AUTOVALORI CON LA CINETICA

Variando il valore del coefficiente della cinetica chimica da 0 a 0.0001 s^{-1} , si è osservato il seguente comportamento degli autovalori:

- In assenza di cinetica, cioè $k = 0$, i due autovalori sono entrambi non negativi e valgono

$$\lambda_1 = \frac{uL}{D} \text{ e } \lambda_2 = 0.$$

- Al crescere della cinetica aumenta la distanza tra i due autovalori rispetto a quella relativa a $k = 0$, poiché essi divengono sempre più grandi in valore assoluto ma hanno segno opposto. L'autovalore positivo è quindi sempre più preponderante sull'autovalore negativo e "prende il comando" sull'evoluzione del sistema sempre più velocemente.

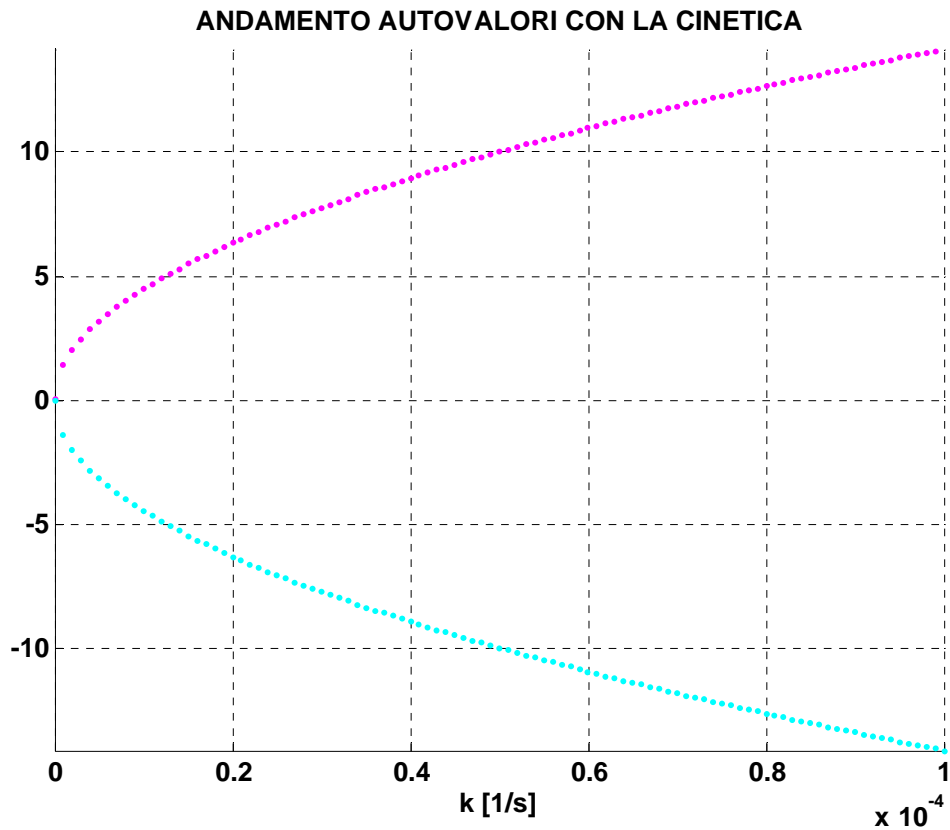


Figura 1 Andamento degli autovalori con la cinetica "k"

L'evoluzione del sistema risulta quindi maggiormente "controllabile" per bassi valori della cinetica.

ANDAMENTO DEGLI AUTOVALORI CON LA DIFFUSIONE

Per osservare l'andamento degli autovalori al variare del coefficiente di diffusività D , si è scelto il range tra $10 \text{ m}^2/\text{s}$ e $10000 \text{ m}^2/\text{s}$, nonostante si raggiungano valori forse troppo elevati. .

Per valori relativamente bassi del coefficiente di diffusività i due autovalori sono molto distanti e quindi il positivo prende quasi immediatamente il sopravvento sul negativo, rendendo praticamente inutilizzabile l'equazione. Al crescere della diffusione entrambi gli autovalori calano in valore assoluto, avvicinandosi sempre di più e tendendo a zero. L'autovalore positivo parte da un valore assoluto maggiore di quello del negativo e cala più velocemente di quest'ultimo.

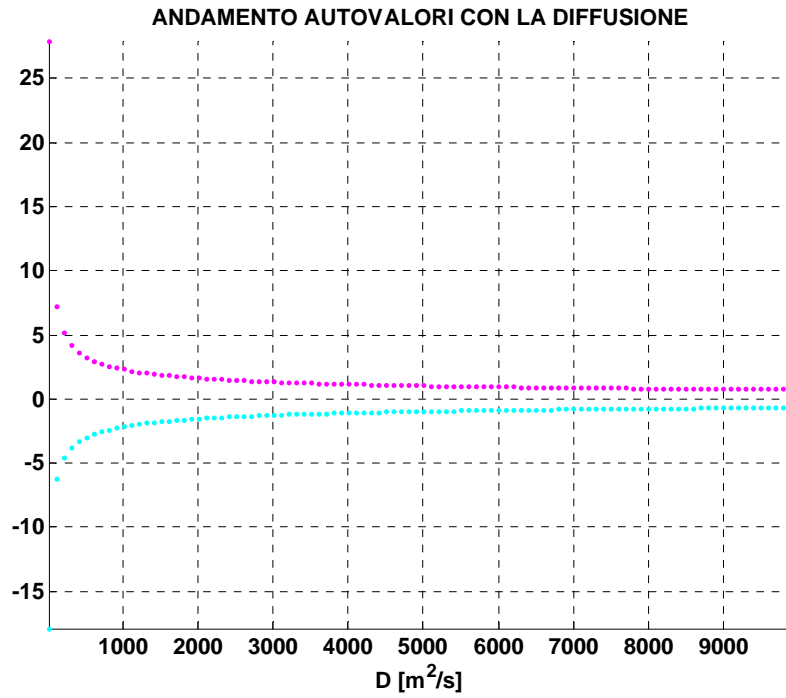


Figura 2 Andamento degli autovalori con la diffusione "D"

Il coefficiente di diffusività è quindi un parametro che in parte riesce a “domare” l’equazione, è quindi importante non adottare valori troppo bassi per tale parametro.

La dipendenza degli autovalori dalla cinetica e dalla diffusione è riassunta nel seguente grafico.

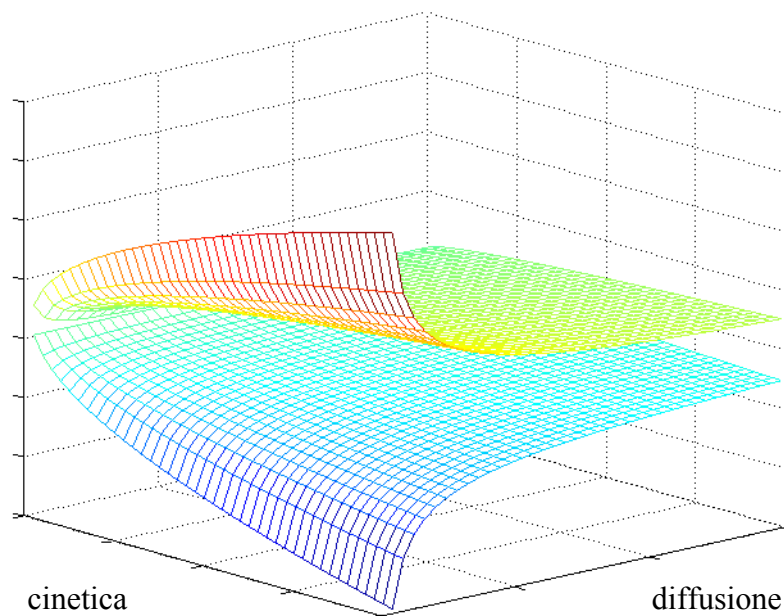


Figura 3 Andamento degli autovalori con la cinetica e la diffusione

ANDAMENTO DEGLI AUTOVALORI CON LA LUNGHEZZA DEL TRATTO FLUVIALE

Variando la lunghezza del tratto fluviale ipoteticamente studiato con l'equazione diffusiva stazionaria da 1 a 500 km, si osserva come, via via che la lunghezza cresce, gli autovalori crescano sempre di più in valore assoluto, quasi con un andamento lineare. Nonostante questo legame tra lunghezza del tratto e autovalori, si rimane comunque in un ambito in cui l'equazione è trattabile per percorsi più che sufficienti per gli studi effettuati (≈ 150 km). Infatti gli autovalori mantengono una distanza non troppo elevata e il positivo non prende il sopravvento sul negativo troppo velocemente.

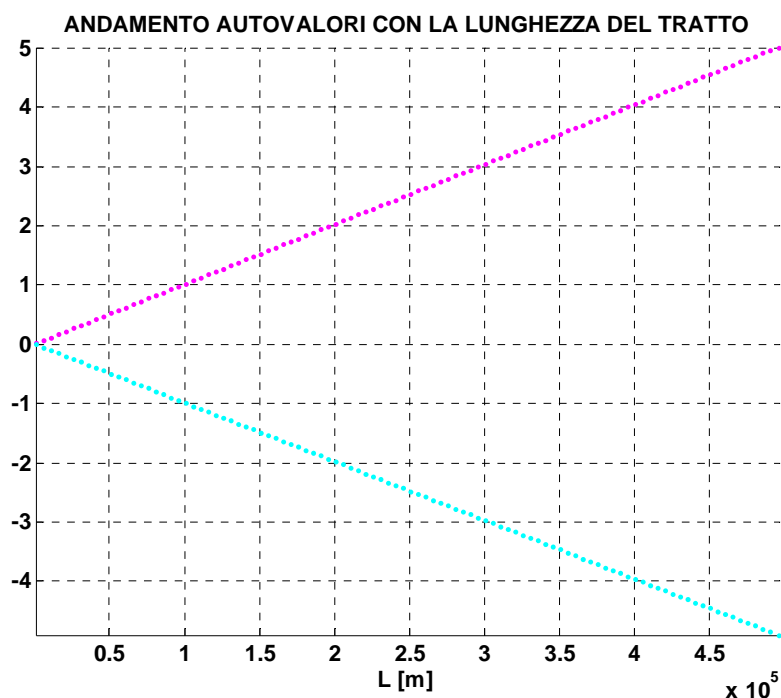


Figura 4 Andamento degli autovalori in funzione della lunghezza del tratto

ANDAMENTO DEGLI AUTOVALORI CON LA VELOCITA' DELLA CORRENTE

Pur avendo osservato l'andamento degli autovalori in funzione della velocità di scorrimento della corrente fluviale facendo variare quest'ultima in un range abbastanza limitato ($0.0005 \div 0.1$ m/s), si nota la differente influenza che il parametro ha sull'autovalore positivo e su quello negativo. Al crescere della velocità infatti l'autovalore positivo cresce in valore assoluto, mentre il negativo cala tendendo a zero.

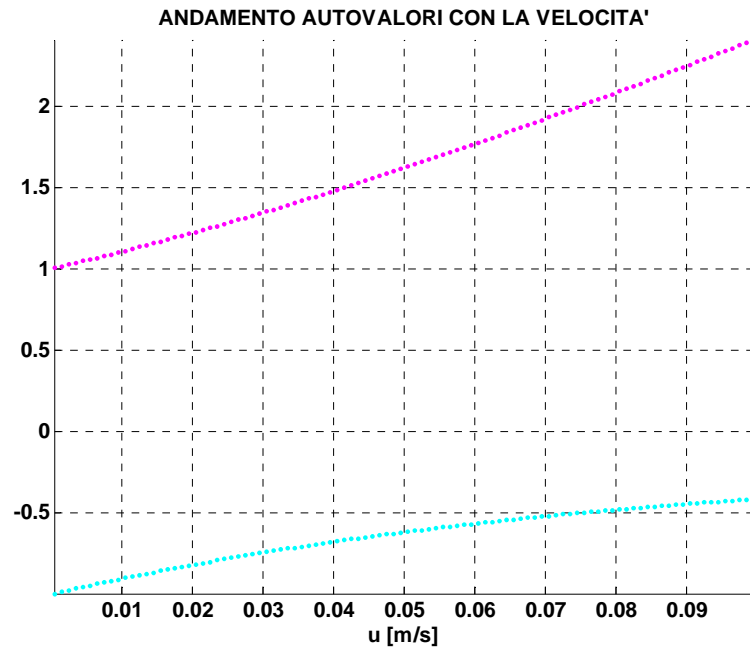


Figura 5 Andamento degli autovalori in funzione della velocità della corrente

Anche la velocità risulta quindi un parametro che crescendo influisce negativamente sulla trattabilità dell'equazione diffusiva stazionaria. E' però da sottolineare che per le velocità che normalmente interessano in relazione ai problemi di qualità fluviale l'autovalore positivo non arriva a valori troppo elevati.

TRAIETTORIE DEL SISTEMA :

Dopo aver studiato l'andamento degli autovalori dell'equazione diffusiva stazionaria monodimensionale in funzione dei vari parametri presenti nella sua espressione, è interessante osservare il quadro di stato del sistema (le traiettorie al variare delle condizioni iniziali: concentrazione e derivata prima della concentrazione). Ai fini di quest'analisi è utile scrivere l'equazione differenziale di secondo ordine come sistema di due equazioni differenziali di primo ordine eseguendo un opportuno cambiamento di variabili:

$$\text{con } \begin{cases} x_1 = C \\ x_2 = \frac{dC}{dx} \end{cases} \quad \text{si riscrive l'equazione stazionaria} \quad \frac{d^2C}{dx^2} = \frac{u}{D} \cdot \frac{dC}{dx} + \frac{k}{D} \cdot C$$

$$\text{come } \begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{L^2 k}{D} & \frac{uL}{D} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

Il cui unico punto di equilibrio è $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

Poiché come già visto gli autovalori del sistema sono sempre uno positivo ed uno negativo, le traiettorie del sistema andranno a formare una sella come mostrato in figura 6.

Il grafico è stato realizzato utilizzando valori unitari per i parametri :

$$u = D = L = K = 1$$

I relativi autovalori sono:

$$\lambda_1 = -0.618 \quad \lambda_2 = 1.618$$

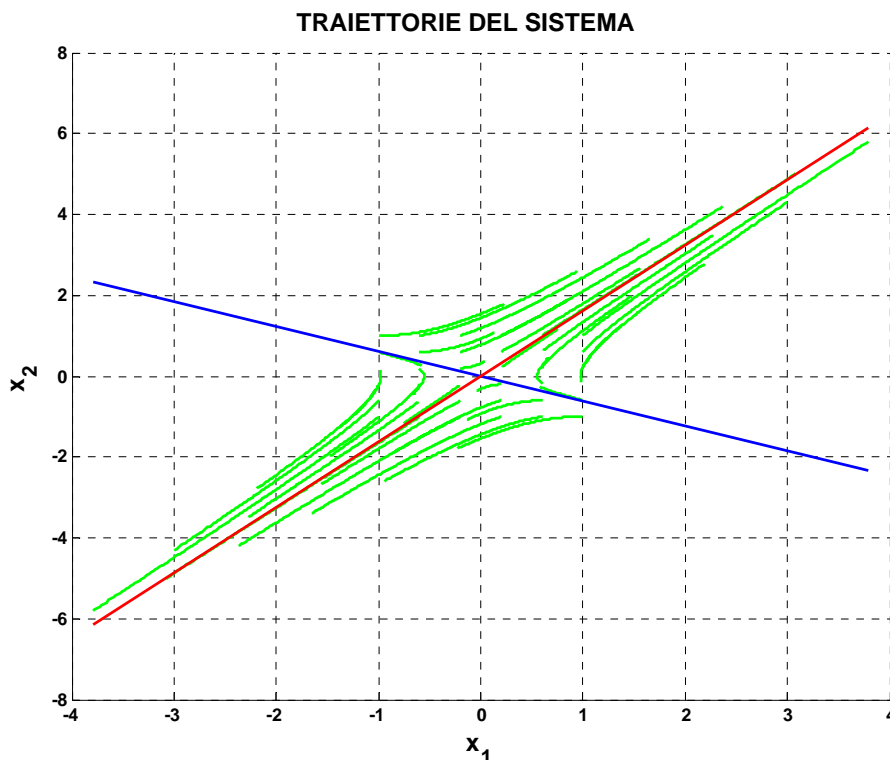


Figura 6 Quadro di stato del sistema relativo ai valori sopra elencati

Se per i vari parametri si scelgono invece dei valori che, seppur realistici, danno degli autovalori molto distanti tra di loro (ex: $D=300 \text{ m}^2/\text{s}$; $u=0.5 \text{ m/s}$; $L=20\text{km}$; $k=0.001\text{s}^{-1}$ danno degli autovalori pari a $\lambda_1 = -23.472$ $\lambda_2 = 56.805$), la spiccata instabilità del sistema, causata dall'autovalore positivo che prende velocemente il sopravvento sul negativo, è confermata dal quadro di stato che si ottiene: esso mostra delle traiettorie fortemente schiacciate sull'asintoto relativo all'autovalore positivo per qualsiasi coppia di condizioni iniziali; il sistema quindi si allontana molto velocemente e sempre di più dall'equilibrio, tanto che è inutile mostrare un quadro di stato costruito per dei

valori dei parametri che diano autovalori troppo distanti tra di loro, in quanto sarebbe impossibile distinguere le traiettorie dall' asintoto positivo.

Alla luce dello studio effettuato si può però individuare un range per i parametri in cui l'equazione è sfruttabile per il fine desiderato, cioè per ricavare un profilo di concentrazione lungo il tratto fluviale di interesse a partire da delle misure di concentrazione prese lungo il percorso o agli estremi. I seguenti valori dei parametri per esempio forniscono un'equazione trattabile, infatti si hanno una cinetica molto bassa e una diffusione molto alta:

$$u = 0.001 \text{ m/s}$$

$$D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$L = 100000 \text{ m}$$

$$K = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$$

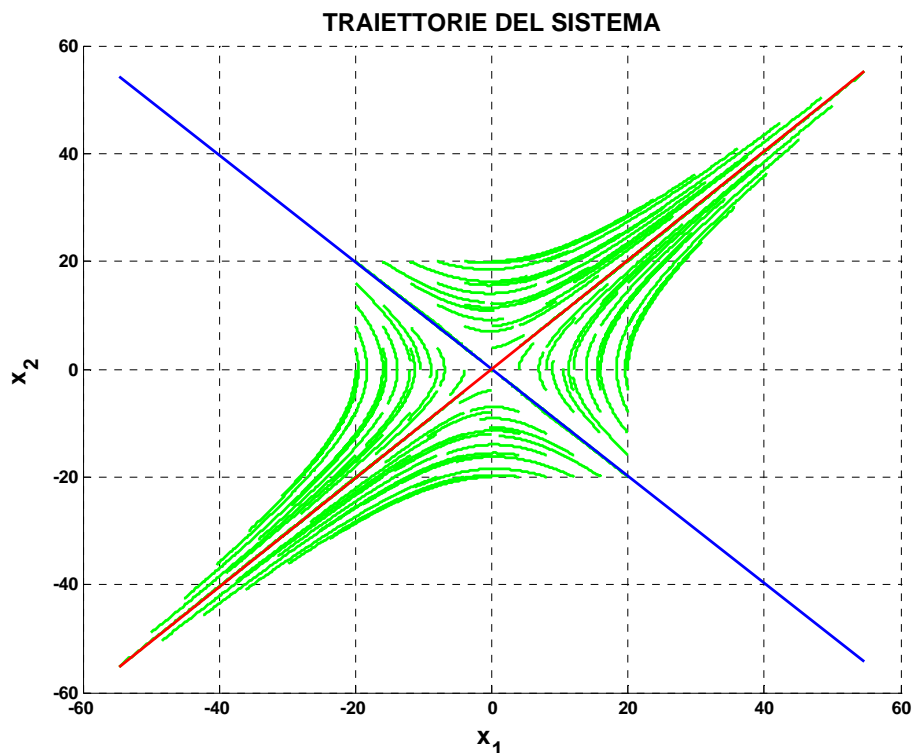


Figura 7 Traiettorie relative a valori realistici dei parametri che danno autovalori non troppo distanti tra di loro

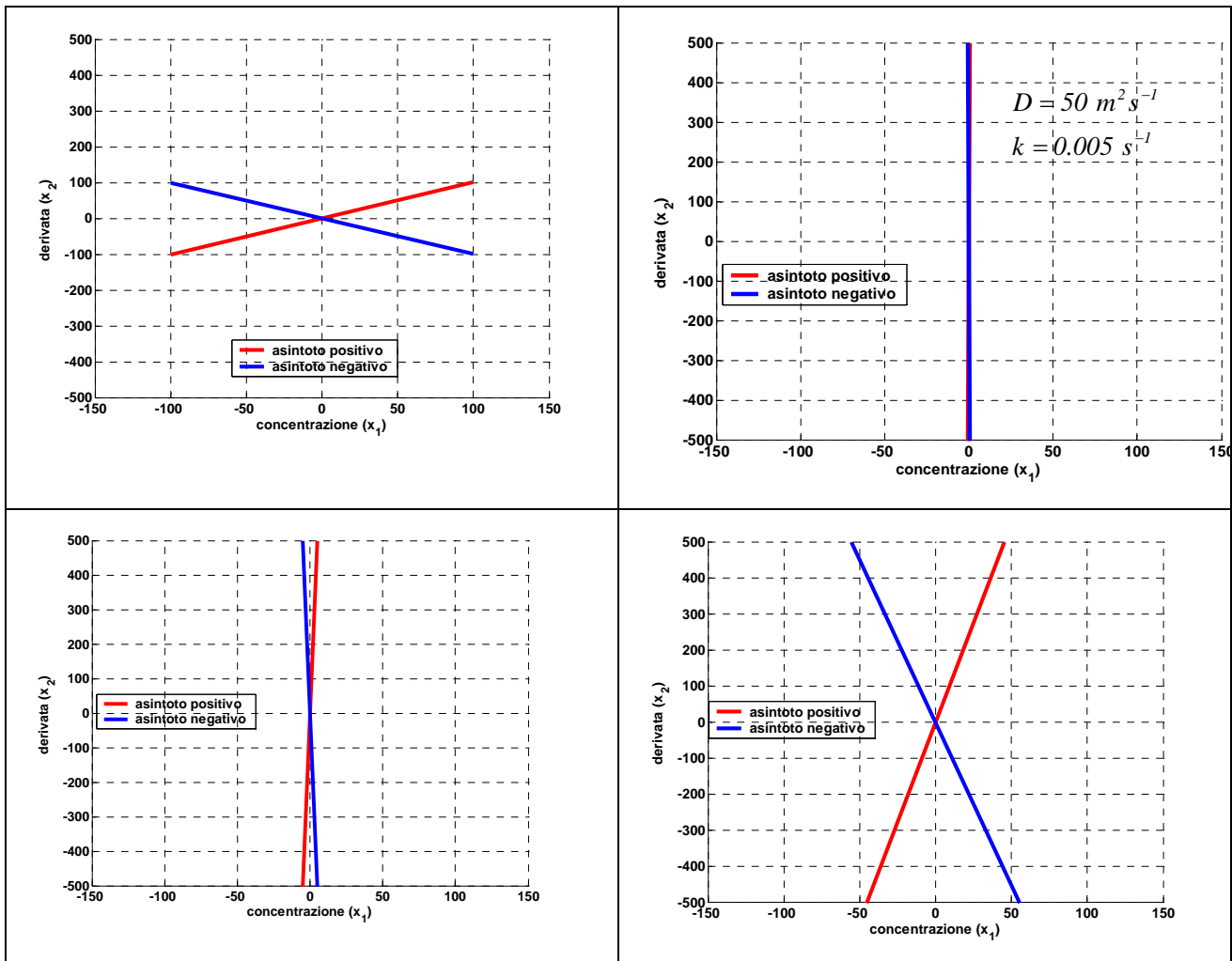
E' importante avere una cinetica piccola ed una diffusione elevata poiché come si è visto al crescere della prima gli autovalori si distanziano sempre di più, mentre al crescere della seconda si avvicinano. In questo caso infatti gli autovalori valgono $\lambda_1 = 1.01$ e $\lambda_2 = -0.99$, quindi non sono troppo "distanti", il che significa che il positivo non prende il sopravvento sul negativo troppo velocemente, e questo implica che molte delle traiettorie, nel tempo di evoluzione che copre la

lunghezza del tratto fluviale esaminato, rimangano attorno all'equilibrio e siano perciò "utilizzabili". Il quadro di stato che si ottiene (figura 7) mostra comunque anche le caratteristiche prima descritte (le traiettorie tendono verso l'asintoto relativo all'autovalore positivo). Infatti non va dimenticato che l'equazione è instabile e quindi se fatta evolvere per tempi lunghi le traiettorie si portano tutte su valori infiniti, ma poiché il significato fisico del sistema è proprio quello di descrivere l'andamento della concentrazione di un inquinante in un tratto fluviale di una certa lunghezza, quello che interessa è l'andamento delle traiettorie limitato a questo periodo di evoluzione (siccome tutto lo studio è stato effettuato normalizzando la coordinata spaziale sulla lunghezza totale del tratto, il periodo di evoluzione è pari a 1).

La forte influenza che cinetica e diffusione hanno sugli autovalori del sistema, e di conseguenza sulla velocità con cui le traiettorie si portano sull'asintoto positivo esplodendo, è ben visibile nei seguenti grafici, in cui si riportano proprio gli asintoti verso cui tendono le traiettorie per diversi valori di diffusione e cinetica.

Si fa riferimento ad un tratto di 100 km e con velocità di scorrimento di 0.001 m/s.

- | | | |
|----|---|--|
| 1. | $D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$
$k = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$ | L'equazione con diffusione alta e cinetica lenta non presenta problemi infatti si ha $\lambda_1 = -0.99$ $\lambda_2 = 1.01$ |
| 2. | $D = 50 \text{ m}^2/\text{s}$
$k = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$ | Una diminuzione della diffusione porta problemi infatti gli autovalori crescono $\lambda_1 = -9.05$ $\lambda_2 = 11.05$ |
| 3. | $D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$
$k = 0.005 \text{ s}^{-1}$ | Se la cinetica veloce gli autovalori crescono notevolmente $\lambda_1 = -99.99$ $\lambda_2 = 100.01$ |
| 4. | $D = 50 \text{ m}^2/\text{s}$
$k = 0.005 \text{ s}^{-1}$ | Diffusione bassa e cinetica veloce portano ad una instabilità velocissima, infatti si ha $\lambda_1 = -999$ $\lambda_2 = 1001$ |



OSSERVAZIONI CONCLUSIVE:

L'equazione diffusiva monodimensionale stazionaria $\frac{d^2C}{dx^2} = \frac{u}{D} \cdot \frac{dC}{dx} + \frac{k}{D} \cdot C$ è instabile per qualsiasi valore dei parametri presenti nella sua formulazione, poiché uno dei due autovalori è sempre positivo, mentre l'altro sempre negativo. Questo crea problemi nel momento in cui si voglia utilizzarla per definire un profilo stazionario di concentrazione lungo un certo tratto fluviale. Ma visto che interessa l'evoluzione dell'equazione limitatamente al tratto esaminato, essa rimane comunque utilizzabile sotto la condizione di autovalori non troppo distanti tra di loro, in modo che l'autovalore positivo non prenda troppo velocemente il sopravvento sul negativo, evitando così che tutte le traiettorie "esplodano" all'interno del tratto studiato. In questo caso sono infatti presenti molte traiettorie che rimangono attorno all'equilibrio (figura 7), cioè su valori realistici di concentrazione. Negli altri casi invece l'unica possibilità di non essere su una traiettoria che esplose quasi istantaneamente è quella di avere condizioni iniziali che appartengano all'asintoto relativo all'autovalore negativo (cioè autovettori del sistema), poiché esse per definizione di autovettore

danno traiettorie che rimangono sull'asintoto. Questo però non è interessante da un punto di vista pratico poiché le condizioni iniziali da dare al sistema non sono scelte a piacimento, ma dipendono dalle misure effettuate sul campo. La condizione di autovalori non troppo distanti si traduce nella necessità di avere una cinetica lenta e una diffusione elevata (sono questi i due parametri che incidono maggiormente sulla distanza tra gli autovalori).

Sotto queste limitazioni l'equazione è utilizzabile per la stima di un profilo iniziale di concentrazione, sia a partire da misure di concentrazione agli estremi, sia a partire da misure lungo il percorso. Nel primo caso si effettua una procedura detta di "shooting" (figura 8), che consiste nel ricercare la derivata iniziale minimizzando il quadrato dello scarto tra la concentrazione finale data dal modello e quella realmente misurata. Nel secondo caso invece si ricerca la derivata iniziale minimizzando la somma dei quadrati degli scarti tra le misure date e i valori relativi agli stessi punti ricavati dal modello (figura 9).

- Shooting
$$\min_{C'(0)} (C_{fin}^{modello} - C_{fin}^{misure})^2$$

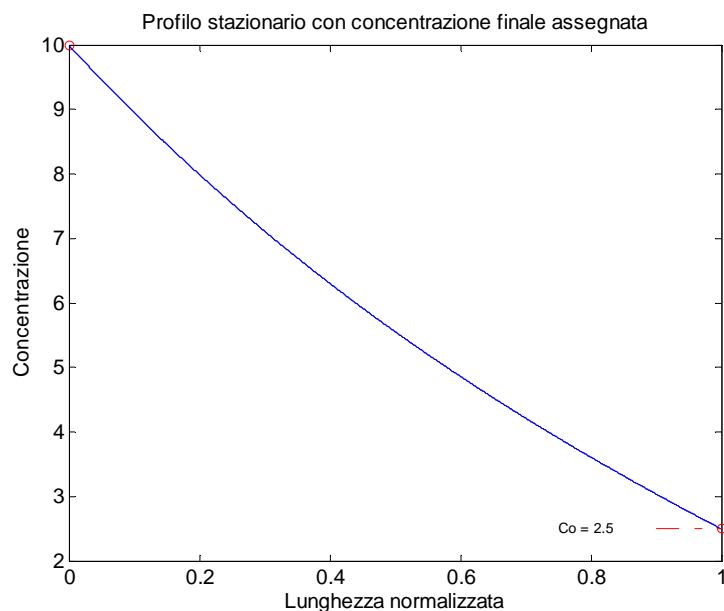


Figura 8 Profilo di concentrazione stazionario ricavato con una procedura di shooting

Minimi quadrati

$$\min_{C'(0)} \sum_i (C_i^{modello} - C_i^{misura})^2$$

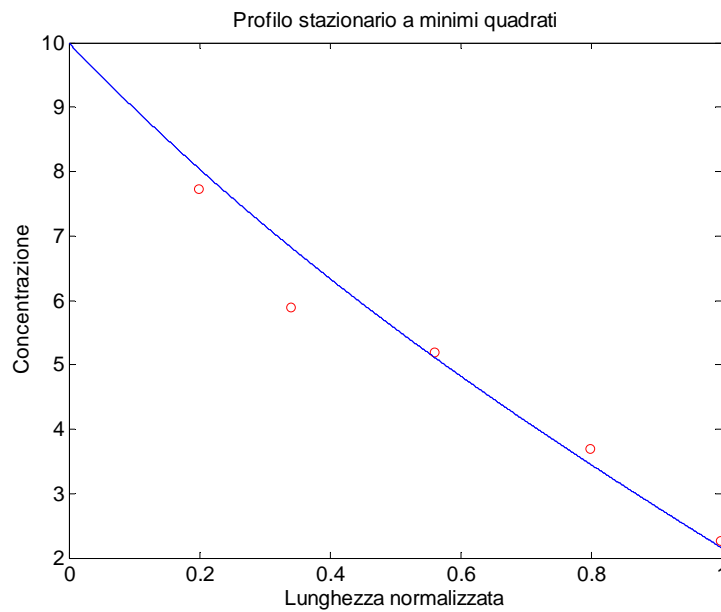


Figura 9 Profilo di concentrazione stazionario ricavato ai minimi quadrati

Si mostrano di seguito le diverse traiettorie che compie il sistema per andare da un certo valore di concentrazione iniziale ad uno finale variando cinetica e diffusione.

Concentrazione iniziale = 10 mg/L

Lunghezza del tratto = 100 km

Concentrazione finale = 2.5 mg/L

Velocità di scorrimento = 0.001 m/s

Traiettoria 1:

$$D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$\lambda_1 = -0.99$$

$$k = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$$

$$\lambda_2 = 1.01$$

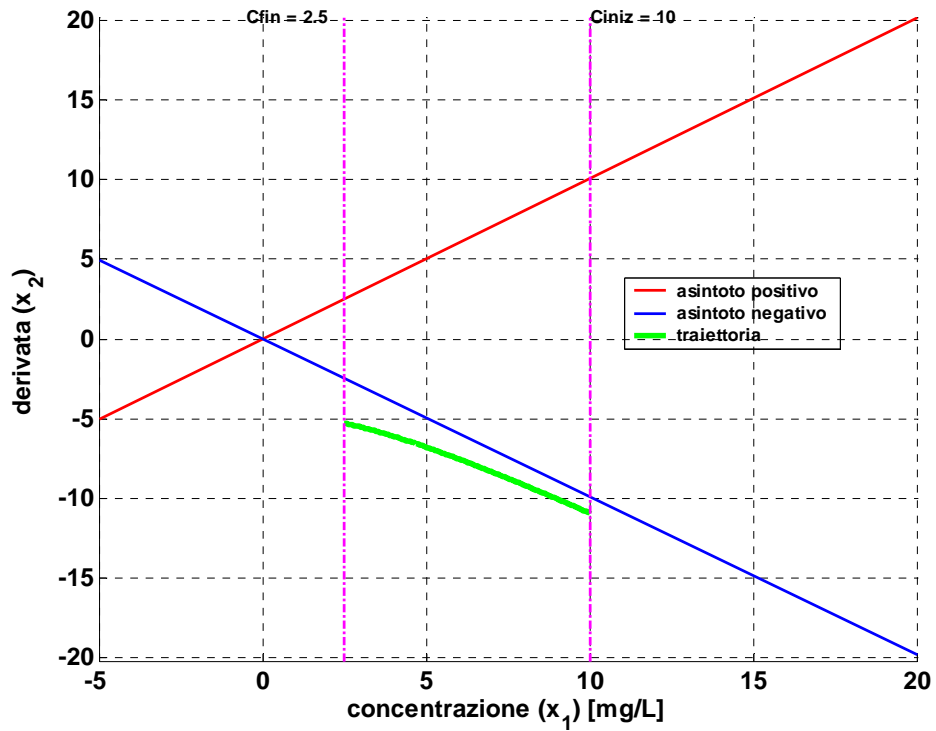


Figura 10 Traiettoria 1

Per questa prima traiettoria sono stati utilizzati una cinetica molto lenta e una diffusione alta, infatti i relativi autovalori sono vicini tra di loro e non si hanno problemi nell'utilizzare la traiettoria.

Traiettoria 2: $D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$ $\lambda_1 = -3.15$
 $k = 0.000005 \text{ s}^{-1}$ $\lambda_2 = 3.17$

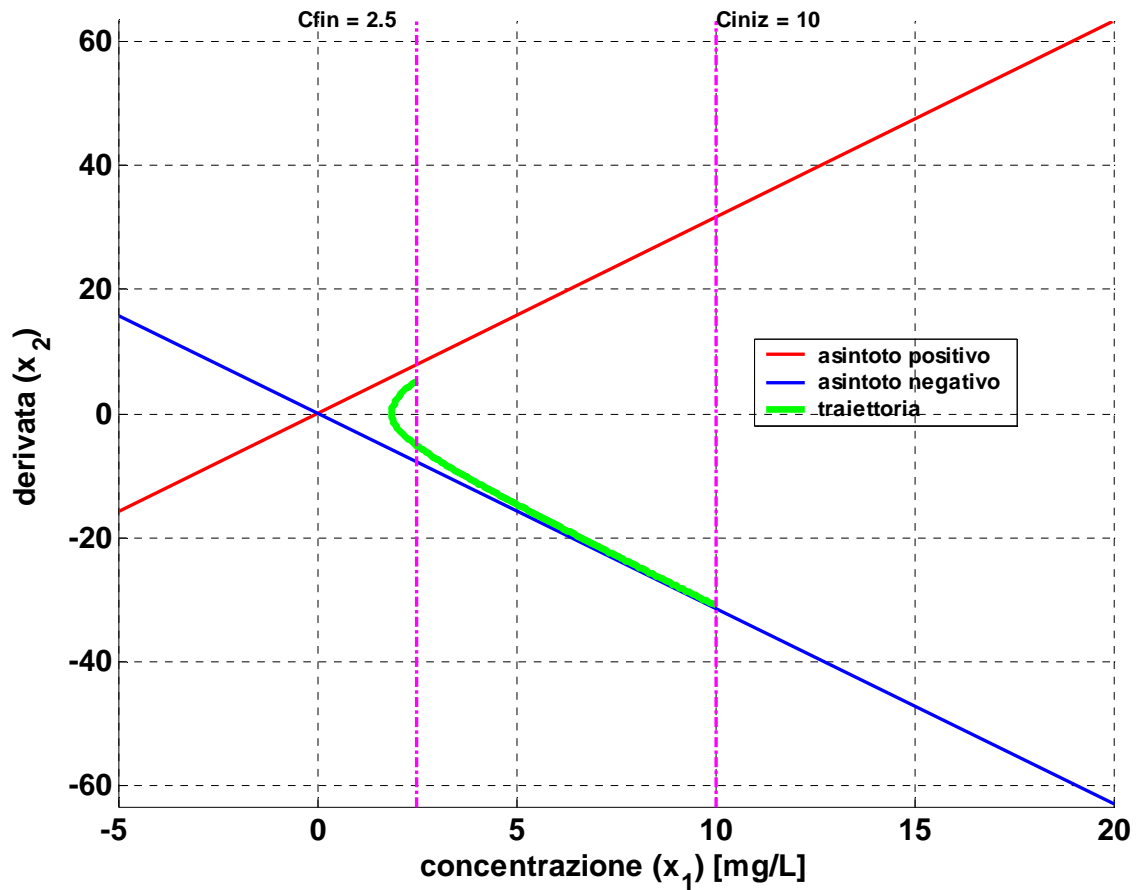


Figura 11 Traiettoria 2

Aumentando la cinetica di un solo ordine di grandezza e mantenendo tutti gli altri dati invariati, si nota immediatamente come la traiettoria, pur partendo da un punto molto vicino all'asintoto relativo all'autovalore negativo, riesca ad arrivare a quello positivo nel periodo di evoluzione corrispondente al tratto fluviale esaminato. Questo perché la distanza tra i due autovalori è cresciuta e il positivo prevale sul negativo più velocemente rispetto al caso precedente.

Traiettoria 3: $D = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$ $\lambda_1 = -9.99$
 $k = 0.00005 \text{ s}^{-1}$ $\lambda_2 = 10.01$

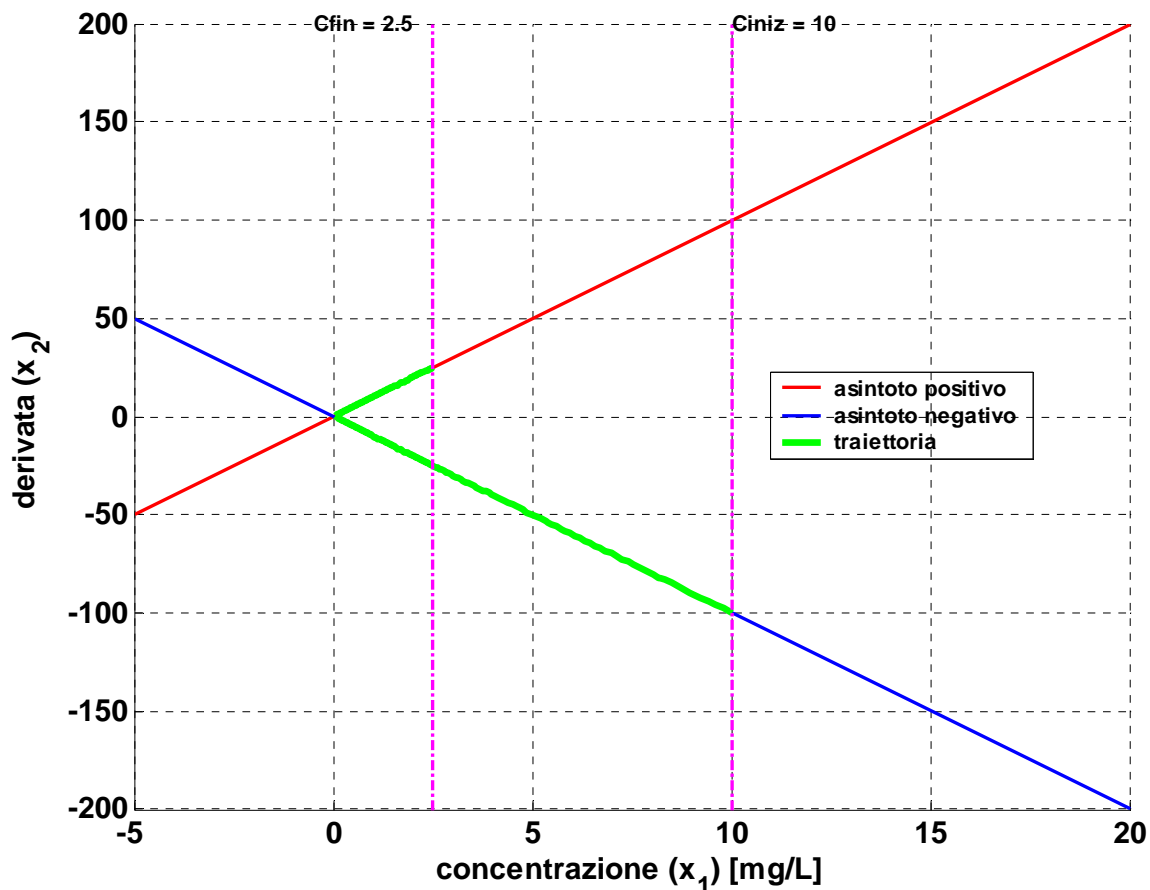


Figura 12 Traiettoria 3

Aumentando la cinetica di un altro ordine di grandezza gli autovalori si distanziano ancora di più e la traiettoria arriva a schiacciarsi sull'asintoto relativo all'autovalore positivo. Infatti se la cinetica è fatta crescere di un altro ordine di grandezza l'equazione non è più utilizzabile poiché la traiettoria esplose e non riesce a rimanere entro il limite di concentrazione finale imposto.

Anche l'influenza della diffusione è significativa per l'andamento delle traiettorie. Infatti riportandosi sulla cinetica iniziale ma diminuendo il coefficiente di diffusione finora utilizzato, si nota immediatamente (figura 13) un aumento dell'influenza dell'autovalore positivo sul negativo: pur partendo da condizioni iniziali molto vicine all'asintoto negativo si va velocemente verso il positivo.

Traiettoria 4:

$$D = 500 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$\lambda_1 = -3.06$$

$$k = 0.0000005 \text{ s}^{-1}$$

$$\lambda_2 = 3.26$$

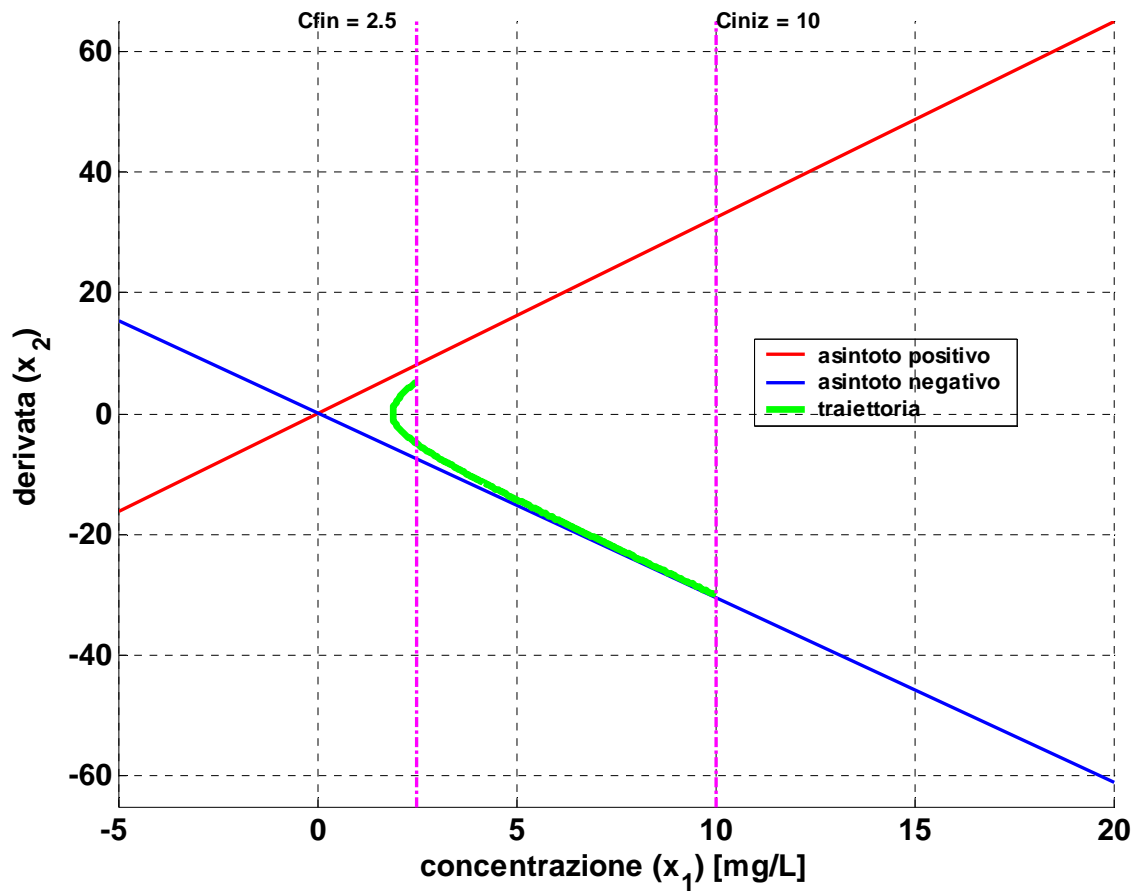
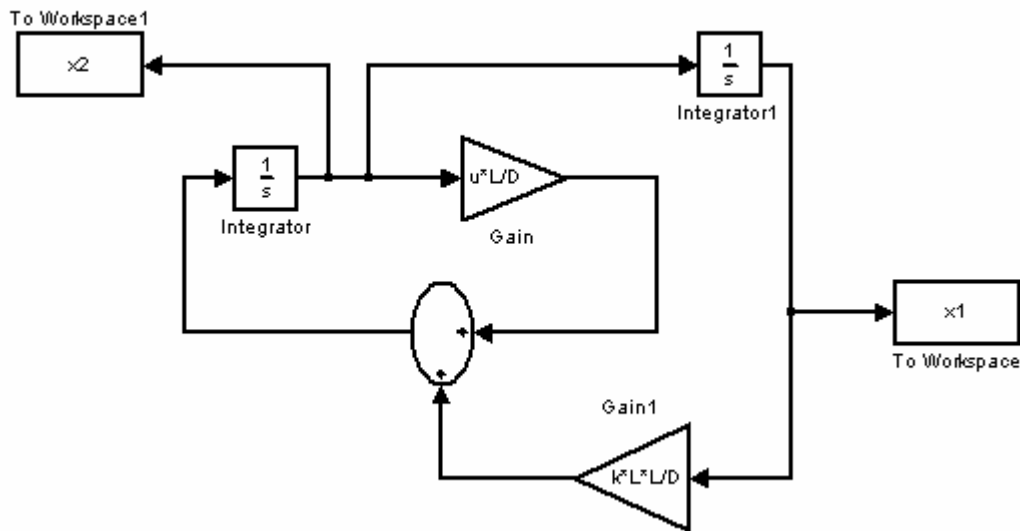


Figura 13 Traiettoria 4

ALLEGATO 1:**SCHEMA SIMULINK DEL SISTEMA****ALLEGATO 2:****CODICE MATLAB PER IL CALCOLO DELLE TRAIETTORIE DEL SISTEMA**

```

clear
close all

u=1;           % velocità di scorrimento
D=1;           % diffusione
L=1;           % lunghezza tratto
k=1;           % cinetica

tfinal=1;      % tempo finale di simulazione
a=[];          % matrice in cui si archivia x1
b=[];          % matrice in cui si archivia x2
tbi= linspace(0, 1, 250); %risuddivisione del tempo di simulazione
giri=0;        %contatore dei cicli for

for x1o=-1:0.4:1 % CICLO IN CUI VARIA LA CONCENTRAZIONE INIZIALE(x1o)

    for x2o=-1:0.4:1 % CICLO IN CUI VARIA LA DERIVATA INIZIALE (X2o)

```

```

[t, x, y]=sim(' sistema' , tfin);      % simulazione

x1bis=interp1(t, x1, tbis);
x2bis=interp1(t, x2, tbis);
a=[a, x1bis];                          % archiviazione dei risultati delle
b=[b, x2bis];                          % varie simulazioni
giri=giri+1;

end

end

for i=1:giri      % CICLO PER PLOTTARE I RISULTATI DELLE VARE SIMULAZIONI

figure(1)
hold on
set(figure(1), 'Color', 'White')

set(gca, 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 10, 'FontWeight', 'Bold', 'Box', 'off')
grid on
plot(a(:, i), b(:, i), '-g', 'LineWidth', 2)
hold on
xlabel('x_1')
ylabel('x_2')
title('TRAIETTORIE DEL SISTEMA')

end

autovalori=eig([0 1; L^2*k/D u*L/D]);      %autovalori del sistema
ascisse=[min(min(a)) max(max(a))];
ordinati1=ascisse.*autovalori(1);          %asintoti delle traiettorie
ordinati2=ascisse.*autovalori(2);

figure(1)
hold on
plot(ascisse, ordinati1, 'b', 'LineWidth', 2)% plottaggio degli asintoti
hold on
plot(ascisse, ordinati2, 'r', 'LineWidth', 2)

```