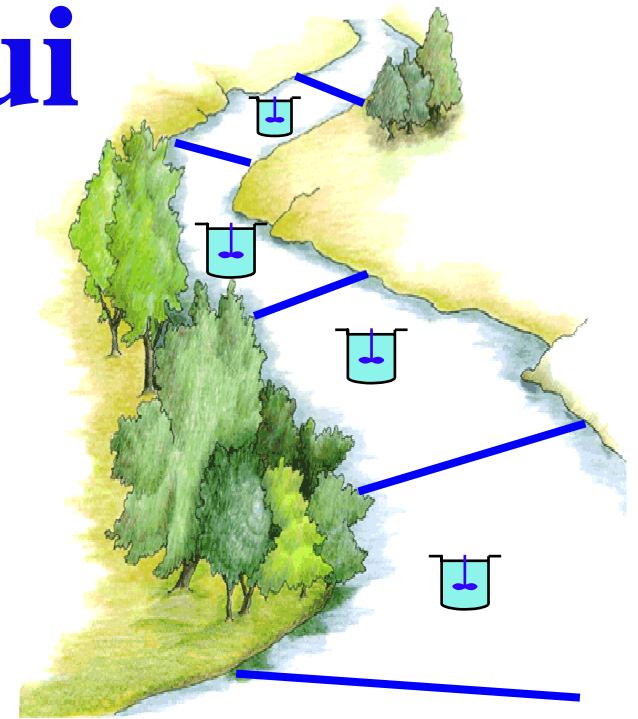
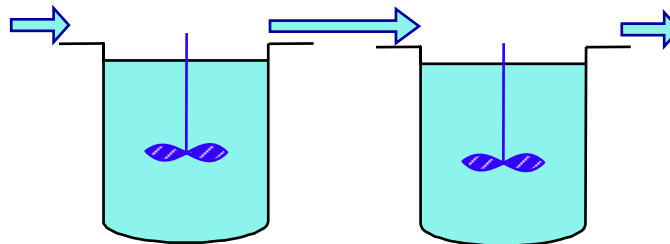


Applicazioni Ambientali di Sistemi Dinamici Lineari tempo-continui



Alcuni esempi di sistemi lineari tempo-continui

Dinamica di un bacino idrografico

- ⇒ Modellato come dei serbatoi in cascata
- ⇒ Lo stato del sistema è rappresentato dal volume di invaso di ogni serbatoio

Autodepurazione fluviale (modello di Streeter & Phelps)

- ⇒ La dinamica congiunta dell'inquinante biodegradabile e dell'ossigeno disciolto è descritta da una coppia di equazioni lineari

Diffusione degli inquinanti in un tratto fluviale

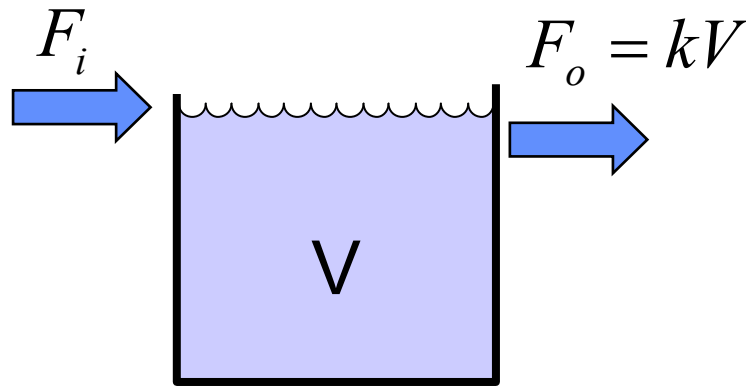
- ⇒ La diffusione di inquinanti può essere modellata come un sistema lineare di tipo sella (parte stabile e parte instabile)

Reazioni chimiche in un reattore mescolato

- ⇒ Se la cinetica chimica è del primo ordine il sistema di reazione (CSTR) è descritto da un sistema lineare

Esempio di risposta impulsiva: dinamica di un serbatoio

- ☞ Si consideri la dinamica del volume di un invaso (V) il cui deflusso sia supposto lineare, i.e. portata di uscita proporzionale al volume invasato



$$\frac{dV}{dt} = F_i - F_o = F_i - kV$$

$$g(t) = e^{-kt}$$

- ☞ L'evoluzione dello stato (V) si determina come convoluzione della risposta impulsiva per l'ingresso F_i , oltre alla condizione iniziale V_o

$$V(t) = e^{-kt} V_o + \int_0^t e^{-k(t-\sigma)} F_i(\sigma) d\sigma$$

Risposta impulsiva di un serbatoio

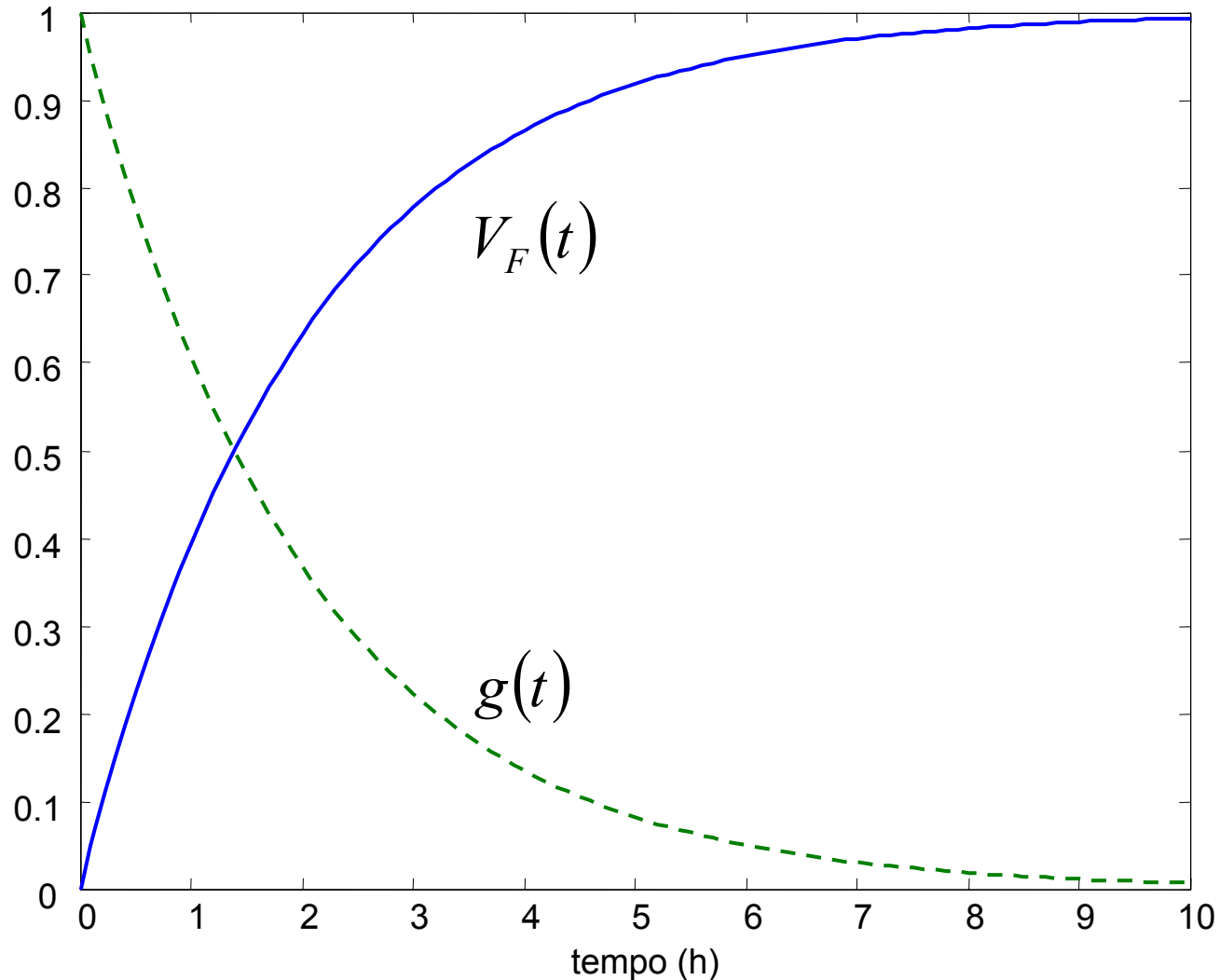
- ☞ La risposta forzata del sistema è determinata dalla risposta impulsiva $g(t)$ in convoluzione con l'ingresso.

$$V_F(t) = \int_0^t g(t-\sigma)F_i(\sigma)d\sigma = \int_0^t e^{-k(t-\sigma)}F_i(\sigma)d\sigma$$

- ☞ Se l'ingresso ha un'espressione semplice (ad es. costante) si può risolvere l'integrale di convoluzione

$$\begin{aligned} V_F(t) &= \int_0^t e^{-k(t-\sigma)}F_i d\sigma = F_i e^{-kt} \int_0^t e^{k\sigma} d\sigma \\ &= F_i e^{-kt} \frac{1}{k} e^{k\sigma} \Big|_0^t = \frac{F_i}{k} e^{-kt} (e^{kt} - 1) = \frac{F_i}{k} (1 - e^{-kt}) \end{aligned}$$

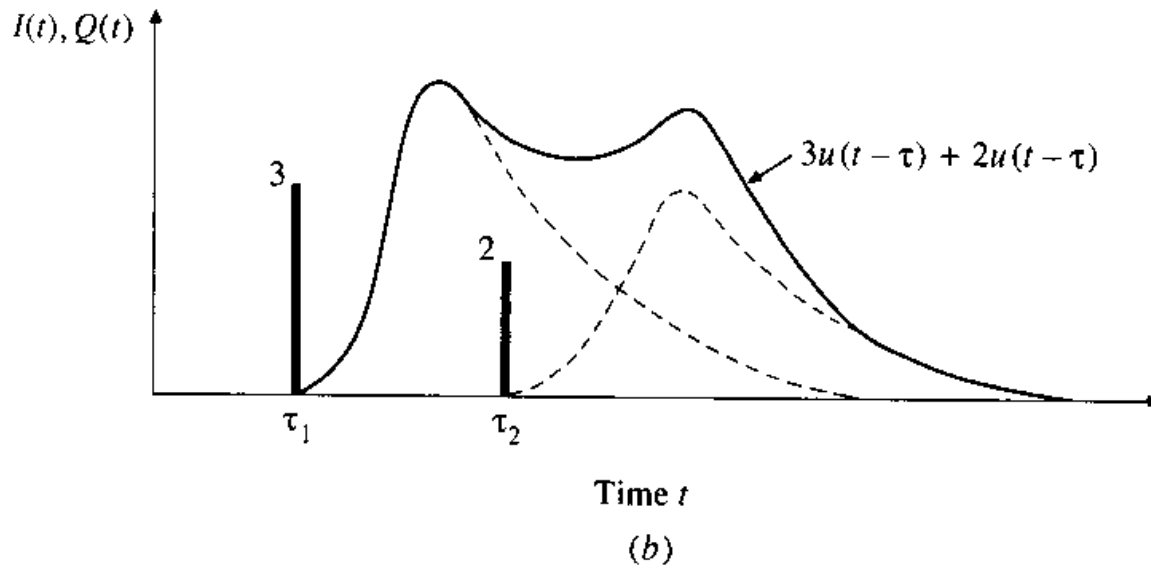
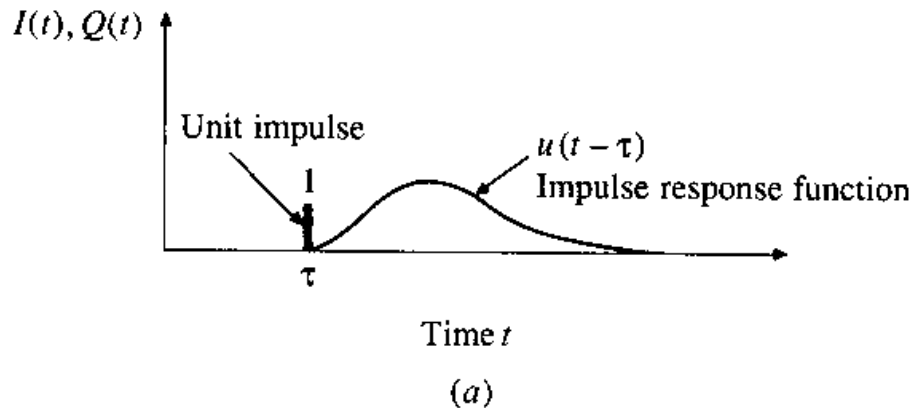
Derivazione dell'idrogramma unitario



La legge di riempimento dell'invaso V_F a seguito di una portata costante F_i è stata ottenuta come convoluzione dell'ingresso con la risposta impulsiva $g(t)$ dell'invaso.

Nota: in questo caso V_F è l'integrale di $g(t)$, ovvero la risposta al gradino.

Risposta all'idrogramma unitario

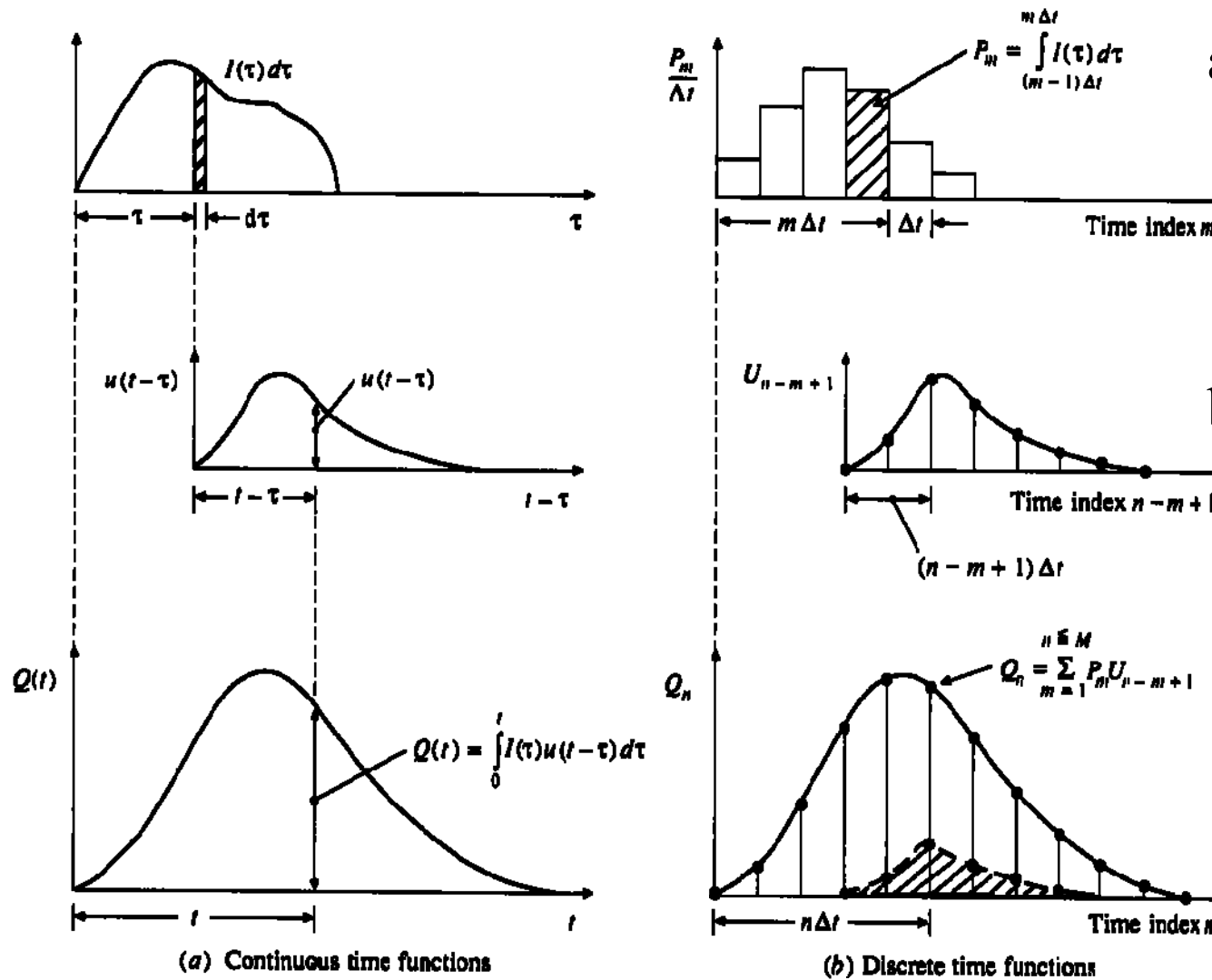


Se il sistema è *lineare* ed è noto il suo *idrogramma unitario*:

- La risposta ad un qualsiasi ingresso si può trovare come convoluzione di questo con l'idrogramma unitario (risposta impulsiva)
- Essendo il sistema lineare, la risposta a più ingressi si può trovare come somma delle risposte ai singoli ingressi.

Chow, V.T., Maidment, D.R., Mays, L.W. *Applied Hydrology*. McGraw-Hill 1988.

Risposta all'idrogramma unitario (I.U.)



- a) La risposta all'I.U. nel continuo si ottiene come integrale di convoluzione con l'ingresso
- b) Se l'I.U. è noto sperimentalmente, per punti, si procede in modo discreto e l'integrale di convoluzione si approssima con una somma di convoluzione

Chow, V.T, Maidment, D.R., Mays, L.W. Applied Hydrology. McGraw-Hill 1988.

Dinamica di un bacino idrografico

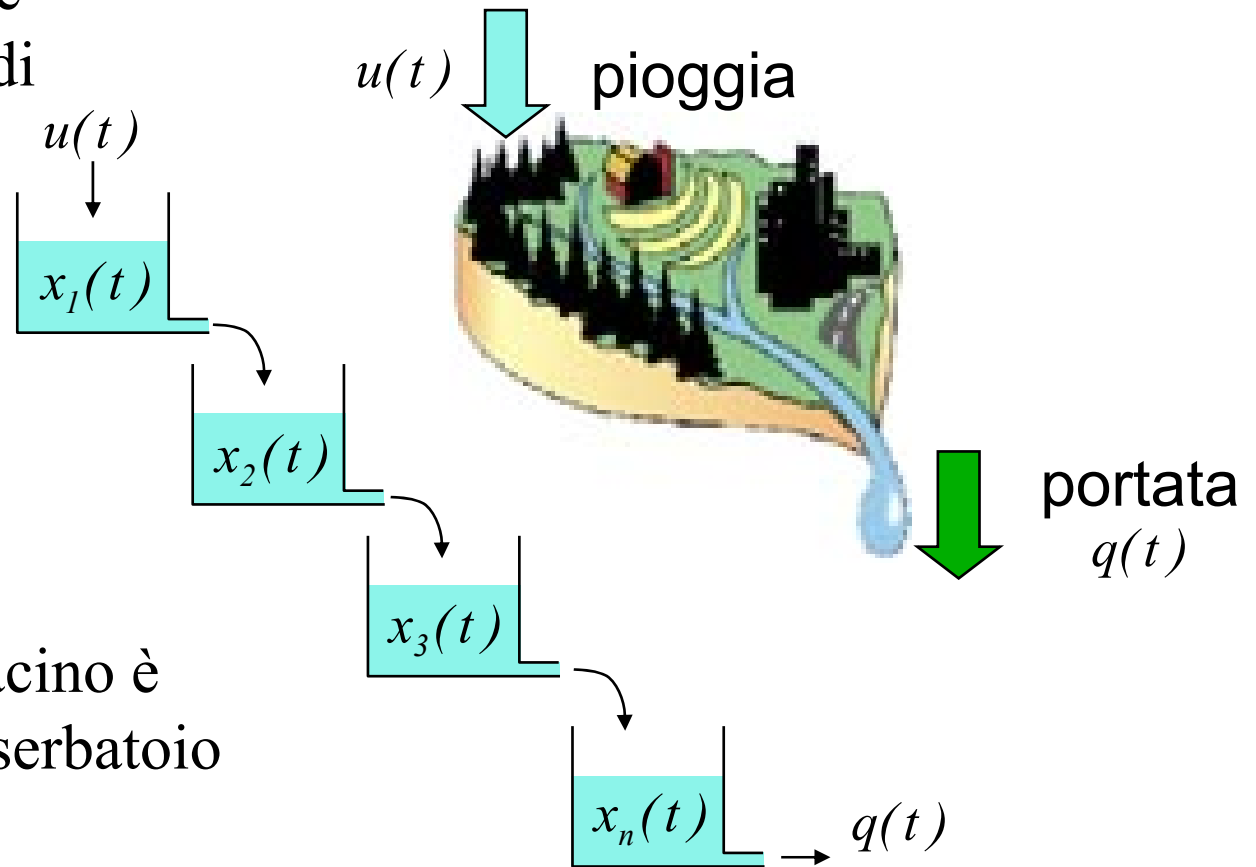
La risposta di un bacino idrografico alla pioggia può essere schematizzata come una serie di serbatoi in cascata (*modello di Nash*)

Lo stato di ogni serbatoio è rappresentato dal volume di acqua contenuto

Il deflusso da ciascun serbatoio è proporzionale al volume di acqua in esso contenuto attraverso una costante di deflusso k

La portata all'uscita del bacino è pari allo stato dell'ultimo serbatoio

$$q(t) = k \cdot x_n(t)$$



Dinamica della cascata di serbatoi

Modello di Nash

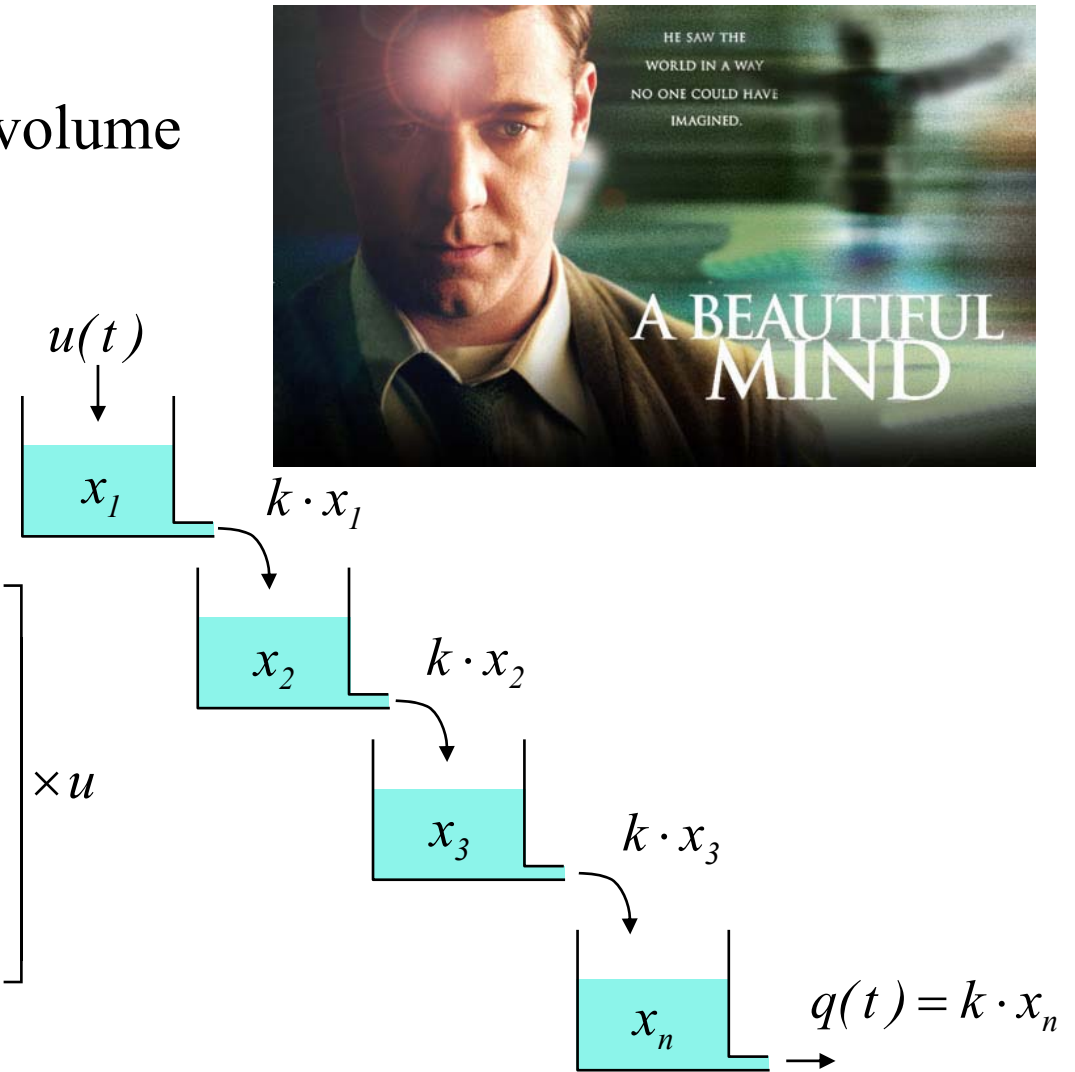
Per ciascun serbatoio la variazione di volume è data dal bilancio ingresso-uscita

$$\dot{x}_i = k \cdot x_{i-1} - k \cdot x_i$$

In forma matriciale

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \dots \\ \dot{x}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ k & -k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k & -k & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -k \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \times u$$

$$q = [0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad k] \times x$$



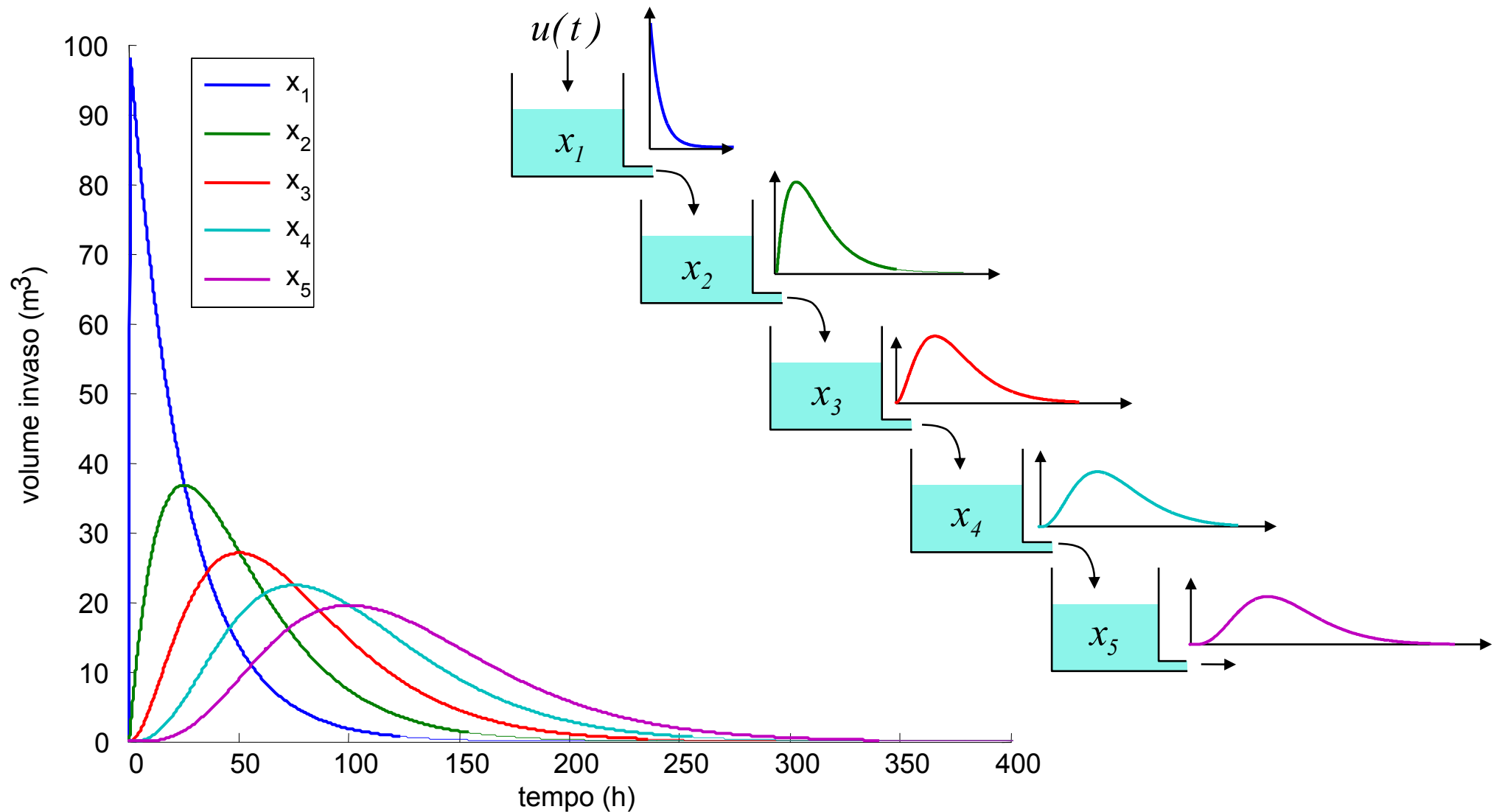
Derivazione dell'idrogramma unitario

- Dato che A è in forma triangolare (inferiore) gli autovalori ($-k$) sono i suoi elementi sulla diagonale principale
- L'autovalore $\lambda = -k$ ha molteplicità n , se $A \in R^{n \times n}$
- Dalla rappresentazione matriciale ($A, \mathbf{b}, \mathbf{c}$) si può ricavare la risposta impulsiva come

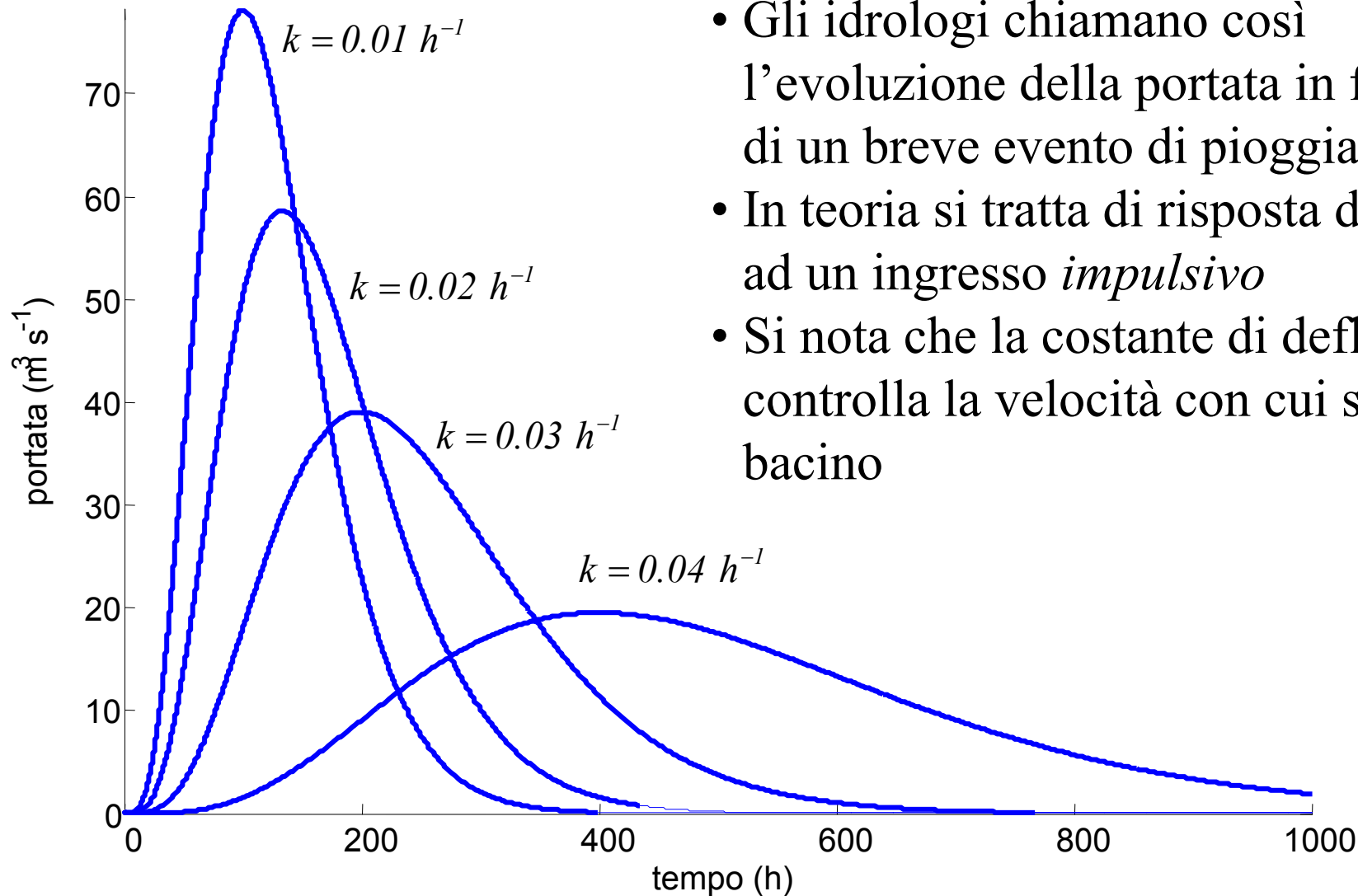
$$y(t) = \mathbf{c} e^{At} \mathbf{b} = \frac{1}{T(n-1)!} \left(\frac{t}{T} \right)^{n-1} e^{-\frac{t}{T}}$$

- dove $k = 1/T = \text{cost. di tempo del bacino}$
- Si può ricavare il tempo in cui l'uscita è massima, ponendo $\frac{dy}{dt} = 0$ e ottenendo $t^* = (n-1)T$

Risposta impulsiva dei volumi dell'invaso



Idrogramma unitario



- Gli idrologi chiamano così l'evoluzione della portata in funzione di un breve evento di pioggia
- In teoria si tratta di risposta del sistema ad un ingresso *impulsivo*
- Si nota che la costante di deflusso k controlla la velocità con cui si svuota il bacino

Autodepurazione fluviale

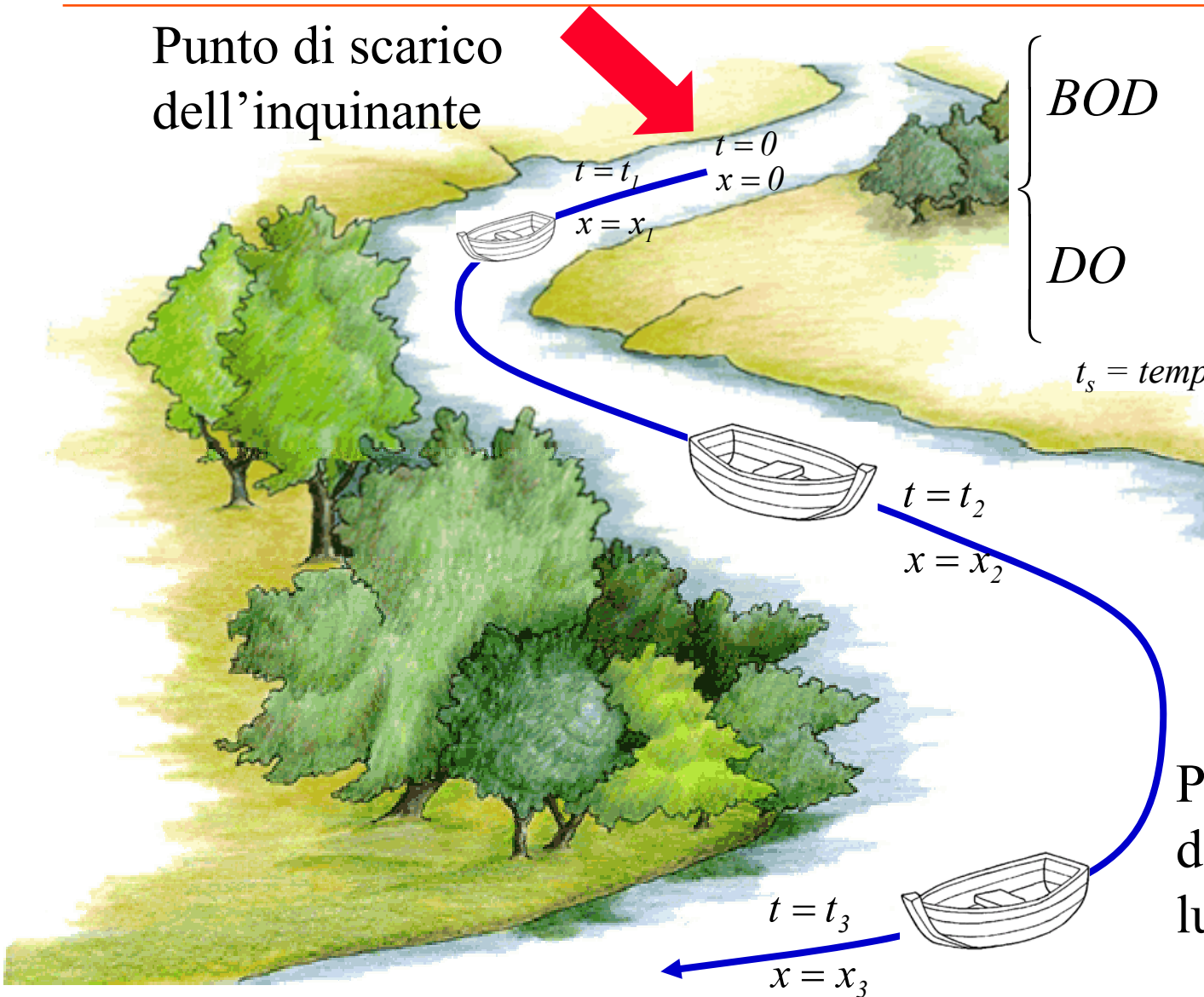
- ☞ Il fiume possiede dei meccanismi fisico-chimici di autodepurazione
 - ⇒ Il materiale inquinante biodegradabile (materia organica) viene ossidato fino a divenire materia inorganica innocua
 - ⇒ L'ossidazione (operata da vari micro organismi) avviene utilizzando l'ossigeno disciolto nell'acqua
 - ⇒ Il processo di autodepurazione crea un fabbisogno di ossigeno che la riossigenazione naturale non è sempre in grado di fornire
- ☞ Il modello (lineare) è composto da due variabili di stato
 - ⇒ La materia organica biodegradabile (BOD) → B
 - ⇒ L'ossigeno disciolto (DO) → C
- ☞ Nel modello compaiono due costanti
 - ⇒ La costante di *degradazione* della sostanza organica k_b
 - ⇒ La costante di *riossigenazione* naturale k_c
 - ⇒ Il tempo del modello rappresenta il *tempo di transito* dell'inquinante

Modello di Streeter & Phelps

- 👉 Il modello fu proposto inizialmente da Streeter & Phelps nel 1925 su commissione del governo dello stato dell'Ohio (USA)
- 👉 Lo scopo era dare una spiegazione alla diminuzione dell'ossigeno disciolto osservata a valle di un grosso insediamento urbano
 - ⇒ Apparentemente sembrava inspiegabile che il danno ambientale dovuto all'inquinamento (allora non esistevano depuratori) si producesse a valle e non nel punto di scarico
- 👉 Streeter & Phelps dimostrarono con il loro modello che la dinamica del sistema di autodepurazione fluviale produce i suoi effetti con un certo ritardo, dovuto a:
 - ⇒ La cinetica della degradazione dell'inquinante
 - ⇒ La velocità di scorrimento dell'acqua
- 👉 Il modello di Streeter & Phelps è ancora oggi alla base di tutti i modelli di qualità fluviale

Autodepurazione fluviale

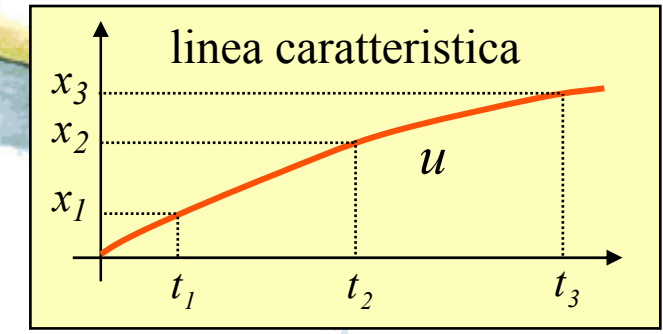
Punto di scarico dell'inquinante



$$\left\{ \begin{array}{l} \text{BOD} \quad \frac{dB}{dt_s} = -k_b B \\ \text{DO} \quad \frac{dC}{dt_s} = k_c (C_{sat} - C) - k_b B \end{array} \right.$$

degradazione inquinante
riossigenazione consumo

$t_s = \text{tempo di trasporto dell'acqua lungo il fiume}$



Percorso dell'inquinante lungo il fiume

Evoluzione della qualità a valle dello scarico

$$\left\{ \begin{array}{l} BOD \quad \frac{dB}{dt_s} = -k_b B \quad B(0) = B_o \\ DO \quad \frac{dC}{dt_s} = k_c (C_{sat} - C) - k_b B \quad C(0) = C_o \end{array} \right.$$

Supponendo che non ci siano altri ingressi (scarichi distribuiti) lungo il tratto a valle del punto di immissione dello scarico, si possono integrare le due equazioni con le condizioni iniziali specificate

Dalla prima si ottiene:

$$B(t_s) = B_o e^{-k_b t_s}$$

Integrazione della dinamica del DO

- Si trasforma la seconda equazione introducendo il deficit di ossigeno

$$D(t_s) = C_{sat} - C(t_s) \Rightarrow \frac{dD}{dt_s} = -\frac{dC}{dt_s}$$

- Si può scrivere la seconda equazione come

$$\frac{dD}{dt_s} = -k_c D + k_b B$$

- La soluzione generale di questa equazione, considerando $B(t_s)$ come ingresso forzante è

$$x(t_s) = x_o e^{At_s} + \int_0^{t_s} e^{A(t_s - \sigma)} \mathbf{b} u(\sigma) d\sigma$$

- Che in questo caso diventa

$$D(t_s) = D_o e^{-k_c t_s} + k_b \int_0^{t_s} e^{-k_c(t_s - \sigma)} B_o e^{-k_b \sigma} d\sigma$$

Sviluppando l'integrale di convoluzione

$$\begin{aligned} D(t_s) &= D_o e^{-k_c t_s} + k_b \int_0^{t_s} e^{-k_c(t_s - \sigma)} B_o e^{-k_b \sigma} d\sigma \\ &= D_o e^{-k_c t_s} + k_b B_o e^{-k_c t_s} \int_0^{t_s} e^{k_c \sigma} e^{-k_b \sigma} d\sigma \\ &= D_o e^{-k_c t_s} + k_b B_o e^{-k_c t_s} \int_0^{t_s} e^{(k_c - k_b) \sigma} d\sigma \\ &= D_o e^{-k_c t_s} + k_b B_o e^{-k_c t_s} \cdot \frac{1}{(k_c - k_b)} \cdot e^{(k_c - k_b) \sigma} \Big|_0^{t_s} \\ &= D_o e^{-k_c t_s} + k_b B_o e^{-k_c t_s} \cdot \frac{1}{(k_c - k_b)} \cdot \left[e^{(k_c - k_b) t_s} - 1 \right] \end{aligned}$$

Andamento del DO a valle dello scarico

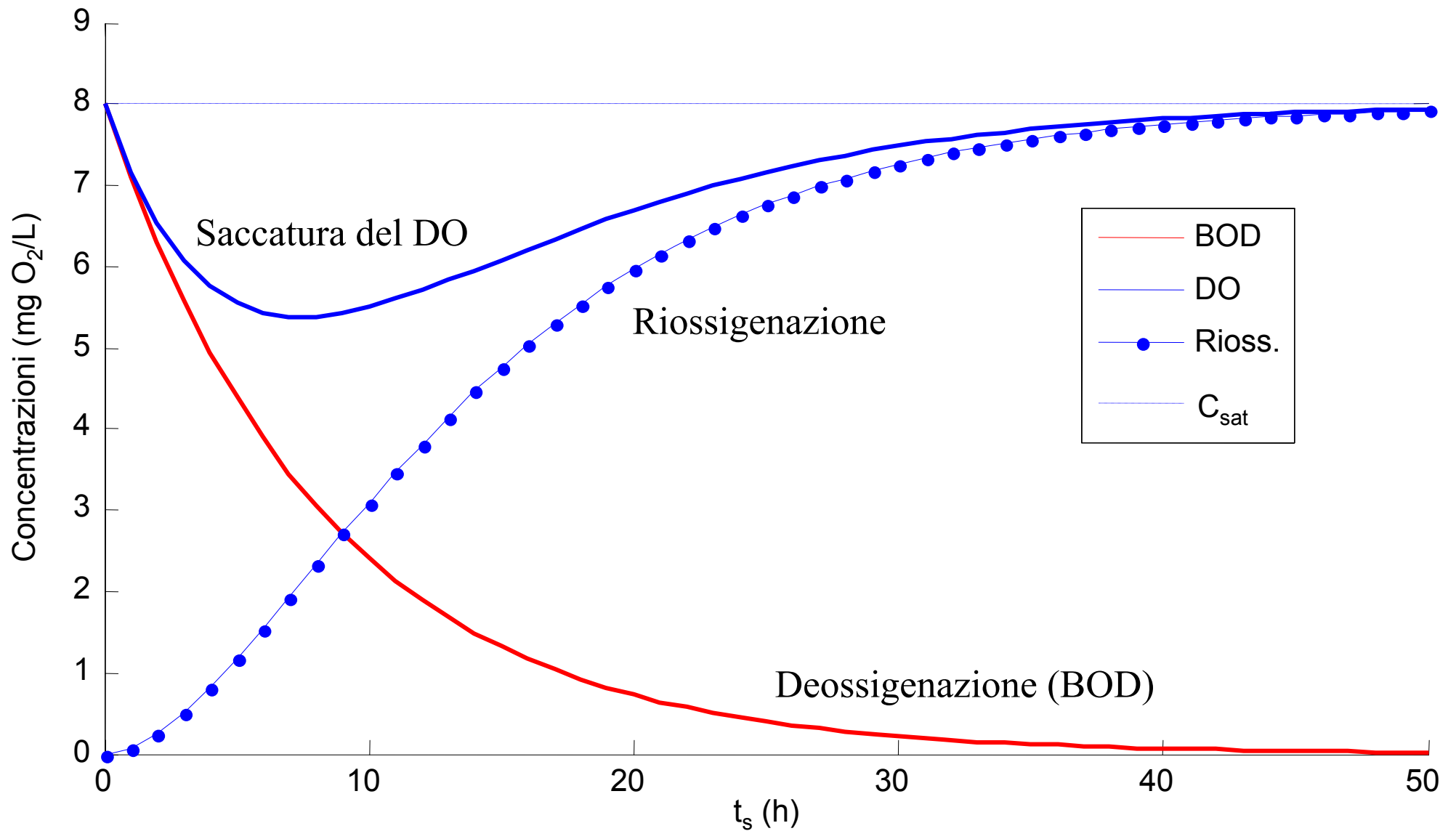
$$D(t_s) = D_o e^{-k_c t_s} + \frac{k_b B_o}{(k_c - k_b)} \cdot \left[e^{-k_b t_s} - e^{-k_c t_s} \right]$$

Sostituendo $D(t_s) = C_{sat} - C(t_s)$

$$C(t_s) = C_{sat} - (C_{sat} - C_o) e^{-k_c t_s} \quad \leftarrow \text{Effetto della condizione di DO a monte } C_o$$

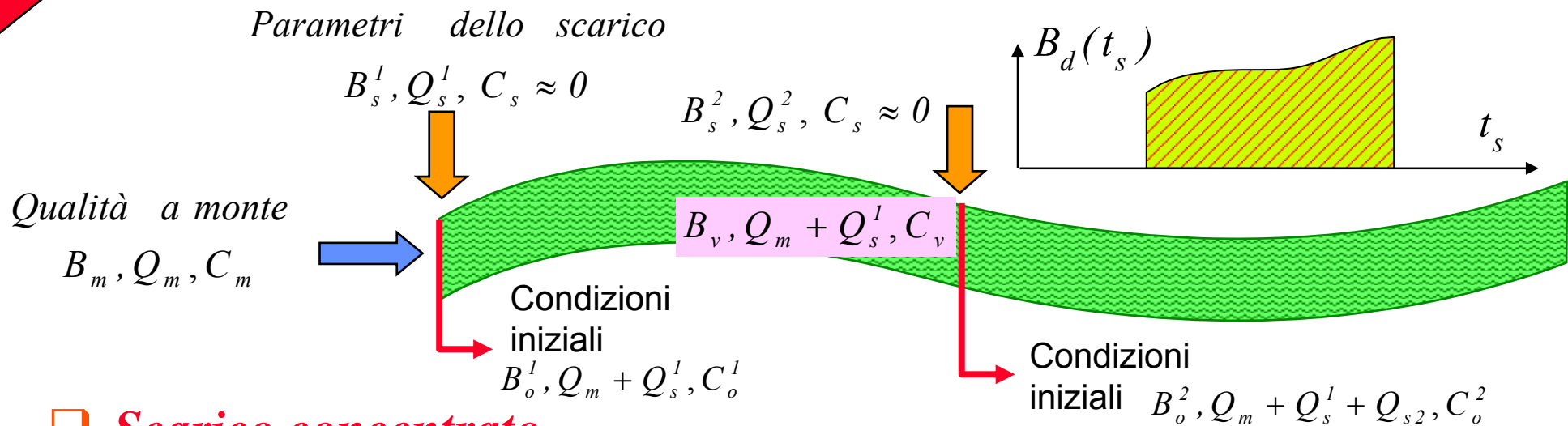
$$+ \frac{k_b B_o}{(k_c - k_b)} \cdot \left[e^{-k_c t_s} - e^{-k_b t_s} \right] \quad \leftarrow \text{Effetto del carico a monte } B_o$$

Andamento dell'autodepurazione nel tempo



NEW

Condizioni più generali di integrazione



□ Scarico concentrato

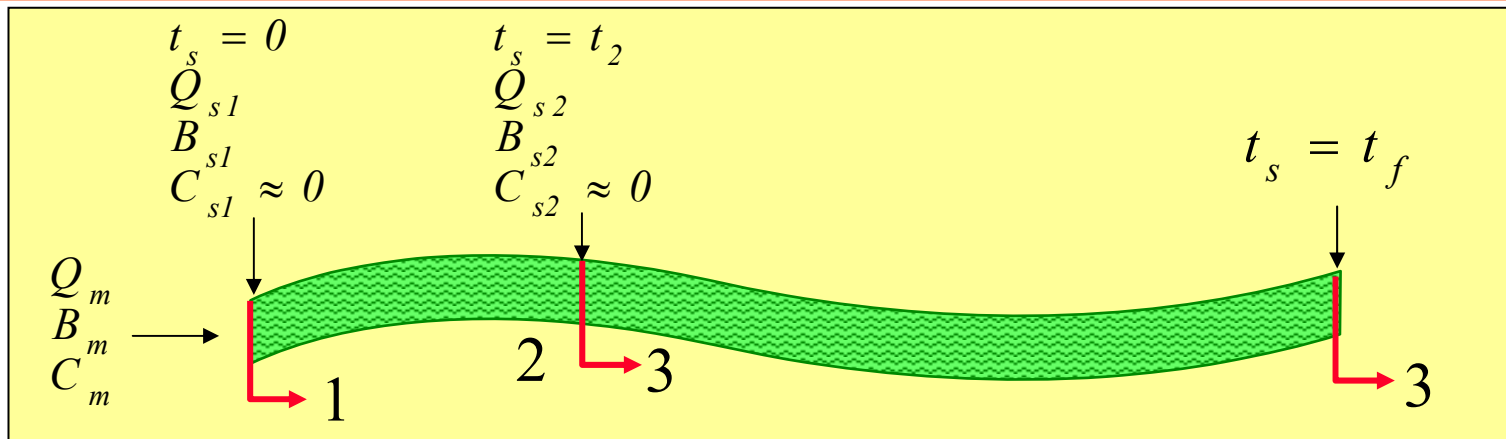
- ❖ si calcola la diluizione fra scarico e condizione a monte del punto di immissione
- ❖ si riprende l'integrazione con le nuove condizioni iniziali

□ Scarico distribuito

- ❖ Si aggiunge all'equazione del BOD un termine di ingresso pari al valore dello scarico (funzione del tempo di scorrimento t_s)

$$\frac{dB}{dt_s} = -K_b B + B_d(t_s)$$

Sistema con due scarichi concentrati



$$1 \quad B_1 = \frac{B_m Q_m + Q_{s1} B_{s1}}{Q_m + Q_{s1}} \quad C_1 = \frac{C_m Q_m}{Q_m + Q_{s1}}$$

**Prima
condizione iniziale**

$$2 \quad \begin{cases} B_2 = B_1 e^{-K_b t_2} \\ C_2 = C_{sat} - (C_{sat} - C_1) e^{-K_c t_2} + \frac{K_b B_1}{K_b - K_c} (e^{-K_b t_2} - e^{-K_c t_2}) \end{cases}$$

**Integrazione nel
primo tratto**

$$3 \quad B_3 = \frac{B_2 (Q_m + Q_{s1}) + Q_{s2} B_{s2}}{Q_m + Q_{s1} + Q_{s2}} \quad C_3 = \frac{C_2 (Q_m + Q_{s1})}{Q_m + Q_{s1} + Q_{s2}}$$

**Seconda
condizione iniziale**

$$4 \quad \begin{cases} B_4 = B_3 e^{-K_b (t_f - t_2)} \\ C_4 = C_{sat} - (C_{sat} - C_3) e^{-K_c (t_f - t_2)} + \frac{K_b B_3}{K_b - K_c} (e^{-K_b (t_f - t_2)} - e^{-K_c (t_f - t_2)}) \end{cases}$$

**Integrazione nel
secondo tratto**

NEW

Esempio di simulazione a due tratti

Condizioni di carico a monte

Condizione iniziale di BOD a monte [mg/l]
3

Condizione iniziale di DO a monte [mg/l]
8

Portata a monte [m³/s]
5

Portata dello scarico [m³/s]
0.25

BOD dello scarico [mg/l]
40

Cancel

Parametri del sistema fluviale

Kb costante di decadimento del BOD [1/h]
0.12

Kc costante di riossigenazione [1/h]
0.15

Lunghezza del tratto [h]
60

Punto del secondo scarico [h]
25

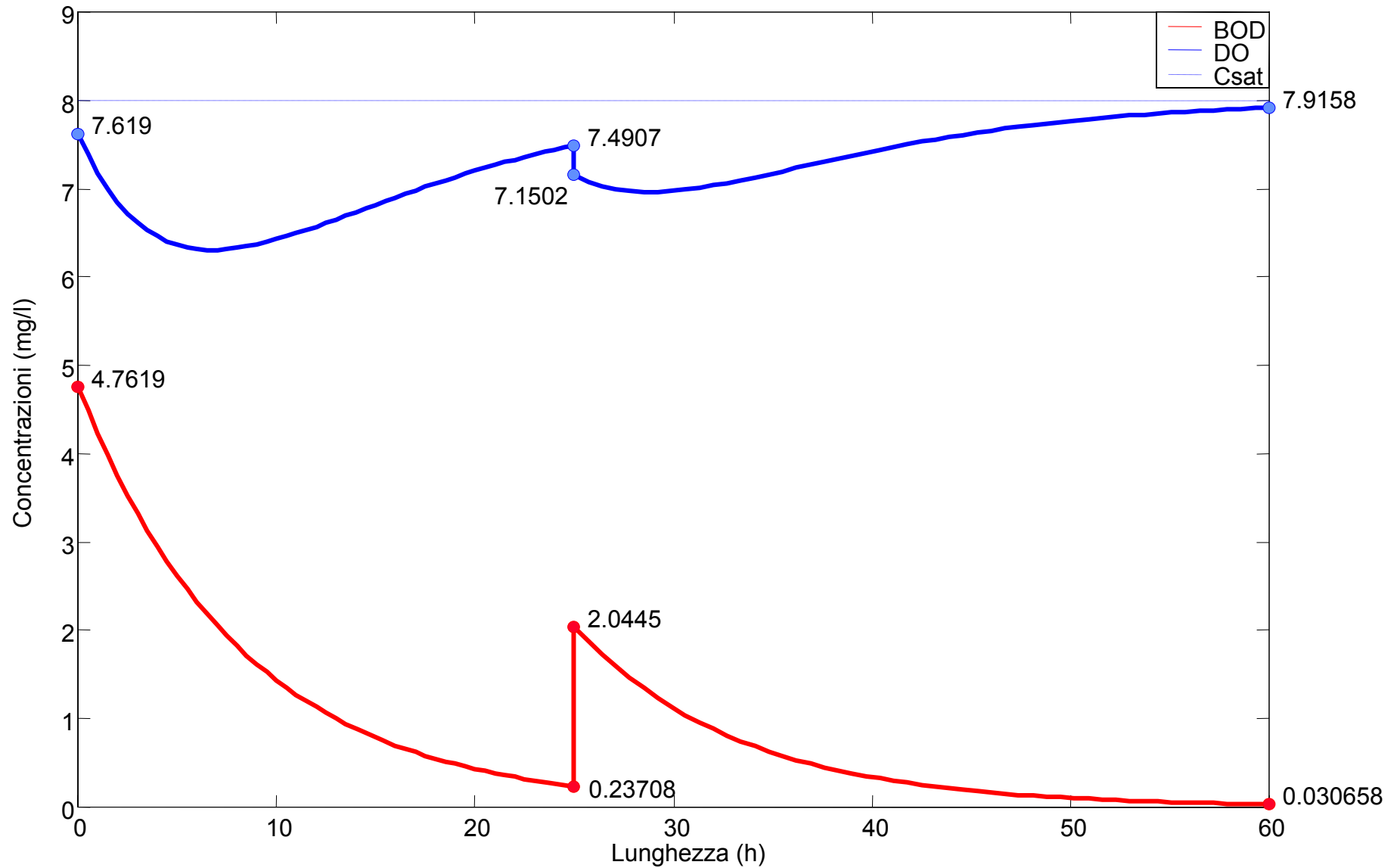
Portata del secondo scarico [m³/s]
0.25

BOD del secondo scarico [mg/l]
40

Cancel OK

NEW

Risposta del modello



NEW

Simulazione del BOD distribuito

Definizione del sistema fluviale

Condizione iniziale di BOD a monte (mg/l)
3.0

Condizione iniziale di DO a monte (mg/l)
8.0

Portata del fiume (m3/s)
10.0

Portata dello scarico (m3/s)
0.1

BOD dello scarico (mg/l)
40

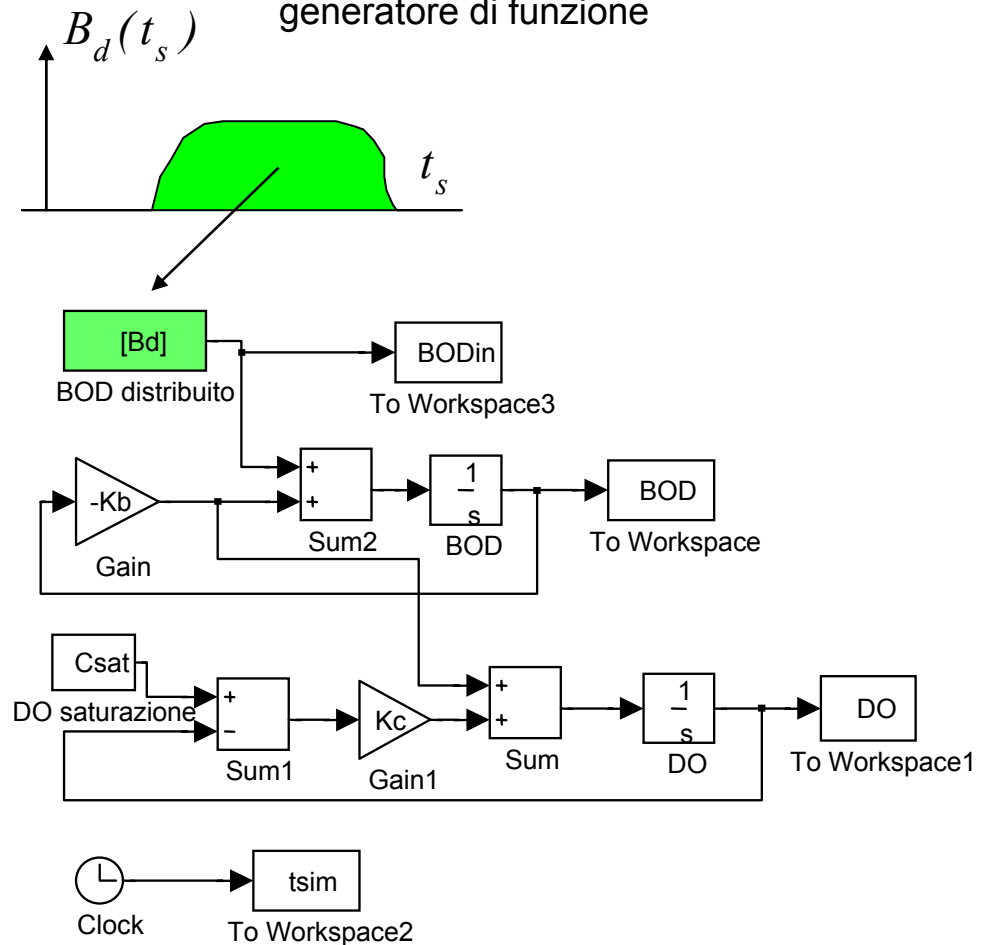
Kb costante di decadimento del BOD (1/h)
0.2

Kc costante di riossigenazione (1/h)
0.12

Tempo di scorrimento del tratto (h)
40

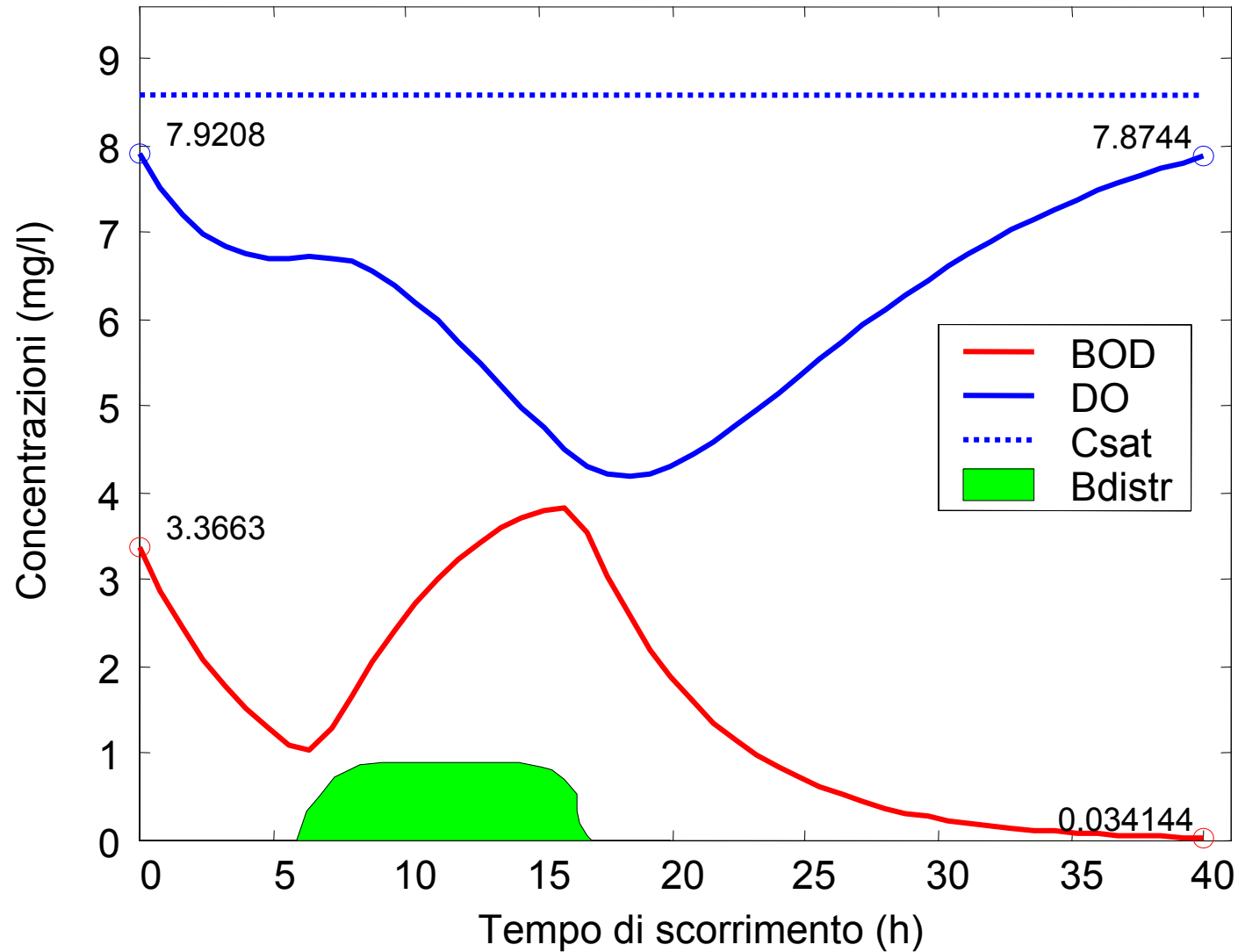
Cancel OK

Si aggiunge il termine di BOD distribuito come ingresso esterno, disponibile come file dati preparato in precedenza o come generatore di funzione



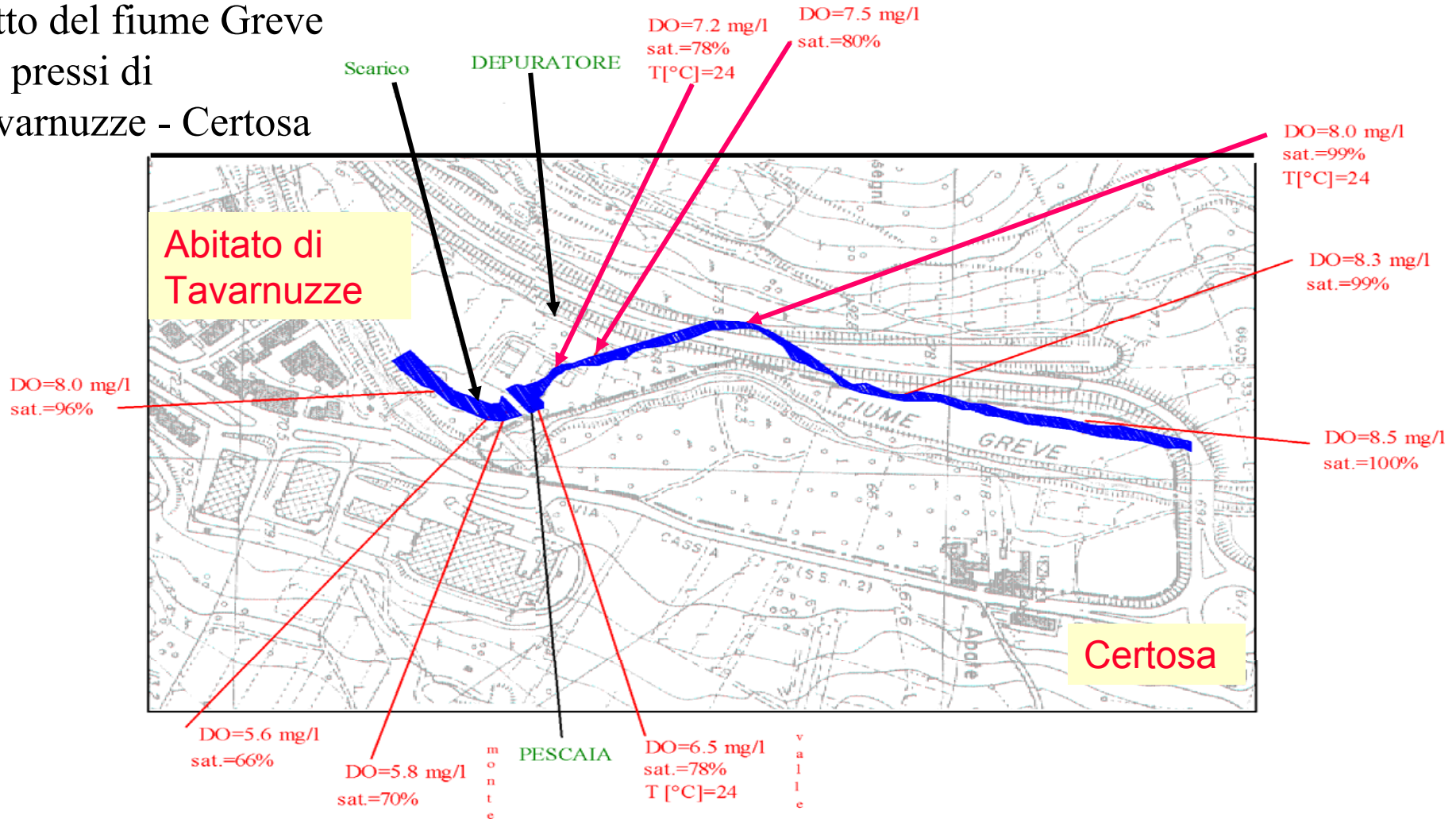
NEW

Simulazione con BOD distribuito



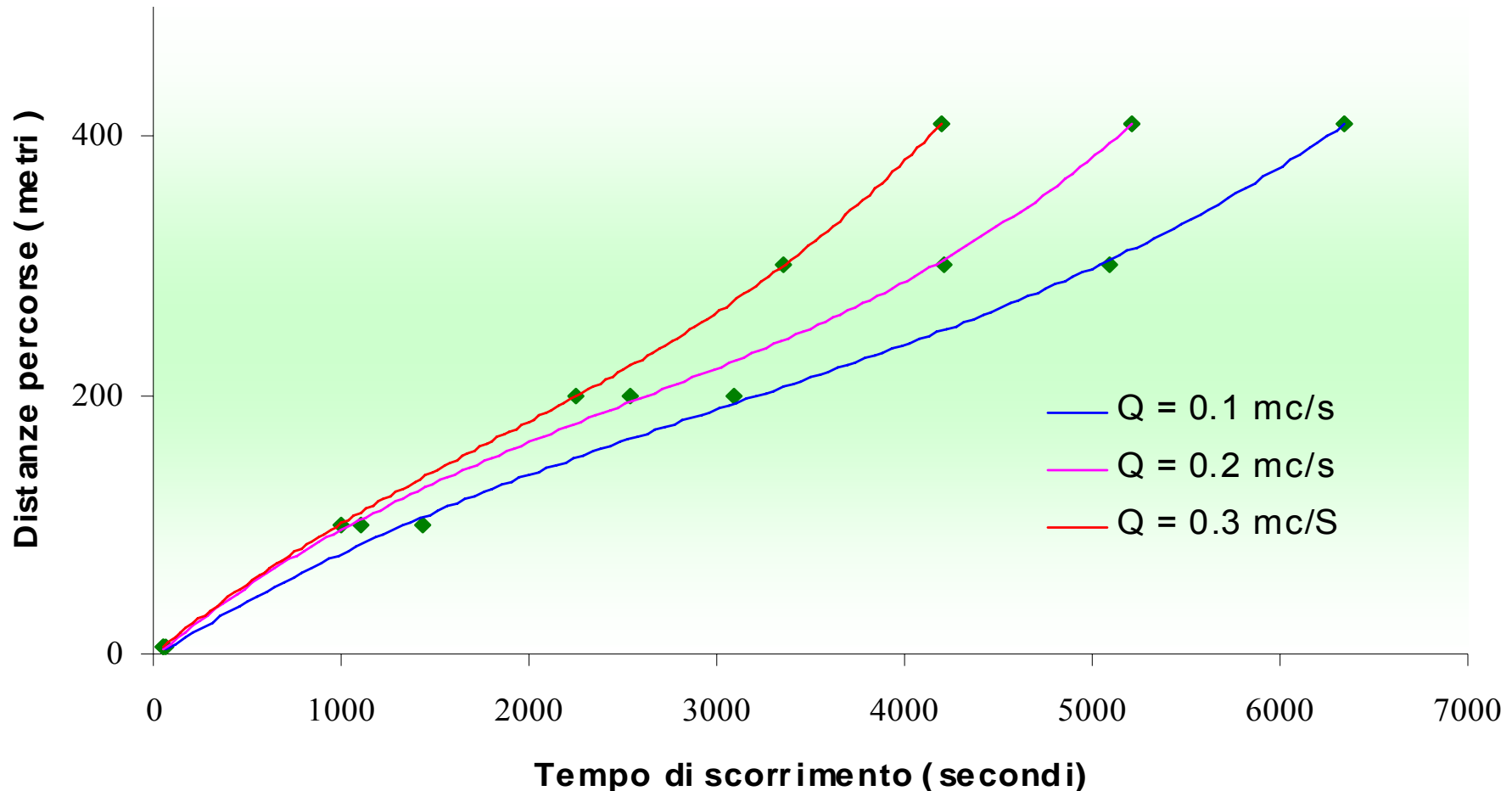
Applicazione del modello di Streeter & Phelps

Studio di caso: un tratto del fiume Greve nei pressi di Tavarnuzze - Certosa



Idrodinamica del tratto: Linee caratteristiche

Linee caratteristiche per diversi valori di portata



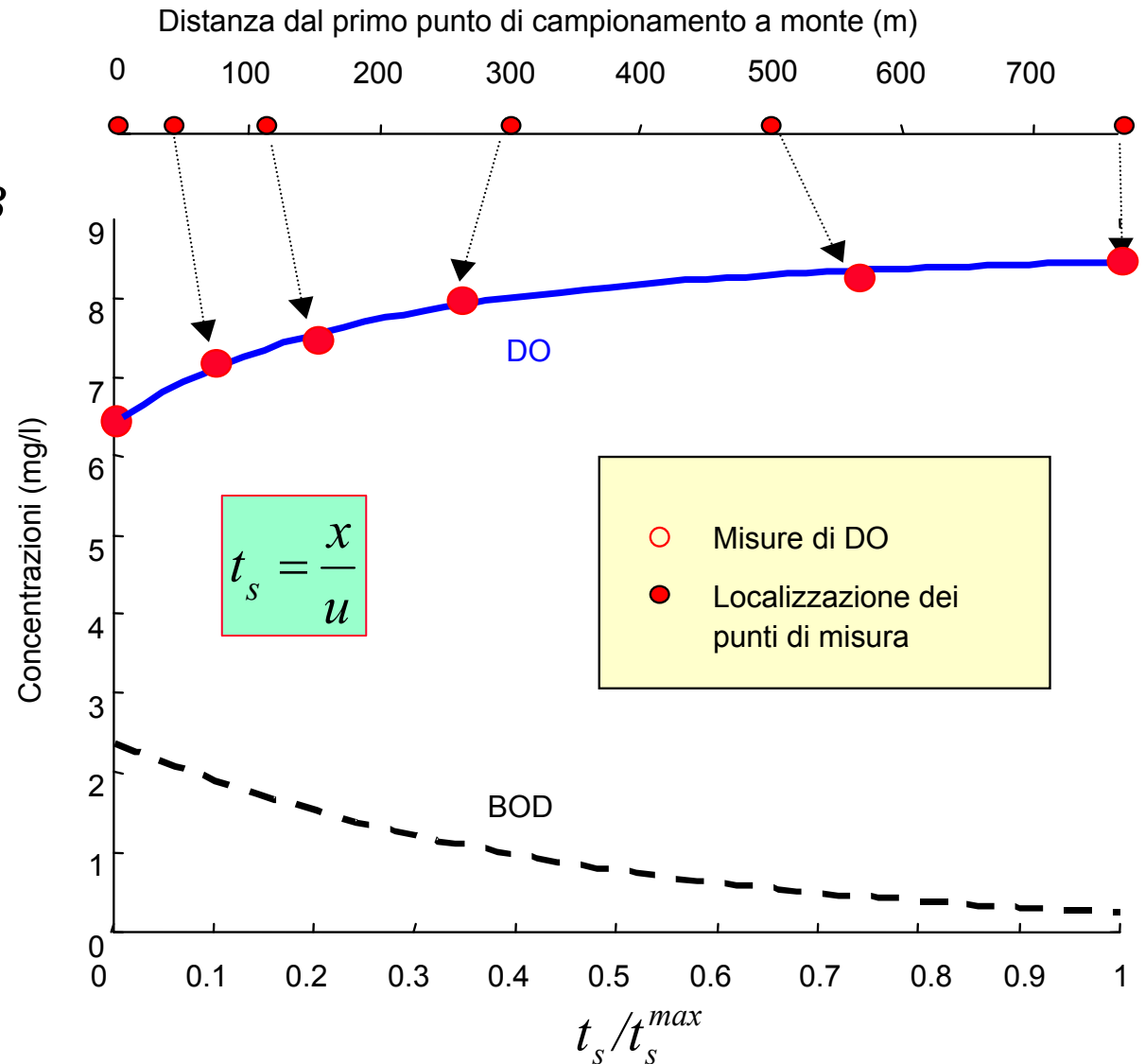
Linee caratteristiche del fiume Greve per i più frequenti valori di portata, ottenute da misure correntometriche e simulazione numerica con il software di modellazione idrologica Hec-Ras.

Modello S&P in flow-time

$$\left\{ \begin{array}{l} BOD \quad \frac{dB}{dt_s} = -k_b B \\ DO \quad \frac{dC}{dt_s} = k_c (C_{sat} - C) - k_b B \end{array} \right.$$

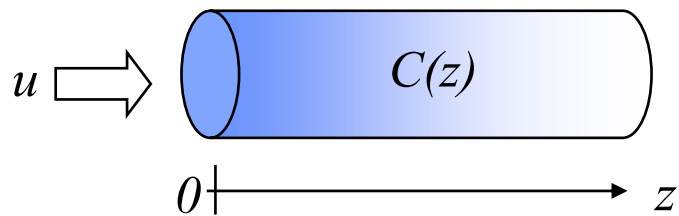
Le misure sono state effettuate tenendo conto della distanza dal punto di riferimento a monte.

Sono state poi riportate nel tempo di scorrimento t_s attraverso la **linea caratteristica** relativa alla portata esistente al momento delle misure ($Q = 0.1 \text{ m}^3/\text{s}$) e normalizzate al valore t_s^{max} massimo



Analisi della diffusione

- La diffusione di una sostanza disciolta all'interno di un tubo di flusso è descritta dall'equazione di secondo ordine



$$\frac{d^2 C}{dz^2} = \frac{u}{D} \cdot \frac{dC}{dz} + \frac{k}{D} \cdot C$$

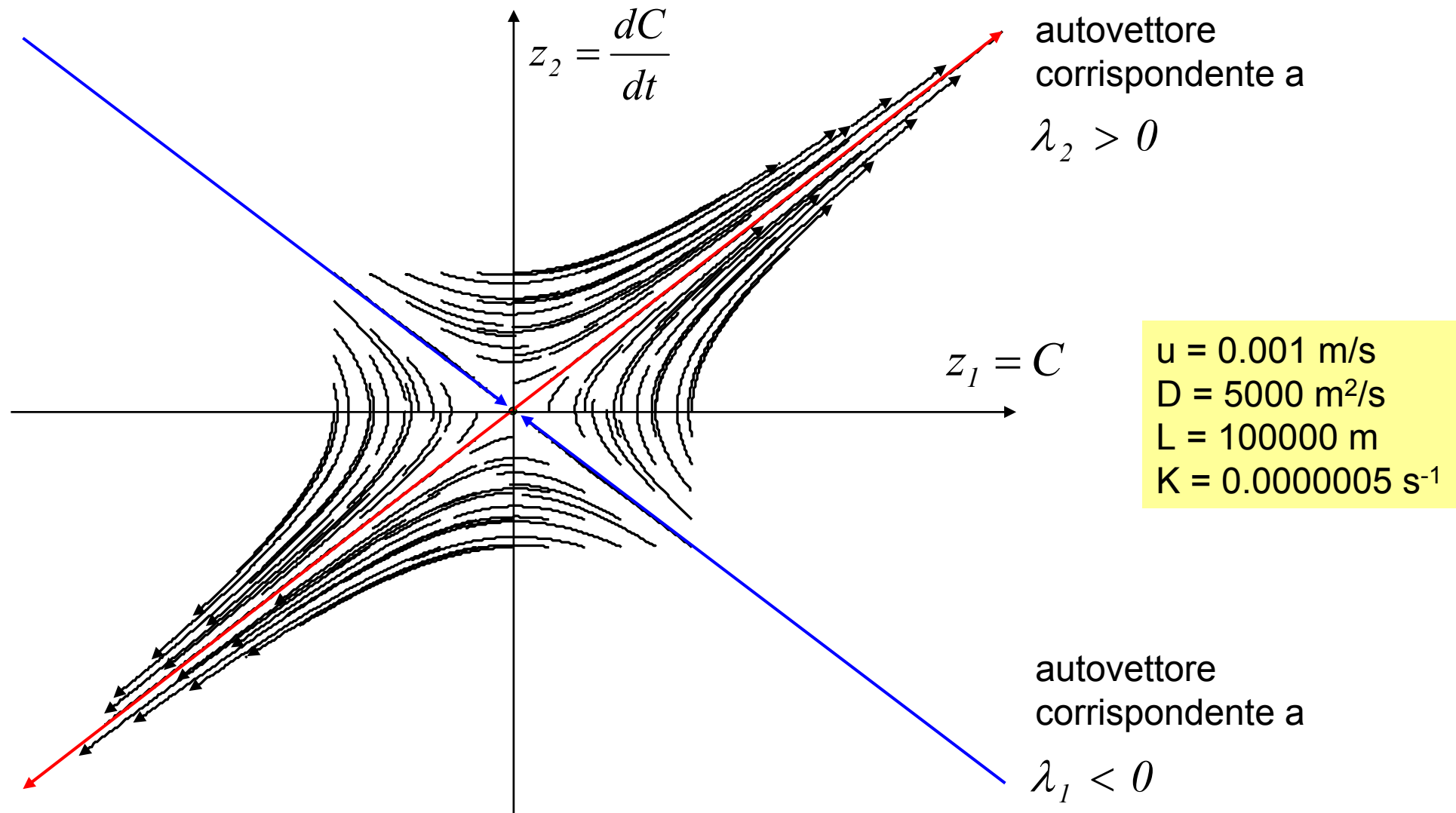
- può essere trasformata in un sistema di stato in forma canonica controllabile scegliendo come variabili di stato la concentrazione e la sua derivata, ottenendo così il sistema

$$\begin{aligned} z_1 &= C \\ z_2 &= \frac{dC}{dz} \end{aligned} \quad \begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{L^2 k}{D} & \frac{uL}{D} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad \lambda = \frac{\frac{uL}{D} \pm \sqrt{\left(\frac{uL}{D}\right)^2 + 4 \frac{kL}{D}}}{2}$$

- Il cui unico punto di equilibrio $[0 \ 0]^T$ è una sella, essendo i due autovalori reali e di segno opposto.

$$\lambda_1 < 0 \quad \& \quad \lambda_2 > 0$$

Traiettorie nel piano di fase

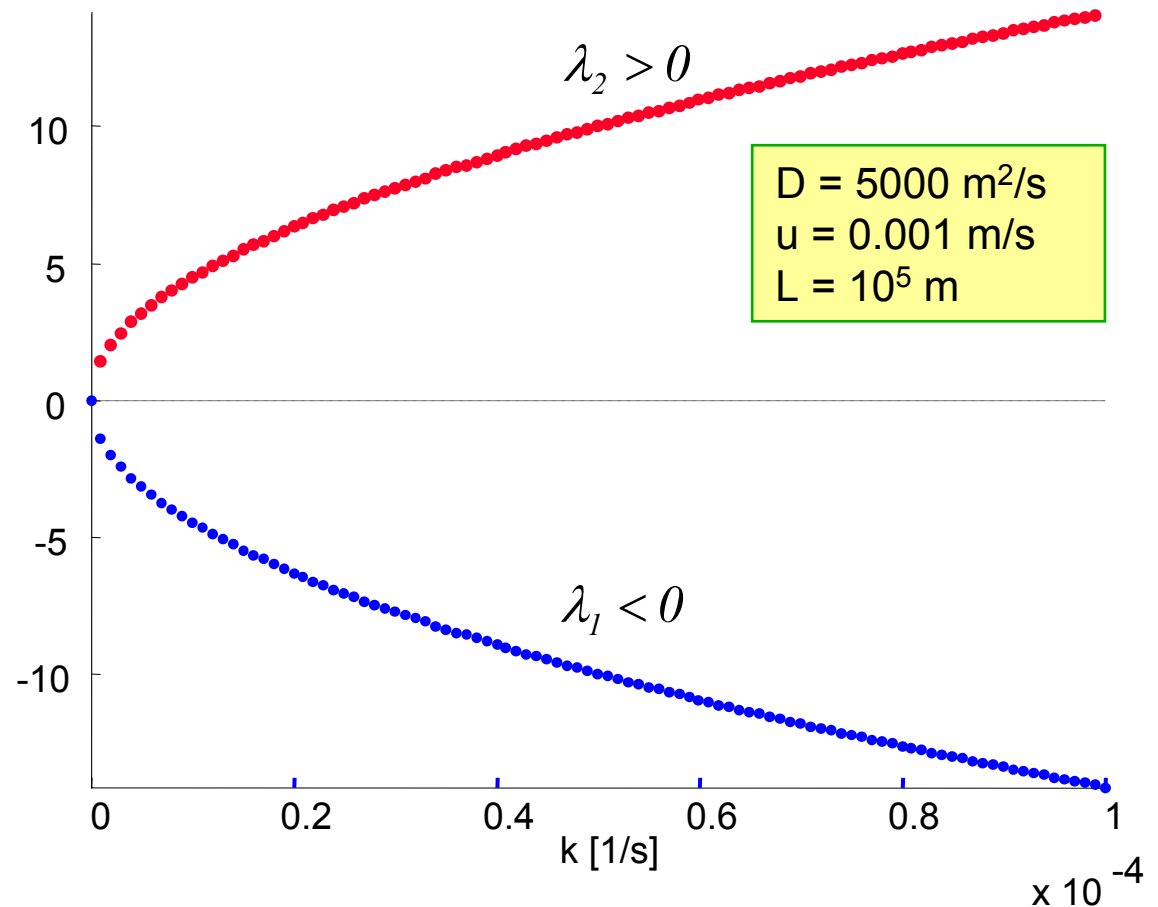


Comportamento degli autovalori con la cinetica

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

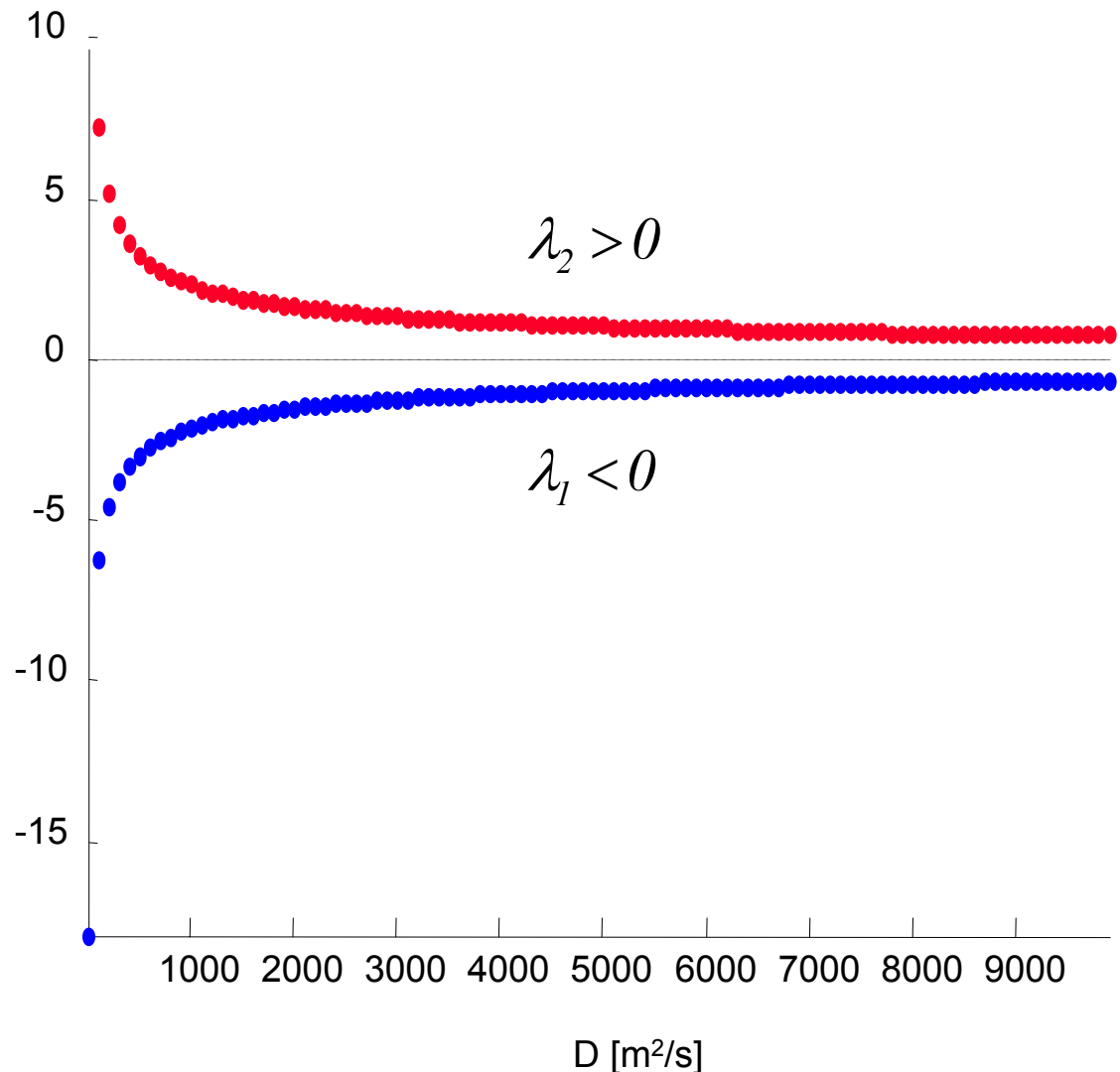
$$\lambda_1 = \frac{uL}{D} \quad \& \quad \lambda_2 = 0$$

- All'aumentare della cinetica aumenta la distanza tra i due autovalori che divergono in valore, con segno opposto.
- L'autovalore positivo è quindi dominante e rende instabile il sistema.



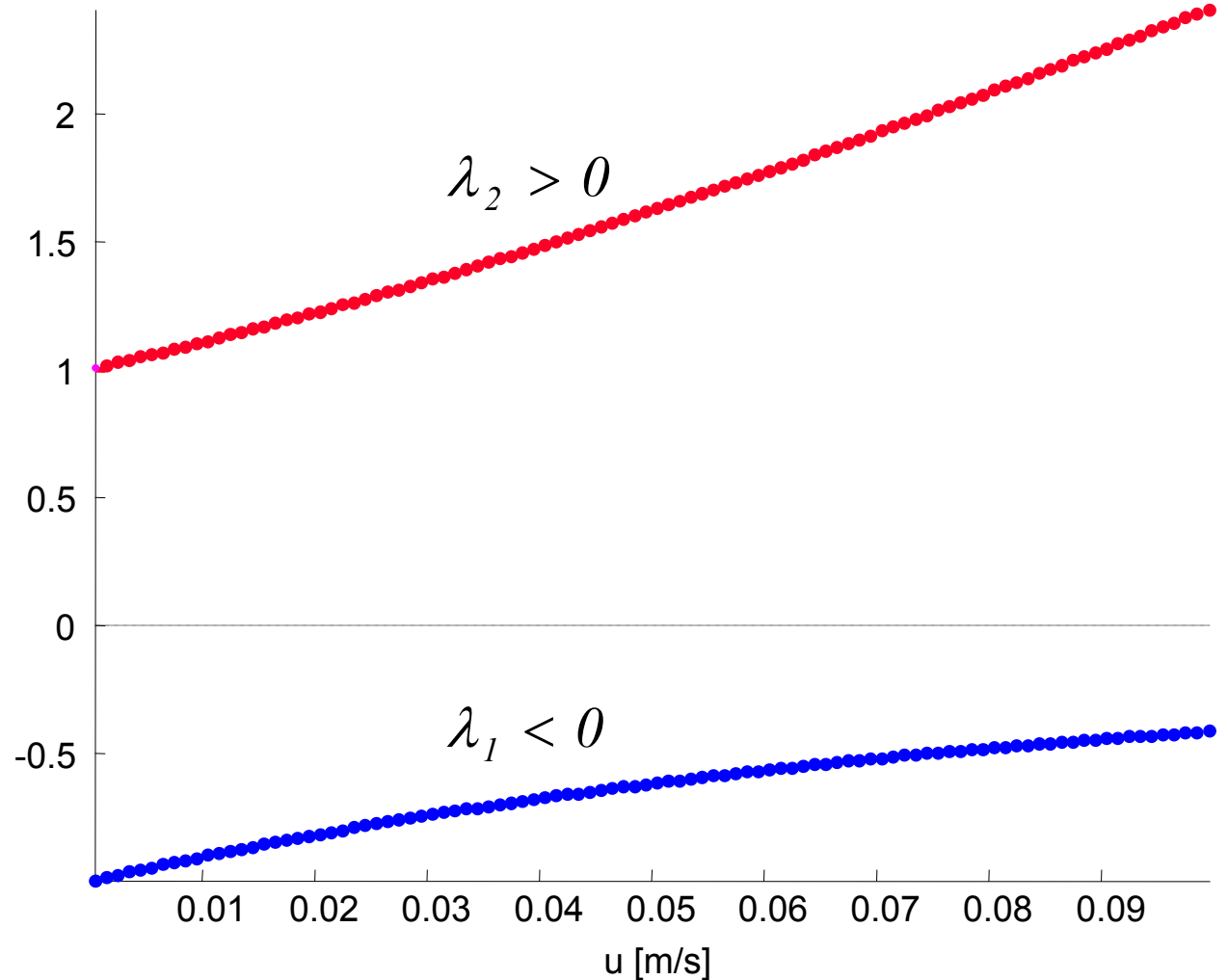
Comportamento degli autovalori con la diffusività

- ❑ Per valori relativamente bassi del coefficiente di diffusività D i due autovalori sono molto distanti e quindi il positivo è fortemente dominante, rendendo praticamente inutilizzabile l'equazione.
- ❑ Al crescere della diffusione diminuisce il valore assoluto di entrambi gli autovalori, che tendono a zero.
- ❑ Perciò l'aumento della diffusività rende il sistema meno "intrattabile"

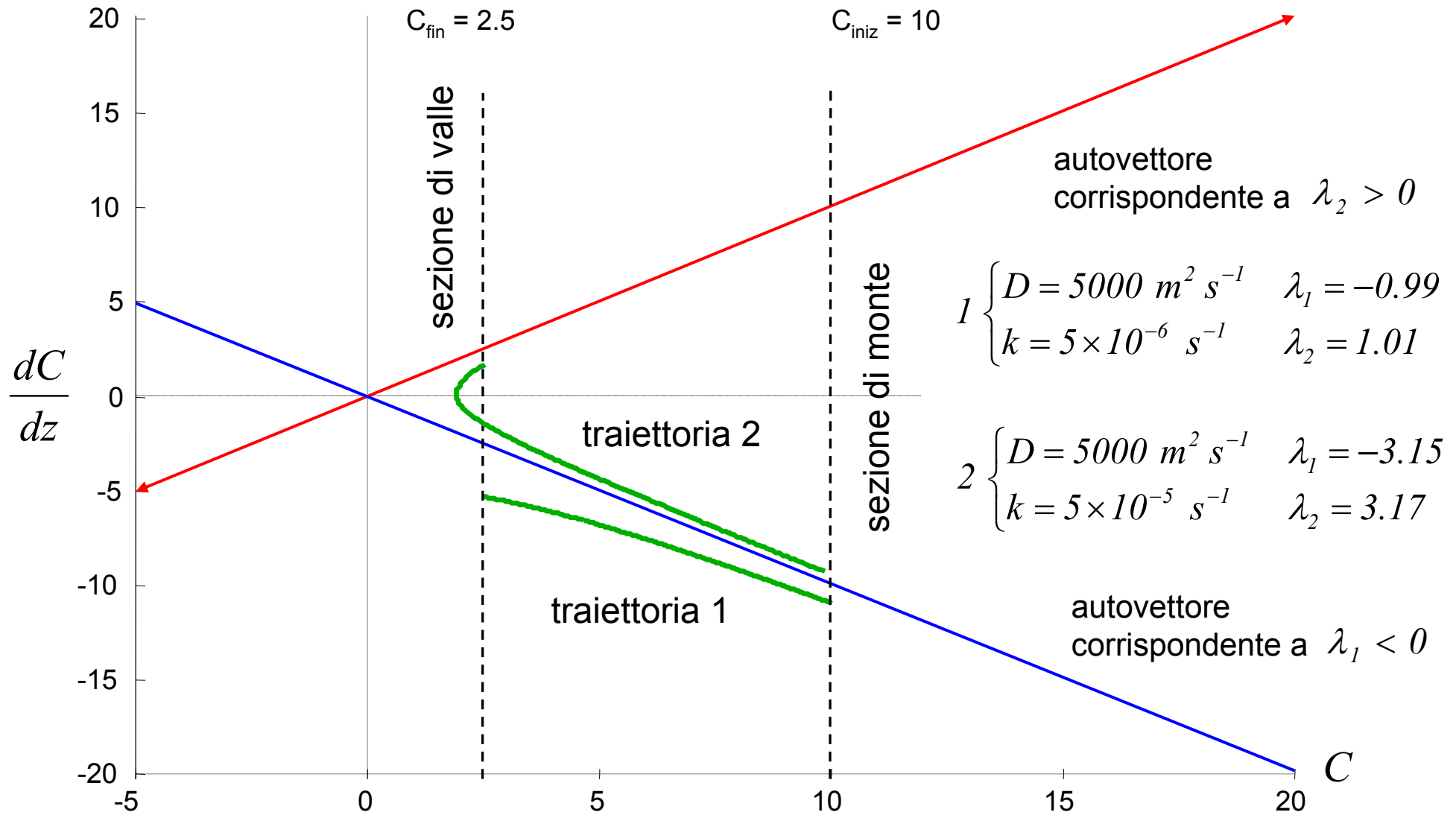


Comportamento degli autovalori con la velocità

- Al crescere della velocità l'autovalore positivo cresce in valore assoluto, mentre il negativo tende a zero.
- La velocità risulta quindi un parametro che crescendo influisce negativamente sulla stabilità dell'equazione diffusiva stazionaria.

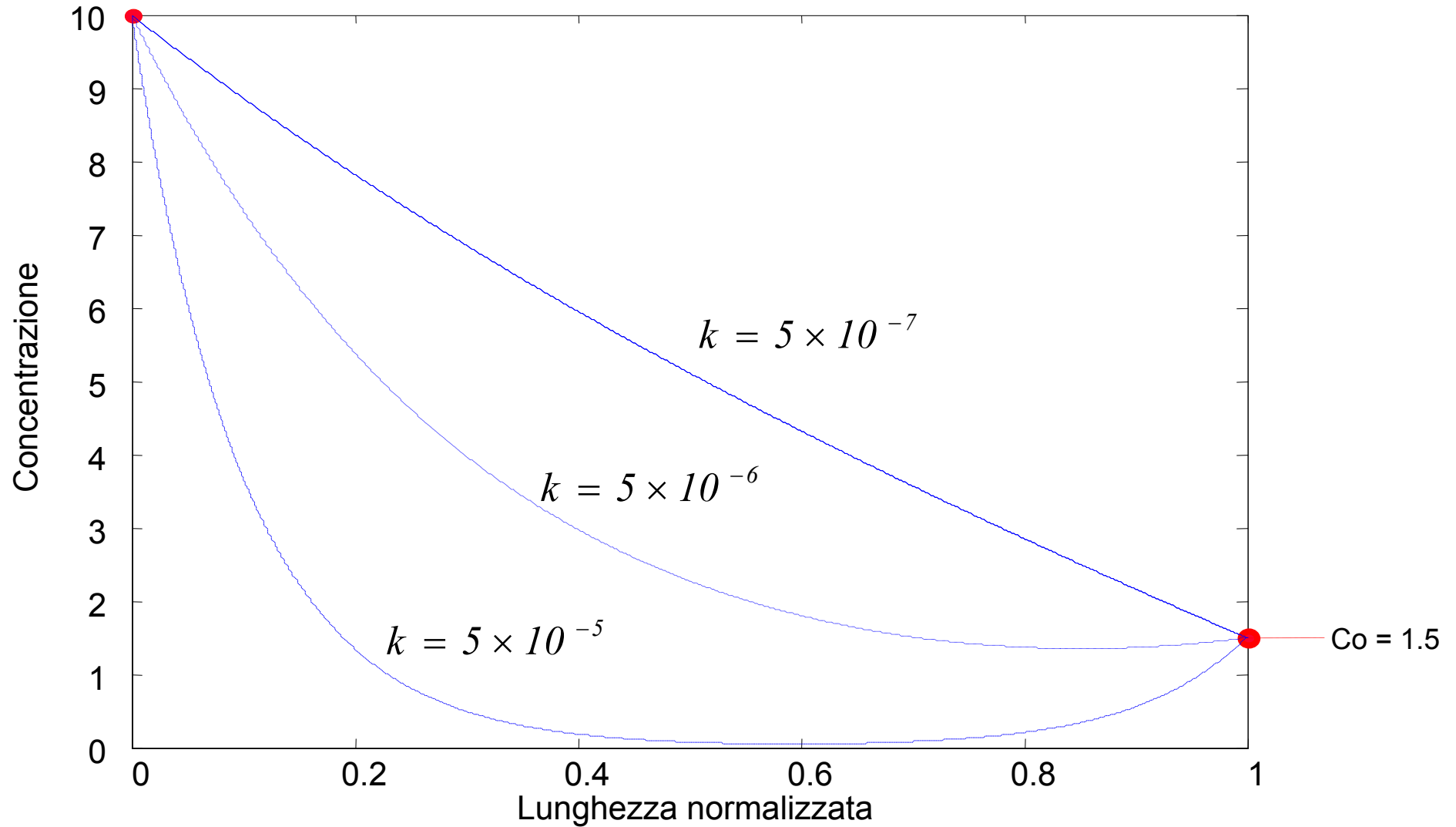


Variazione delle traiettorie in funzione della cinetica



NEW

Andamento nel tempo al variare della cinetica

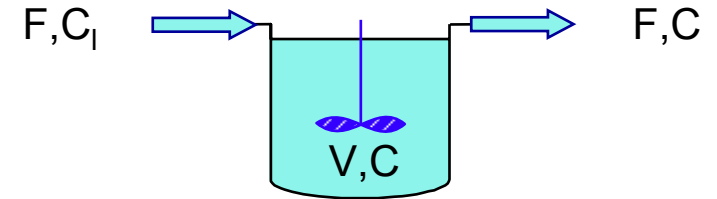


CSTR a volume costante

□ Se il volume è mantenuto costante il bilancio totale di massa si riduce a $F_i = F_o = F$

□ Il bilancio di massa per la componente disciolta (C) diventa

$$V \frac{dC}{dt} = FC_i - FC + Vf(C)$$



□ che diviene, dividendo per V

$$\frac{dC}{dt} = \frac{F}{V} C_i - \frac{F}{V} C + f(C) = \overset{\text{ingresso}}{\downarrow} q C_i - \overset{\text{uscita}}{\downarrow} q C + \overset{\text{cinetica}}{\downarrow} f(C)$$

□ Avendo definito $q = F/V =$ rateo di diluizione ed il suo reciproco

$$\mathcal{G} = \frac{V}{F} = \frac{1}{q} = \text{tempo di ritenzione}$$

Ambienti di reazione a mescolamento completo

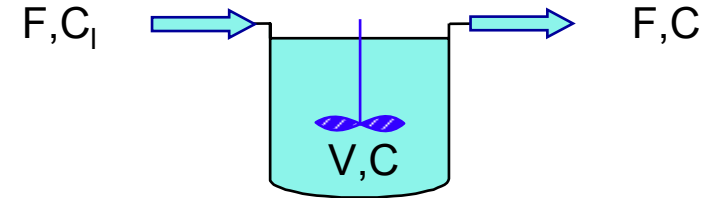
□ Un recipiente (artificiale o naturale) completamente mescolato con un ricambio continuo di liquido ed in cui avvengono reazioni chimiche viene detto **CSTR** (*Continuous Stirred Tank Reactor*)

- Costituiscono il modello di riferimento per molti sistemi artificiali o naturali dove avvengono reazioni chimiche
- Esempi:
- Reattori industriali
- Depuratori
- Corsi d'acqua
- Laghi e bacini



CSTR a volume costante

- Se il volume è mantenuto costante il bilancio totale di massa si riduce a $F_i = F_o = F$



- Il bilancio di massa per la componente disciolta (C) diventa

$$V \frac{dC}{dt} = FC_i - FC + Vf(C)$$

- che diviene, dividendo per V

$$\frac{dC}{dt} = \frac{F}{V} C_i - \frac{F}{V} C + f(C) = \overset{\text{ingresso}}{\downarrow} qC_i - \overset{\text{uscita}}{\downarrow} qC + \overset{\text{cinetica}}{\downarrow} f(C)$$

- Avendo definito $q = F/V =$ rateo di diluizione ed il suo reciproco

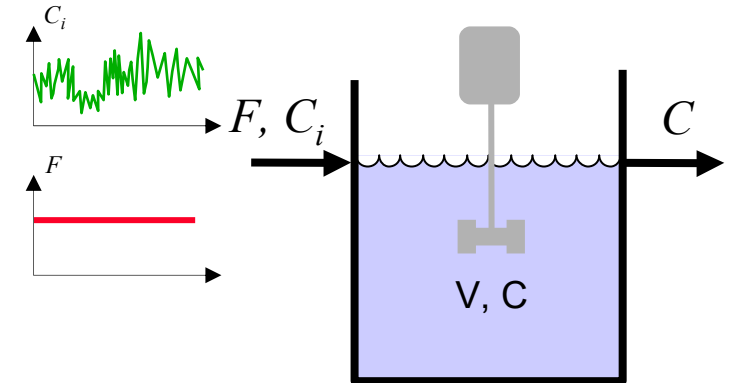
$$\vartheta = \frac{V}{F} = \frac{1}{q} = \text{tempo di ritenzione}$$

Quale ingresso per il CSTR?

Concentrazione

- Sistemi naturali, per i quali la variazione di C_i è la grandezza primaria
- Talvolta può essere associata a variazioni di portata
- Se la portata è costante, si ha un sistema *lineare*

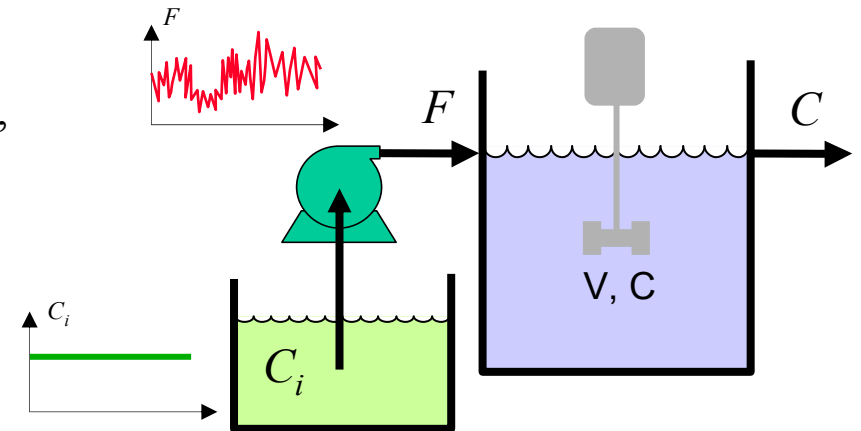
$$\frac{dC}{dt} = -\left(\frac{F}{V} + k\right)C + \frac{F}{V}C_i$$



Portata

- Processi di depurazione
- Generalmente la portata è la variabile primaria, mentre la variazione di concentrazione può essere vista come un disturbo

$$\frac{dC}{dt} = \left(\frac{C_i - C}{V}\right)F - kC$$



Dinamica del CSTR con ingresso in portata

- Se la variabile di ingresso è la portata F anziché dalla concentrazione di ingresso, il sistema è **nonlineare e tempo-variante** perché l'ingresso F entra nel sistema in modo moltiplicativo rispetto allo stato C .

In questo caso la portata F è la variabile di controllo

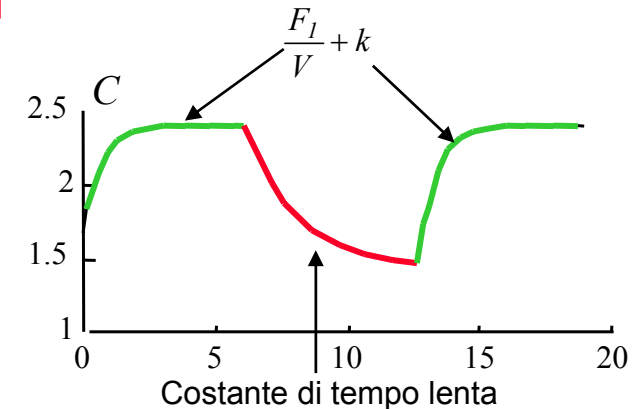
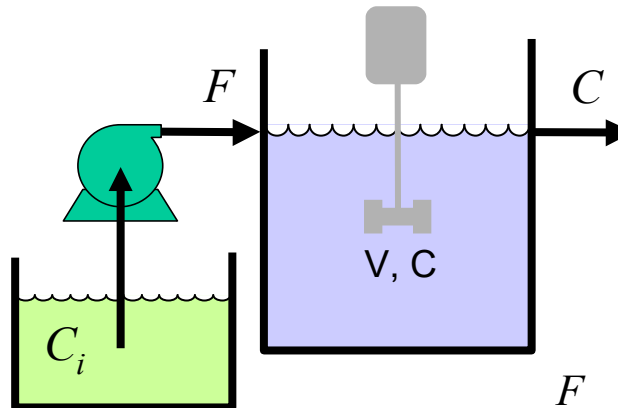
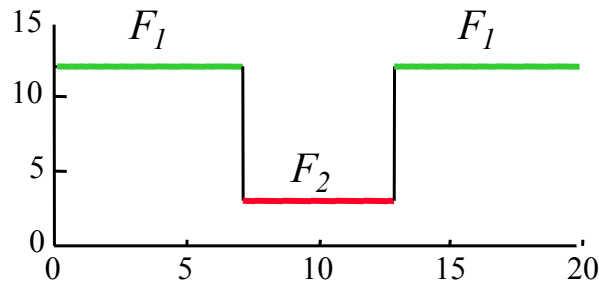
$$\frac{dC}{dt} = \frac{F}{V} C_i - \frac{F}{V} C - kC$$

ingresso
stato

Comportamento
Asimmetrico



Costante di tempo veloce

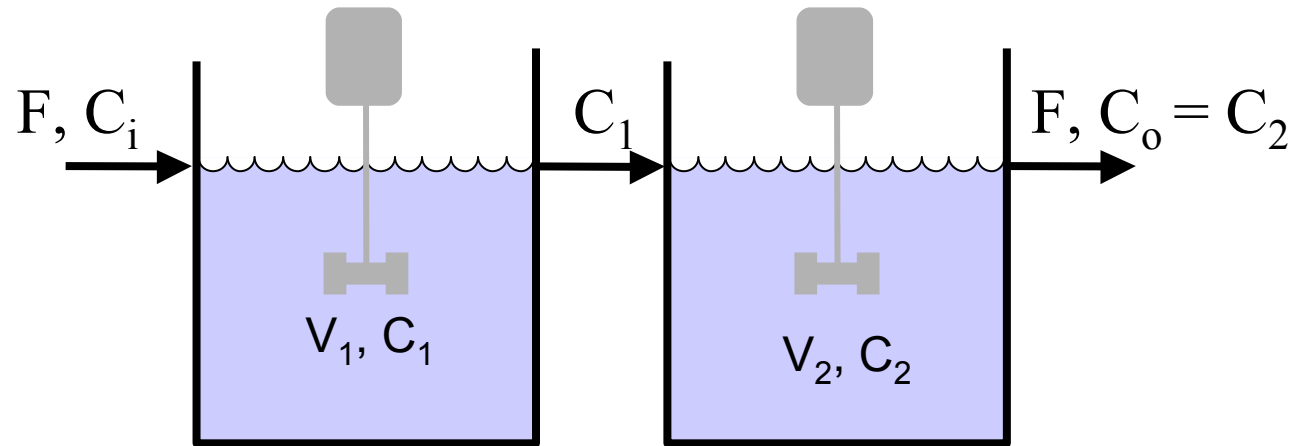


- A regime C dipende sia dalla portata che dalla cinetica

$$\bar{C} = \frac{\frac{F}{V}}{\frac{F}{V} + k} C_i$$

2 CSTR in serie con cinetica del primo ordine

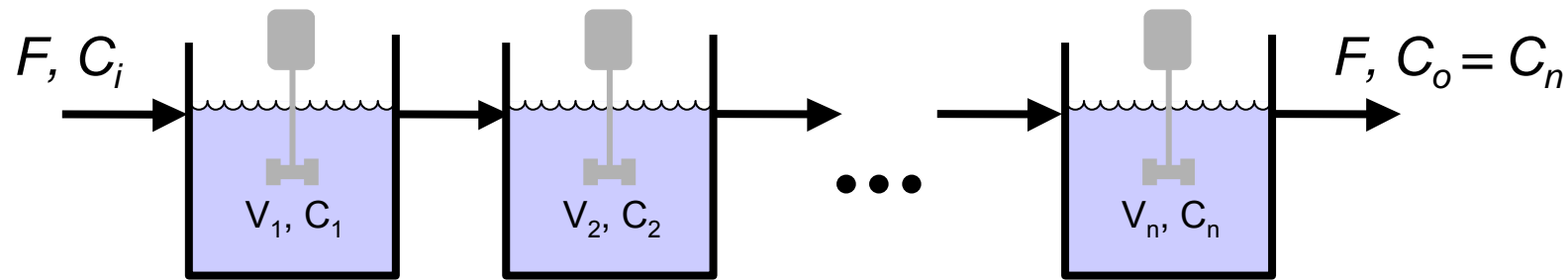
Considerando
come ingresso la
concentrazione C_i
si ha un sistema
lineare



$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{dt} &= \frac{F}{V_1} C_i - \frac{F}{V_1} C_1 - kC_1 \\ \frac{dC_2}{dt} &= \frac{F}{V_2} C_1 - \frac{F}{V_2} C_2 - kC_2 \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{F}{V_1} - k & 0 \\ \frac{F}{V_2} & -\frac{F}{V_2} - k \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{F}{V_1} \\ 0 \end{bmatrix} C_i$$

$$\lambda_1 = -\frac{F}{V_1} - k \quad \lambda_2 = -\frac{F}{V_2} - k \quad \lambda_1, \lambda_2 < 0$$

n CSTR in serie



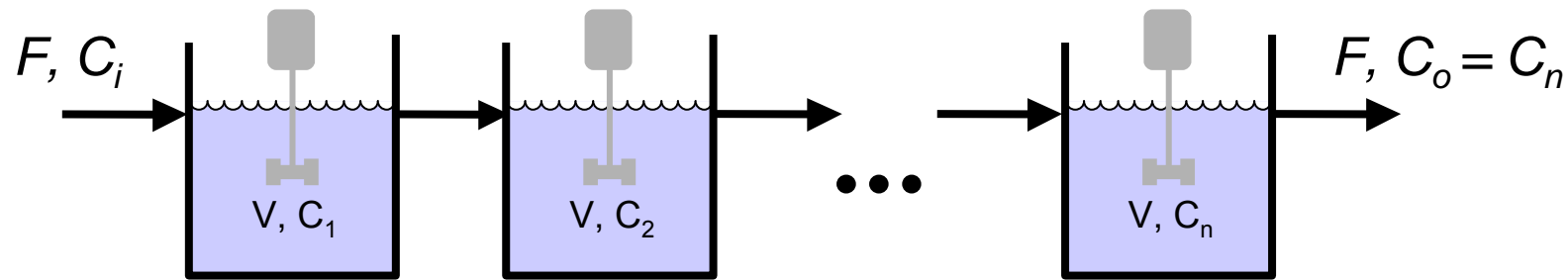
$$\begin{aligned}
 \frac{dC_1}{dt} &= \frac{F}{V_1} C_i - \frac{F}{V_1} C_1 - kC_1 \\
 \frac{dC_2}{dt} &= \frac{F}{V_2} C_1 - \frac{F}{V_2} C_2 - kC_2 \\
 &\dots\dots\dots \\
 \frac{dC_n}{dt} &= \frac{F}{V_n} C_{n-1} - \frac{F}{V_n} C_n - kC_n
 \end{aligned}
 \quad \Rightarrow \quad
 \begin{bmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \dots \\ \dot{C}_n \end{bmatrix} =
 \begin{bmatrix} -\frac{F}{V_1} - k & 0 & \dots & 0 \\ \frac{F}{V_2} & -\frac{F}{V_2} - k & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{F}{V_n} & -\frac{F}{V_n} - k \end{bmatrix} \times
 \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \end{bmatrix} +
 \begin{bmatrix} \frac{F}{V_1} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} C_i$$

Solamente la diagonale e la sotto-diagonale contengono elementi non nulli,
perciò gli autovalori coincidono con gli elementi diagonali

$$\lambda_1 = -\frac{F}{V_1} - k \quad \lambda_2 = -\frac{F}{V_2} - k \quad \lambda_n = -\frac{F}{V_n} - k \quad \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n < 0$$

NEW

n CSTR in serie



Se la cinetica è nulla (tracciante inerte) e i volumi sono tutti uguali, il sistema è formalmente uguale al modello di bacino idrografico di Nash, con $k=F/V$

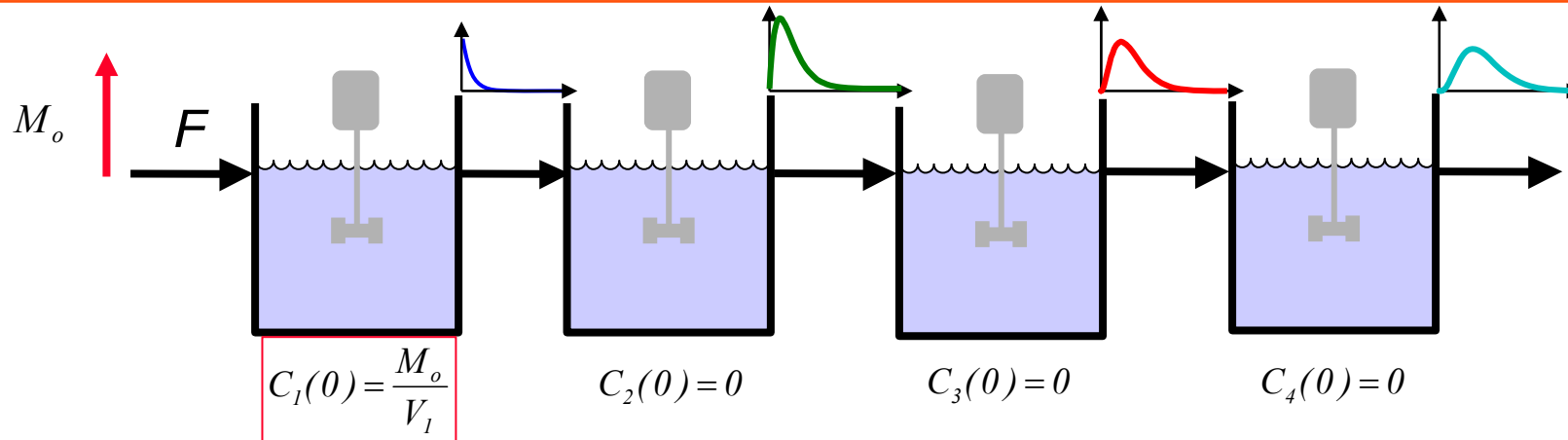
$$\begin{bmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \dots \\ \dot{C}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{F}{V} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{F}{V} & -\frac{F}{V} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{F}{V} & -\frac{F}{V} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{F}{V} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} C_i$$

$$\mathcal{G} = \frac{V}{F} = \text{tempo di residenza del CSTR}$$

La risposta impulsiva di ciascuno stato (CSTR) è ancora calcolabile con l'espressione usata per il modello di Nash, solo che ora lo stato è costituito dalle concentrazioni e non più le portate

$$x_i(t) = \frac{1}{\mathcal{G}(i-1)!} \left(\frac{t}{\mathcal{G}} \right)^{i-1} e^{-\frac{t}{\mathcal{G}}}$$

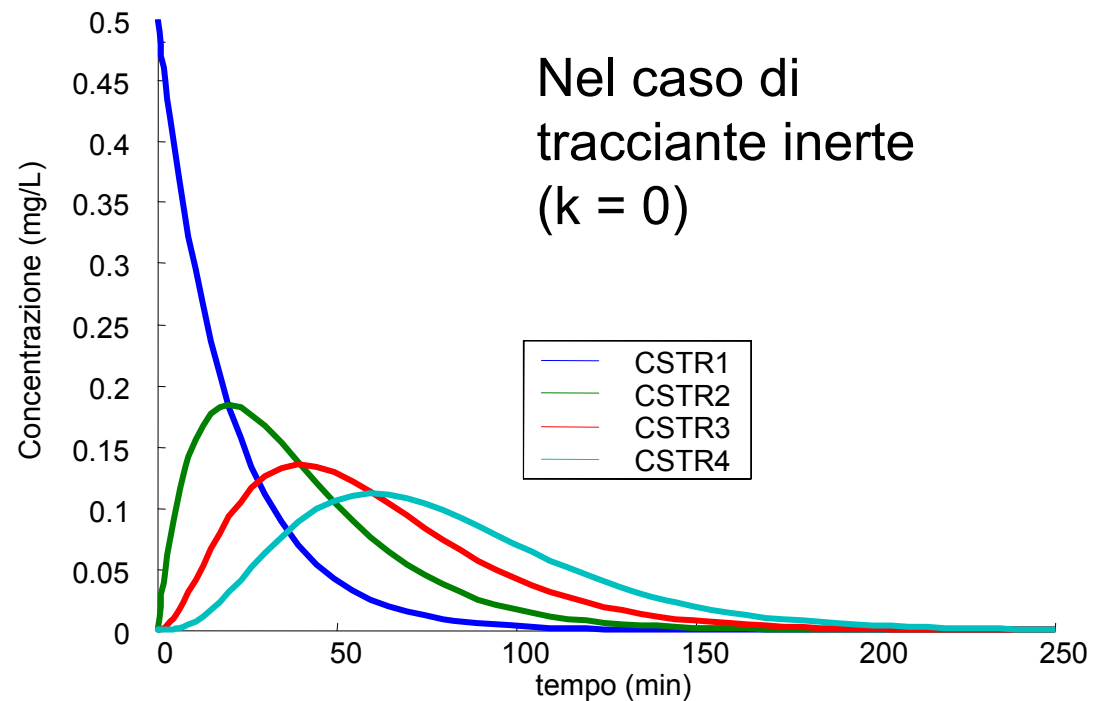
Risposta impulsiva della cascata di CSTR



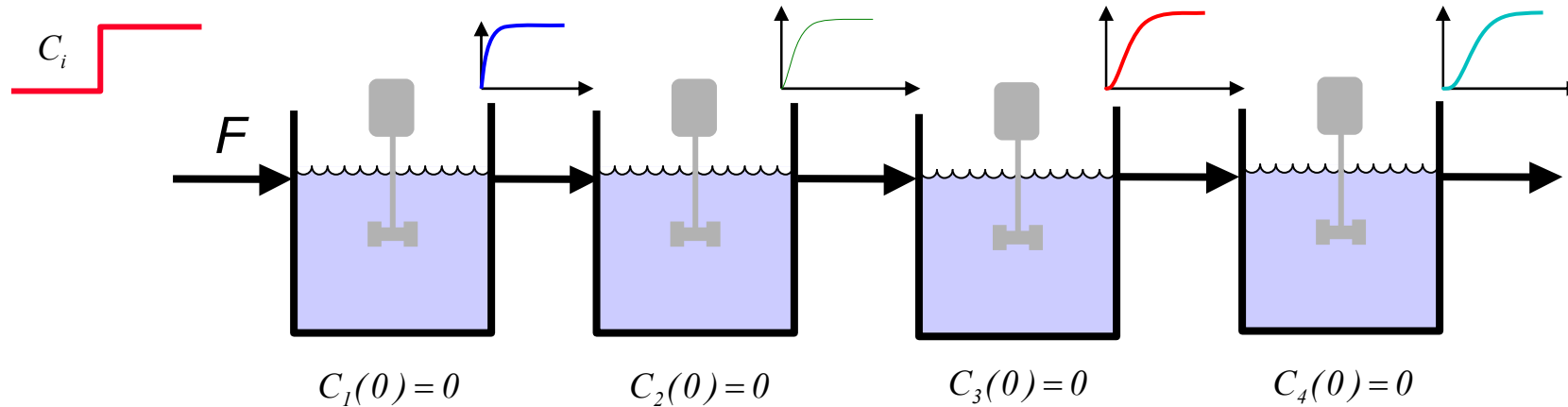
La massa M_o viene iniettata **solo nel primo** CSTR che perciò parte da condizioni iniziali non nulle $C_o = M_o/V_1$

Gli altri sono scarichi $C_n=0$

L'impulso si propaga ritardando il picco a causa della dinamica di ciascun CSTR, dato dalla diluizione $q_n = F_n/V_n$



Risposta al gradino della cascata di CSTR

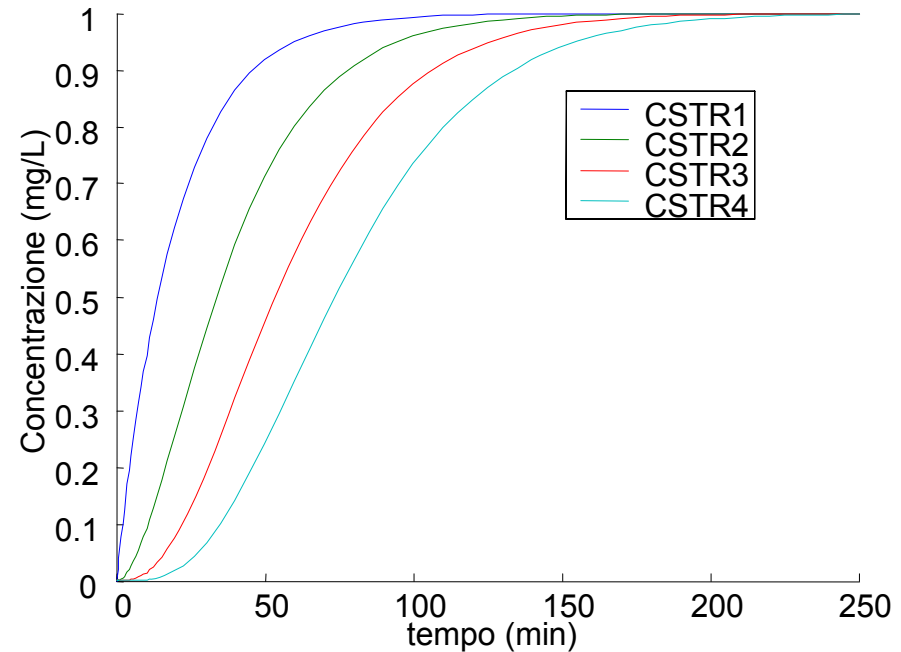


Ciascun CSTR produce in uscita un gradino che tende al valore di ingresso

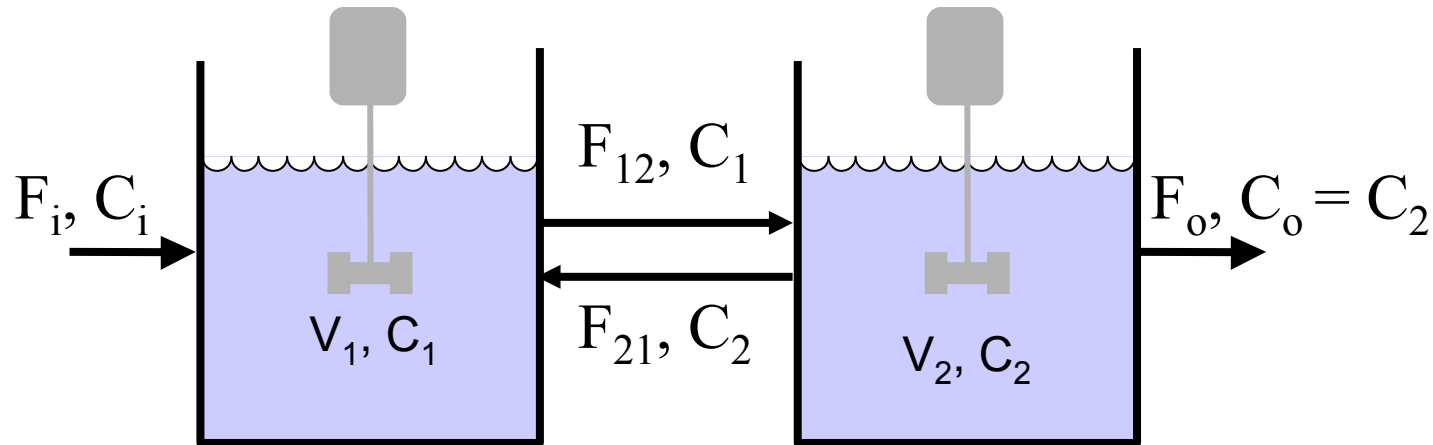
Il gradino si propaga lungo la cascata con "inerzia" crescente

Il tempo di propagazione è funzione della dinamica di ciascun CSTR, attraverso il tempo di ritenzione

$$\mathcal{G} = \frac{1}{q}$$



CSTR con retroazione



$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{F_i}{V_1} C_i + \frac{F_{21}}{V_1} C_2 - \frac{F_{12}}{V_1} C_1 - kC_1$$

Ingresso in retroazione

$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{F_{12}}{V_2} C_1 - \frac{F_{21}}{V_2} C_2 - \frac{F_o}{V_2} C_2 - kC_2$$

Uscita per retroazione

Nel caso generale di volumi variabili

$$F_i \neq F_o$$

Comunque la portata intermedia F_{12} e quella di ricircolo F_{21} sono indipendenti da quelle esterne F_i e F_o

CSTR con retroazione

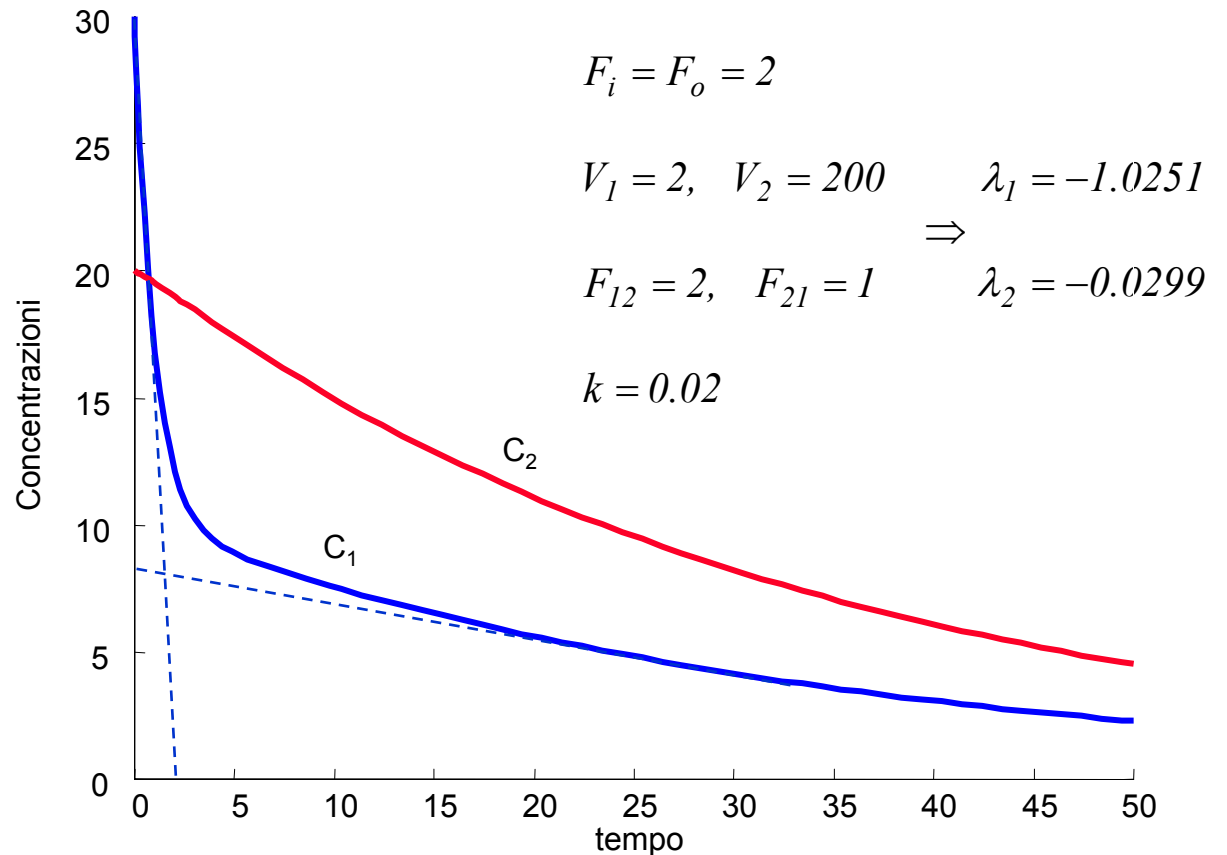
$$\begin{bmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{F_{12}}{V_1} - k & \frac{F_{21}}{V_1} \\ \frac{F_{12}}{V_2} & -\frac{F_{21}}{V_2} - \frac{F_o}{V_2} - k \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{F_i}{V_1} \\ 0 \end{bmatrix} C_i$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{F_{12}}{V_1} - k & \frac{F_{21}}{V_1} \\ \frac{F_{12}}{V_2} & -\frac{F_{21}}{V_2} - \frac{F_o}{V_2} - k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 0$$

$$\left. \begin{matrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{matrix} \right\} = \frac{(a_{11} + a_{22}) \pm \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}}{2}$$

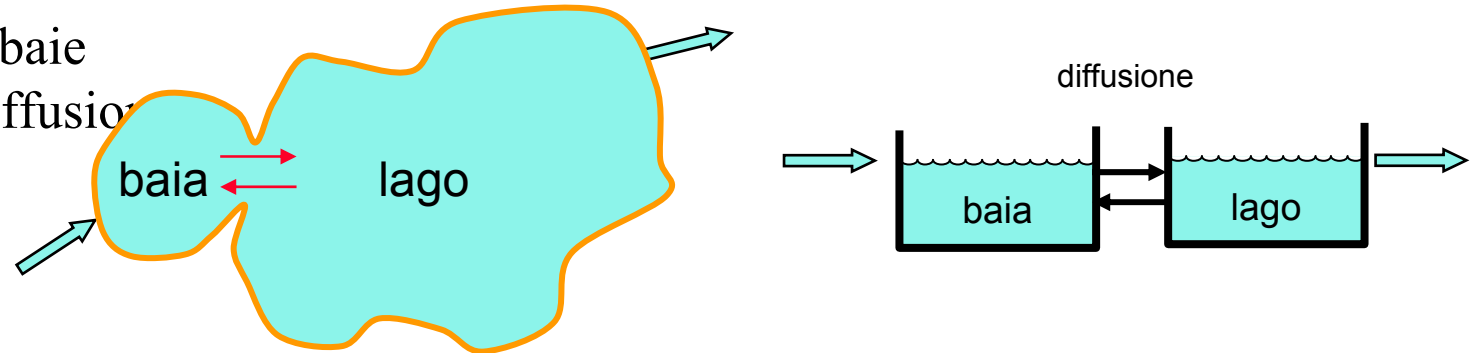
Considerazioni sui CSTR in retroazione

- ❑ La stabilità è comunque assicurata $\lambda_1, \lambda_2 < 0$
- ❑ Si può avere comportamento oscillatorio se $(a_{11} + a_{22})^2 < 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})$
- ❑ Si può avere un sistema *stiff* se i due autovalori sono in modulo molto diversi
- ❑ C_1 risente di ambedue gli autovalori, mentre C_2 è governato prevalentemente λ_2 .
- ❑ Il fattore a cui gli autovalori sono più sensibili è la costante cinetica k .

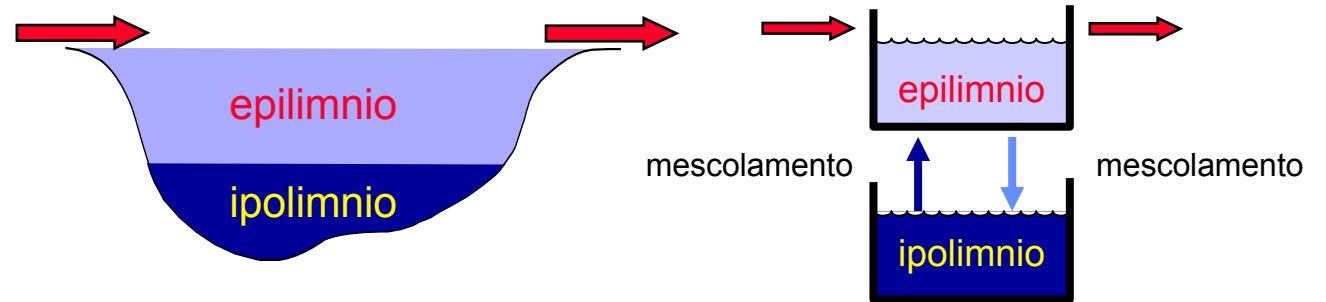


Esempi di CSTR con retroazione

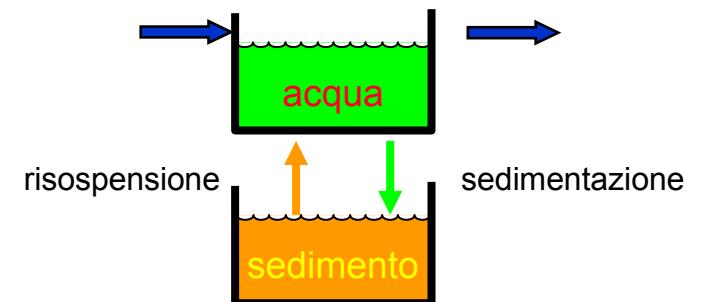
- ❑ Sistema di laghi o baie comunicanti per diffusione



- ❑ Laghi stratificati comunicazione fra epilimnio e ipolimnio

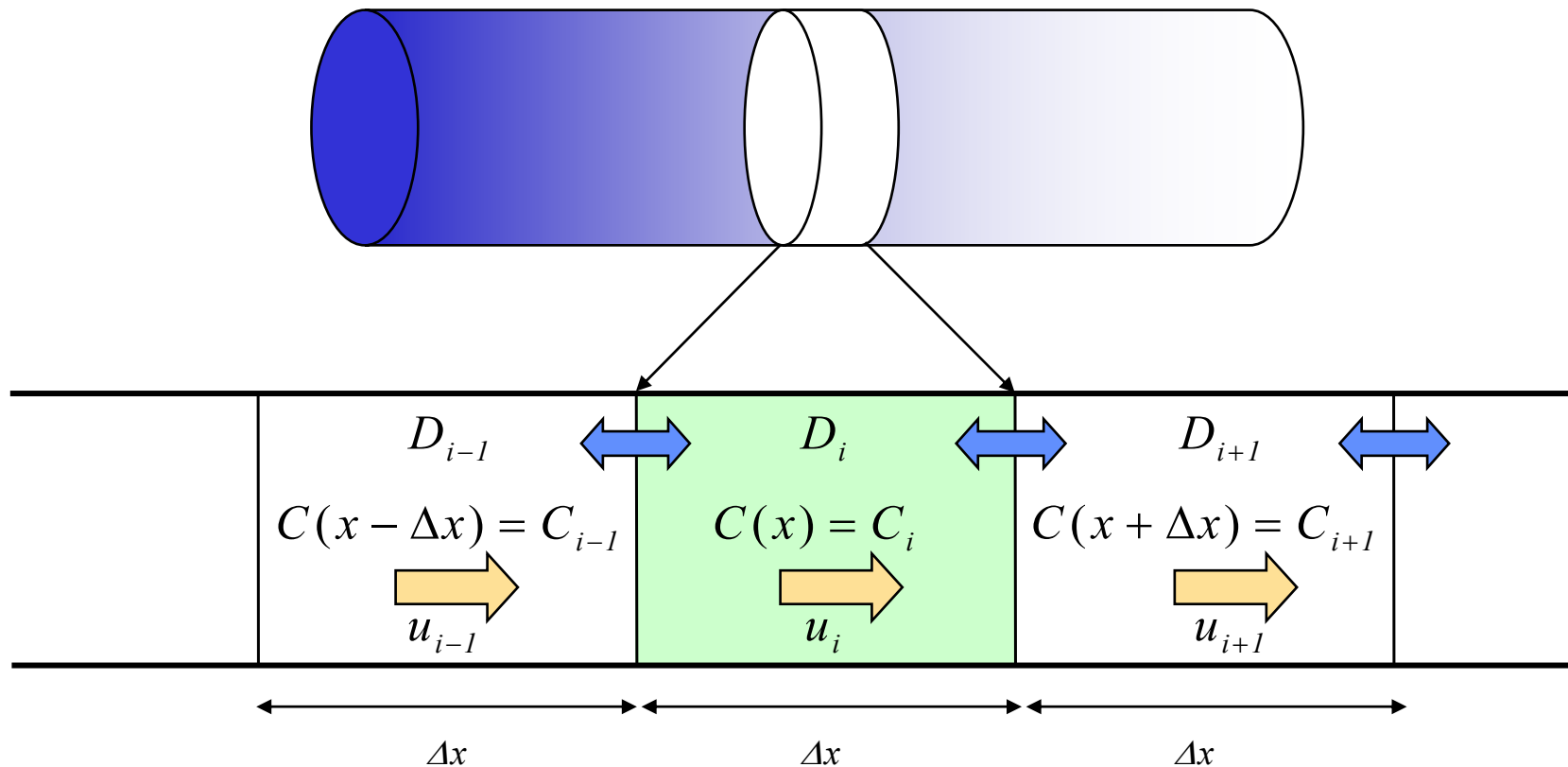


- ❑ Scambio solido fra acqua e sedimento

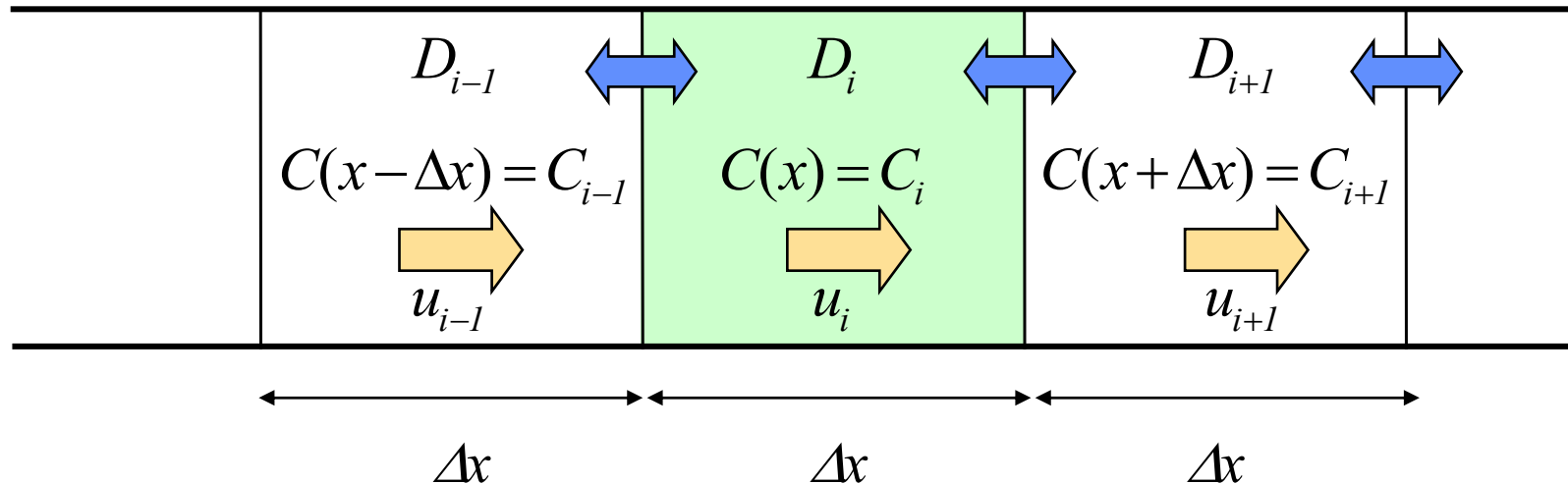


Discretizzazione spaziale dell'equazione diffusiva

- L'equazione diffusiva completa è molto difficile da trattare. Si ricorre ad un'approssimazione ottenuta suddividendo il reattore in un insieme di celle contigue in ciascuna delle quali si può ritenere costante: la concentrazione (C), la velocità (u) e la diffusione (D)



Discretizzazione spaziale dell'equazione diffusiva



- Sviluppando in serie la concentrazione intorno al valore centrale $C(x)$

$$C(x + \Delta x) \cong C(x) + \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_x \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_x \Delta x^2 \quad C(x - \Delta x) \cong C(x) - \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_x \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_x \Delta x^2$$

- Si hanno le approssimazioni della derivata prima e seconda

$$\frac{\partial C}{\partial x} \cong \frac{C(x + \Delta x) - C(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cong \frac{C(x + \Delta x) - 2C(x) + C(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

Approssimazione lineare dell'equazione diffusiva

- Sostituendo queste approssimazioni nell'equazione diffusiva, si ottengono n equazioni differenziali ordinarie, una per ciascuna cella ($i = 1, 2, \dots, n$)

$$\frac{dC_i}{dt} = -u_i \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x_i} + D_i \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x_i^2} + f(C_i)$$

termine di trasporto
termine diffusivo
termine cinetico

- La discretizzazione ottenuta con le differenze centrate può divenire *numericamente instabile* per valori piccoli della diffusione D
- Raccogliendo i coefficienti dei vari termini di concentrazione C_{i-1} , C_i , C_{i+1} , e ipotizzando per esempio una cinetica del primo ordine $f(C) = -kC$, si ha un sistema lineare

$$\frac{dC_i}{dt} = \alpha_i C_{i-1} + (\beta_i - k_i) C_i + \gamma_i C_{i+1}$$

$$\alpha_i = \frac{u_i}{2\Delta x_i} + \frac{D_i}{\Delta x_i^2} \quad \beta_i = -\frac{2D_i}{\Delta x_i^2} \quad \gamma_i = \frac{D_i}{\Delta x_i^2} - \frac{u_i}{2\Delta x_i}$$

Modello discretizzato in forma matriciale

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_1}{dt} = \alpha_1 C_{ingr} + (\beta_1 - k_1)C_1 + \gamma_1 C_2 \\ \frac{dC_2}{dt} = \alpha_2 C_1 + (\beta_2 - k_2)C_2 + \gamma_2 C_3 \\ \dots\dots\dots \\ \frac{dC_n}{dt} = \alpha_n C_{n-1} + (\beta_n - k_n + \gamma_n)C_n \end{array} \right.$$

La cinetica in ciascuna cella dipende dalla concentrazione delle due adiacenti (a monte e a valle) oltre che dalla propria concentrazione

Si suppone di aggiungere a valle un'ulteriore cella con la stessa concentrazione

$$\begin{bmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \dot{C}_3 \\ \dots \\ \dot{C}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 - k_1 & \gamma_1 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 - k_2 & \gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3 & \beta_3 - k_3 & \gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_n & \beta_n - k_n + \gamma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \dots \\ C_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} C_{ingr}$$

Forma matriciale del sistema diffusivo discretizzato

- Definendo come vettore di stato le concentrazioni di tutte le celle del reattore e come ingresso la concentrazione della cella 0 “a monte”, si ha la rappresentazione matriciale per la dinamica delle concentrazioni

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{C} + \mathbf{b}C_i(t) \quad \mathbf{C} = [C_1 \ C_2, \dots, C_n]^T$$

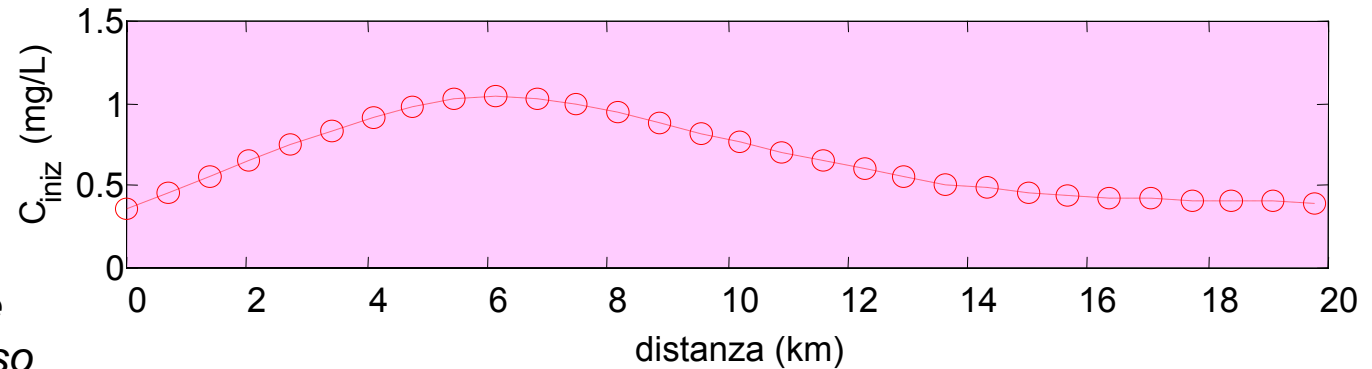
con

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \beta_1 - k_1 & \gamma_1 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 - k_2 & \gamma_2 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_3 & \beta_3 - k_3 & \gamma_3 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \alpha_n & \beta_n - k_n + \gamma_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

- La matrice \mathbf{A} è tri-diagonale (a banda centrale): la dinamica di ogni cella dipende solamente da quella delle due contigue.

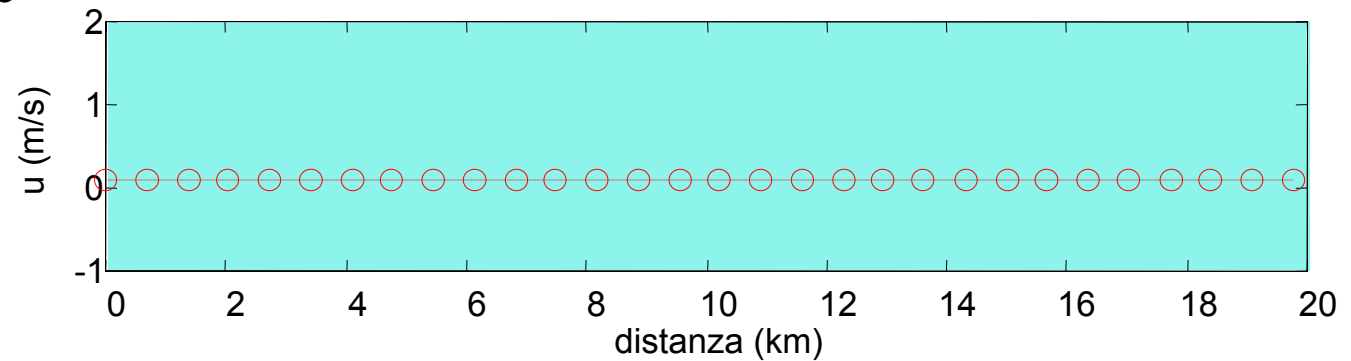
Esempio di condizioni al contorno

Profilo iniziale
di concentrazione

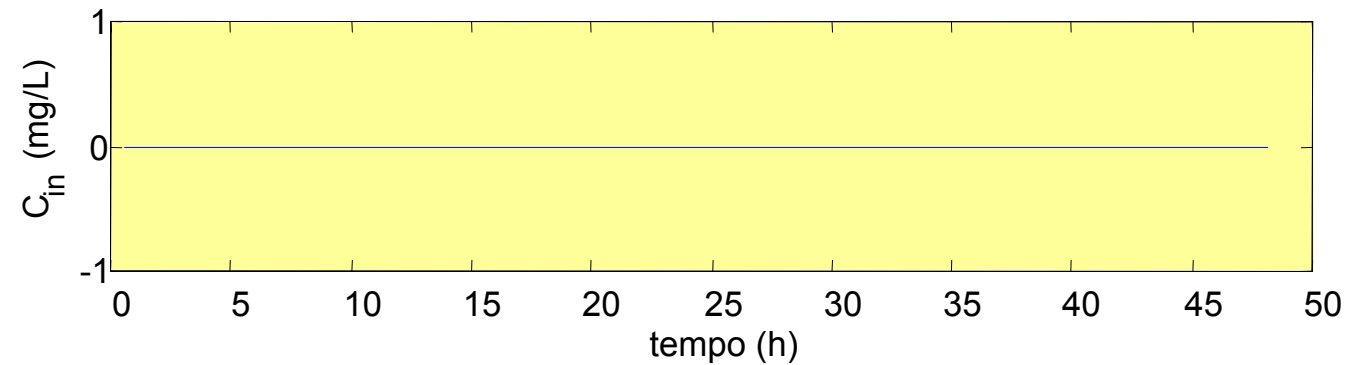


*I cerchi si riferiscono alle
celle in cui è stato suddiviso
il fiume*

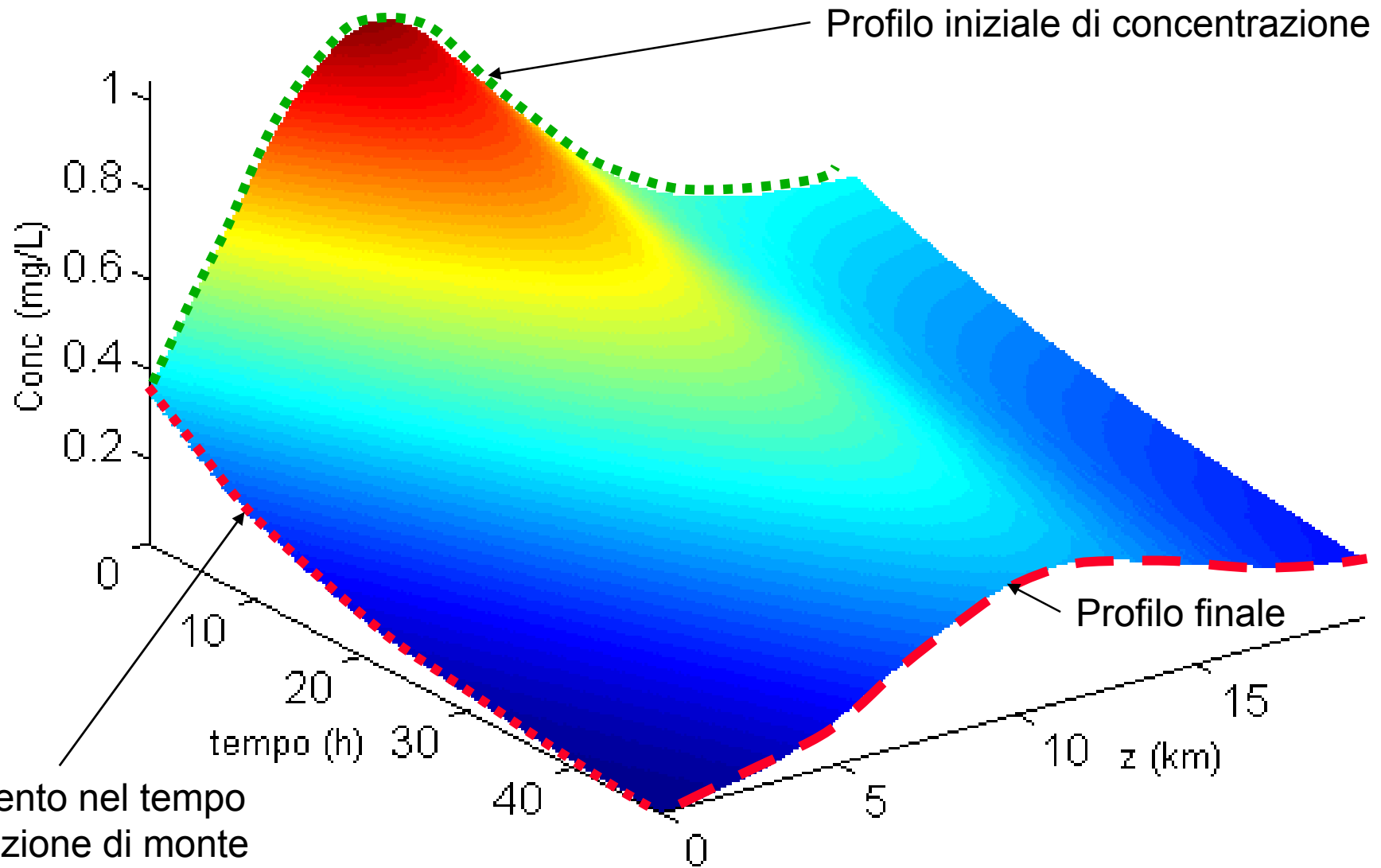
Profilo di velocità



Profilo di ingresso
da monte

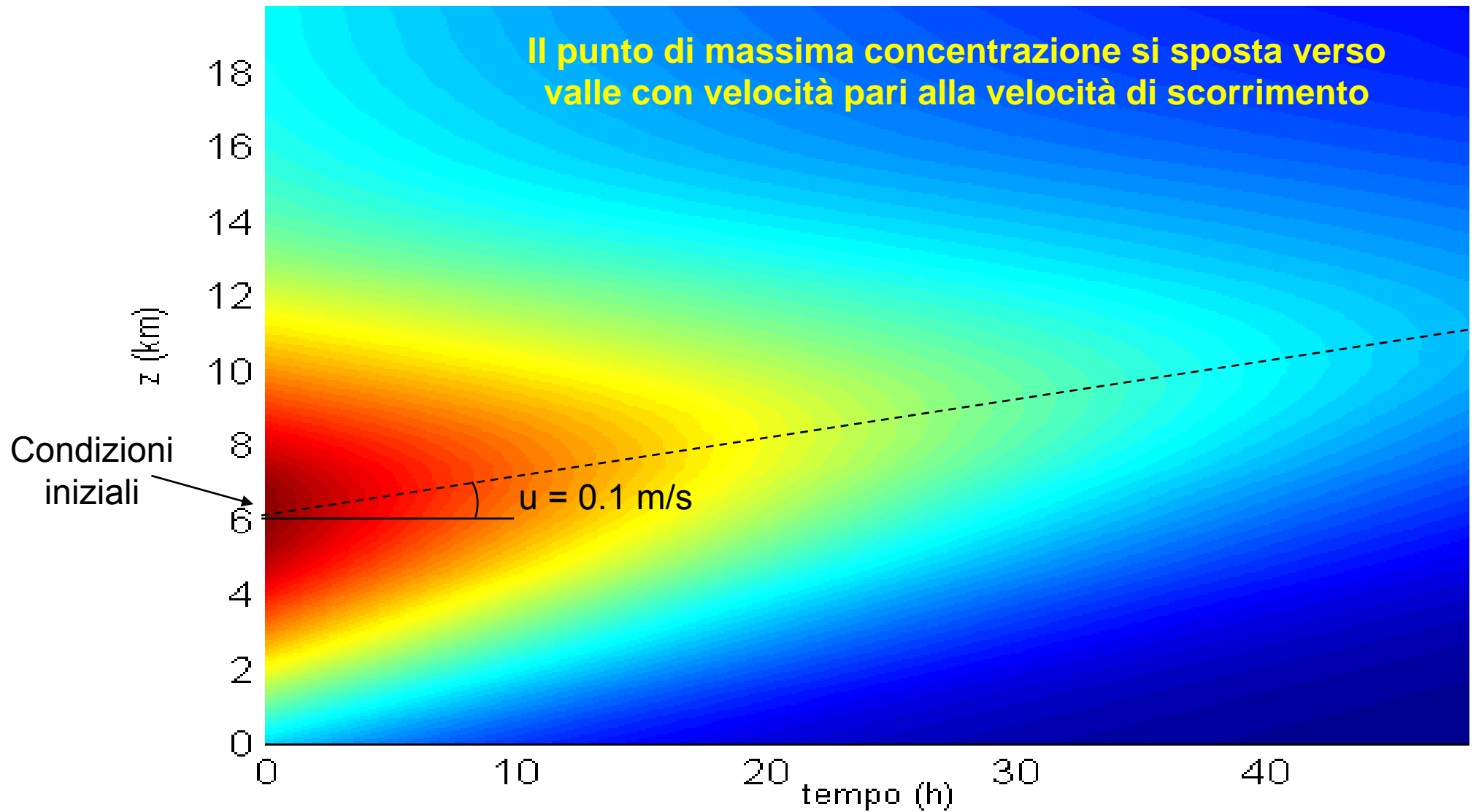


Andamento nello spazio e nel tempo

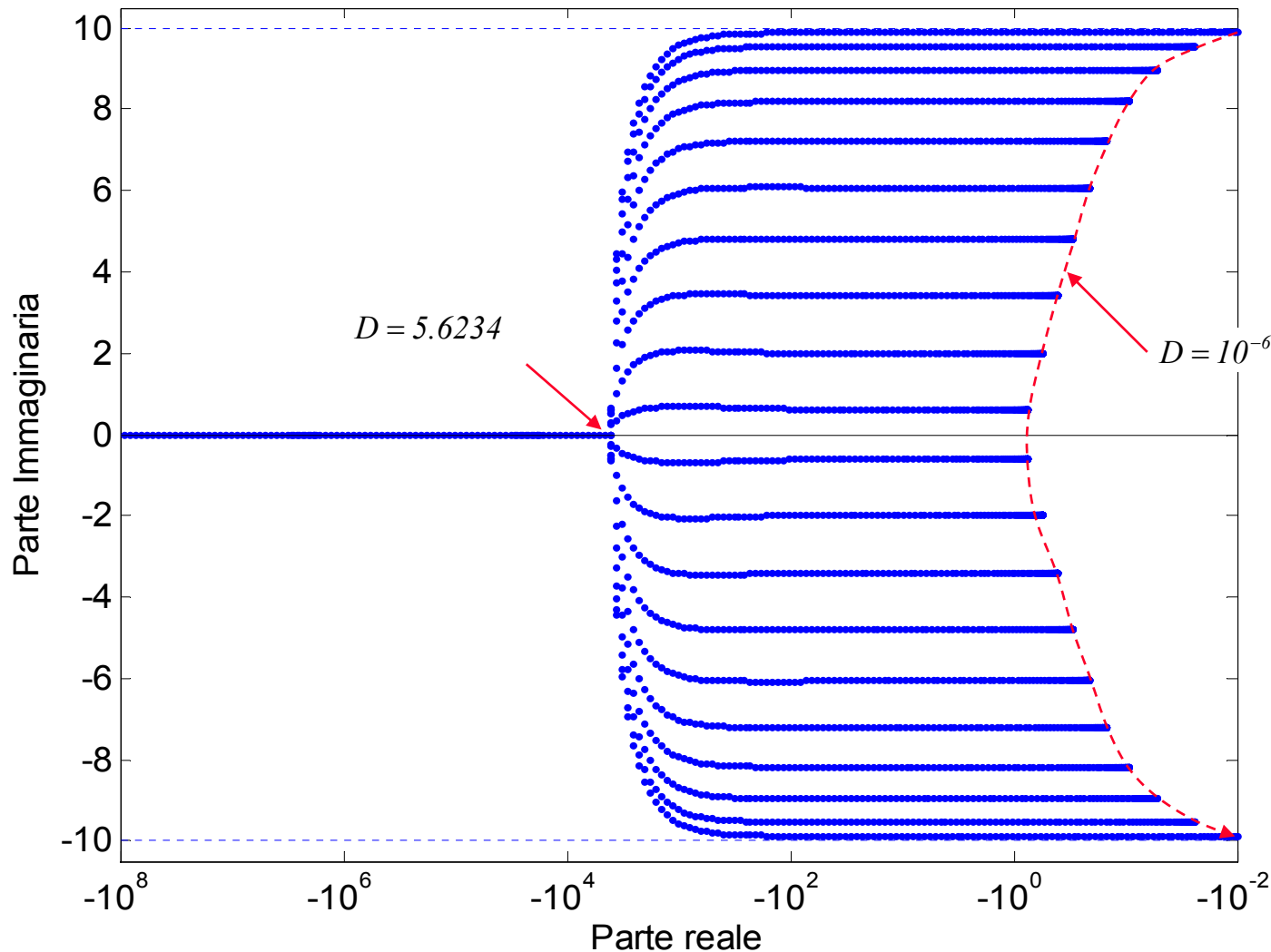


Andamento nel tempo
della sezione di monte

Propagazione delle condizioni iniziali



Andamento degli autovalori con D



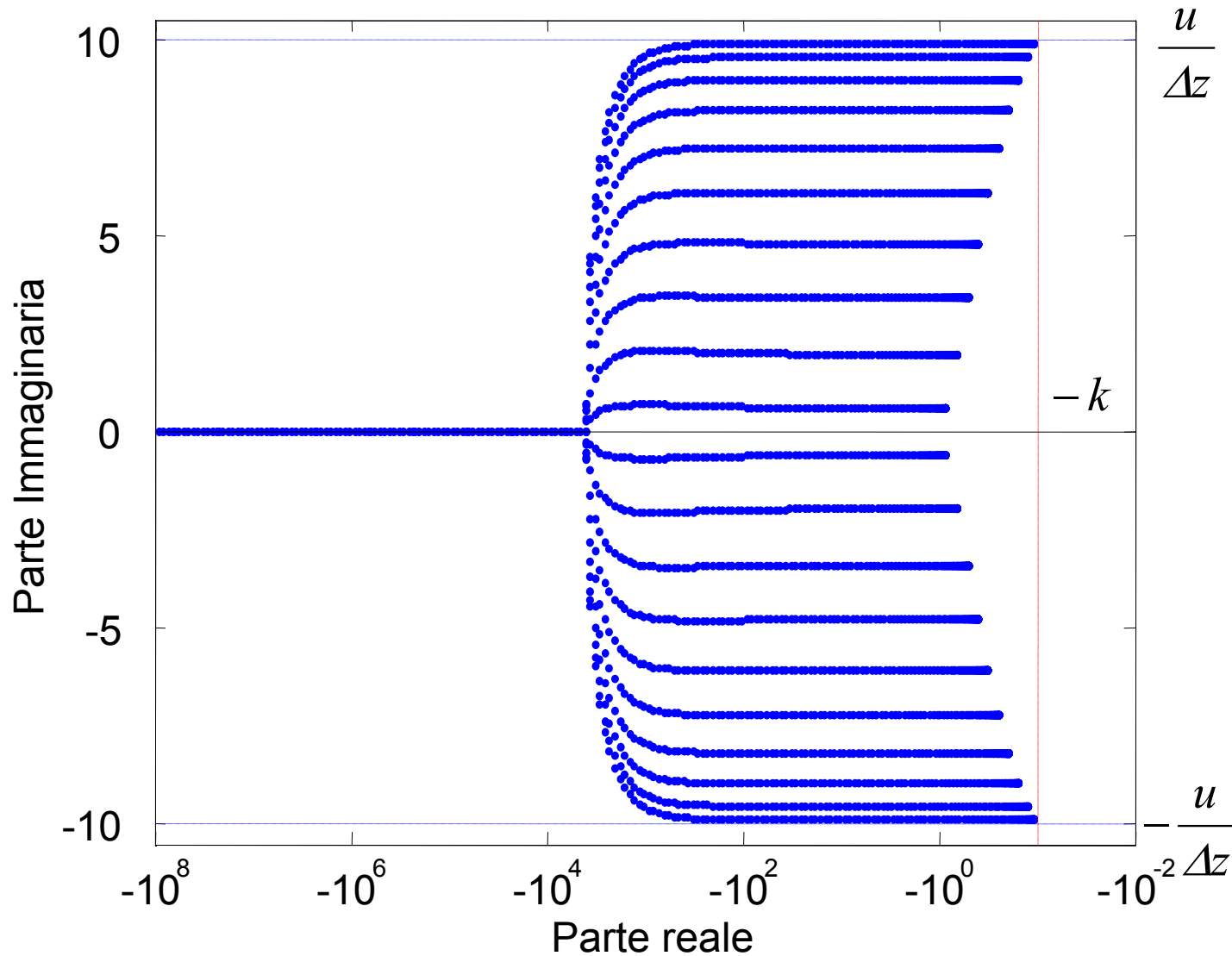
$N = 20$
 $k = 0$
 $u = 0.5 \text{ m/s}$

In assenza di cinetica, per D molto piccolo si hanno due autovalori con parte reale quasi nulla

All'aumentare di D la parte reale si fa sempre più negativa e la parte immaginaria decresce.

Oltre un D critico si ha una biforcazione e gli autovalori sono tutti reali negativi tendenti a $-\infty$

Andamento degli autovalori con D



$$\frac{u}{\Delta z}$$

$$N = 20$$

$$k = 0.1$$

$$u = 0.5 \text{ m/s}$$

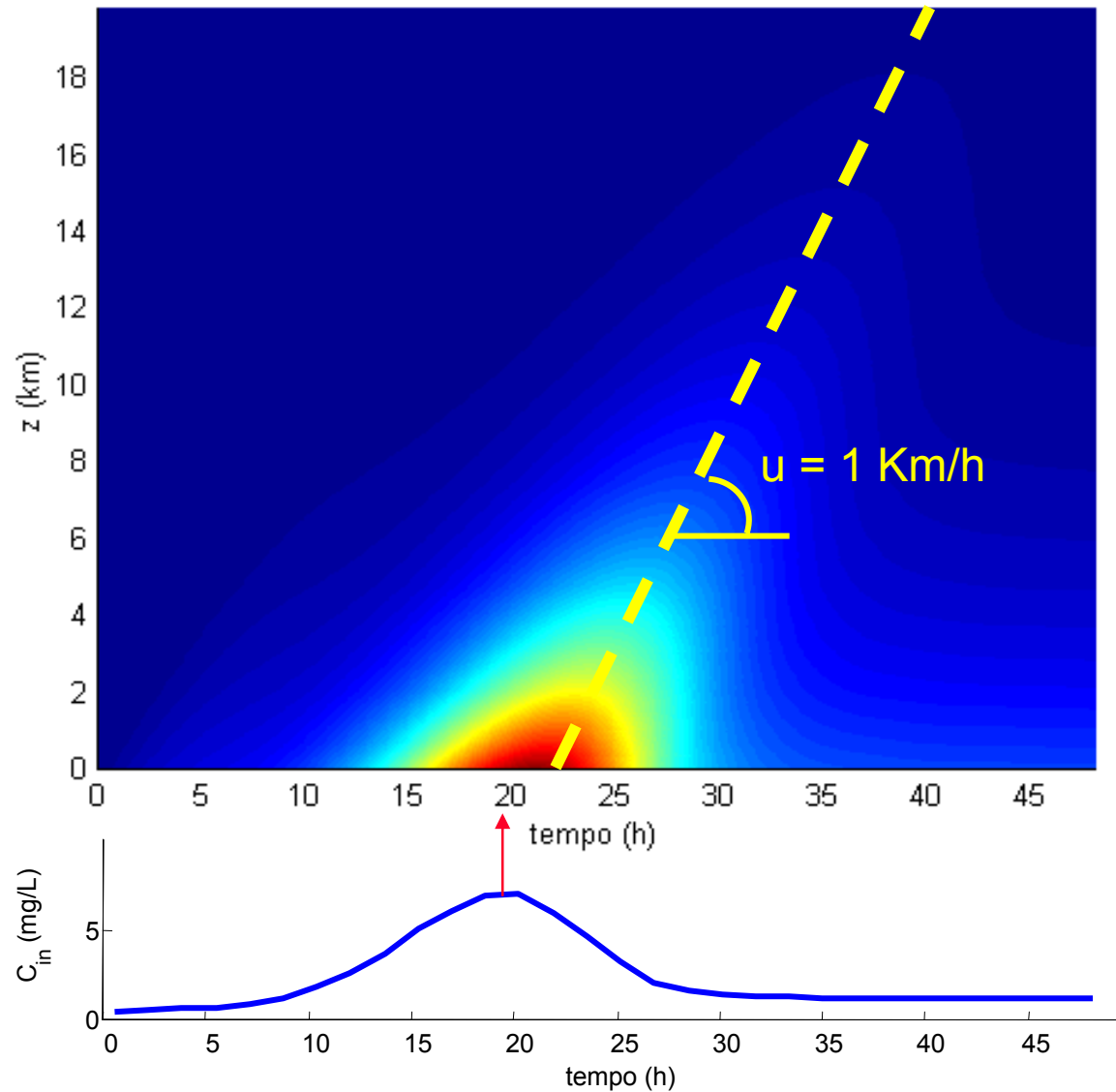
La cinetica k limita inferiormente la parte reale degli autovalori

All'aumentare di D la parte reale si fa sempre più negativa e la parte immaginaria decresce.

Oltre un D critico si ha una biforcazione e gli autovalori sono tutti reali negativi.

La cinetica tende a stabilizzare

Propagazione a valle di un impulso da monte

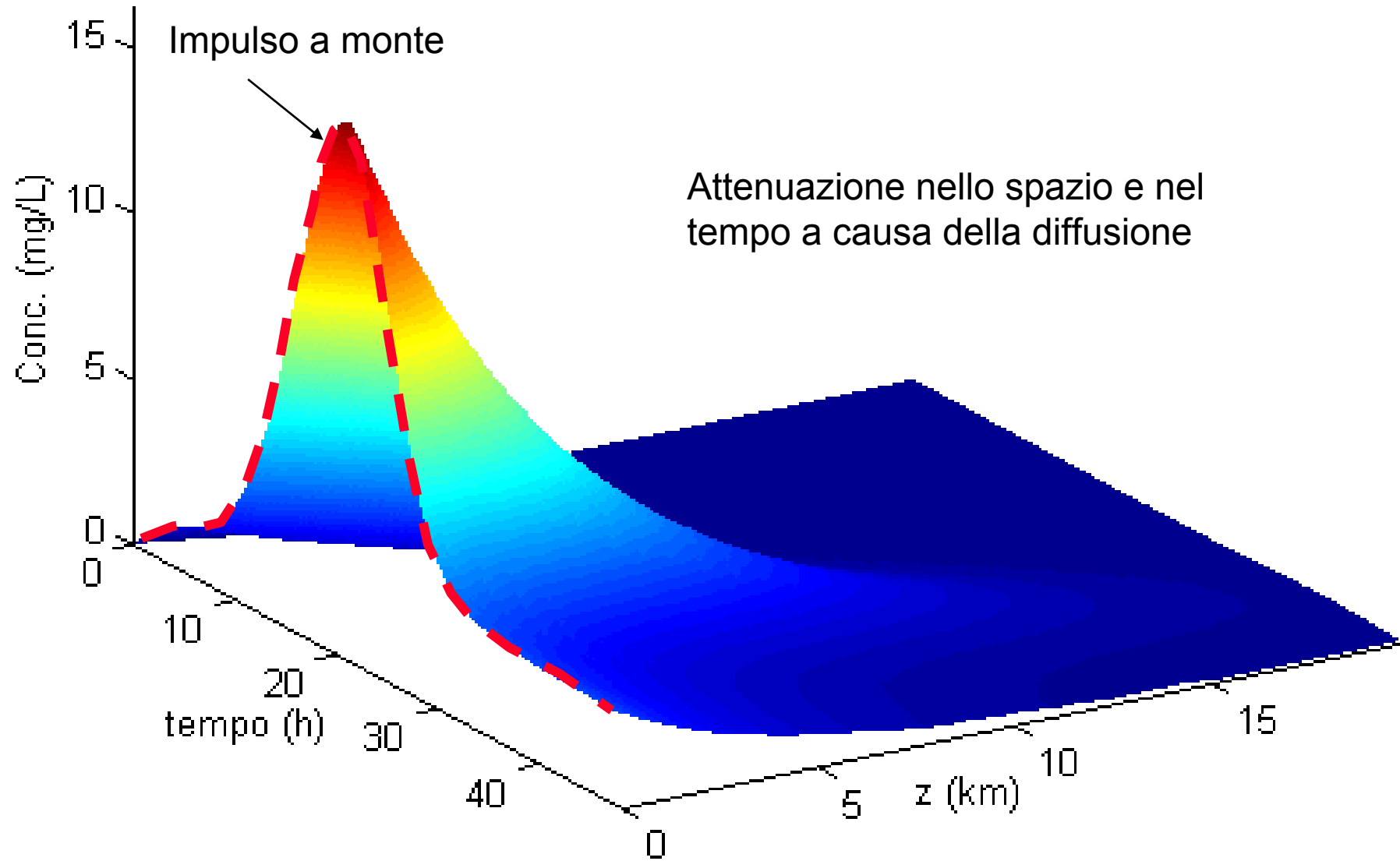


Condizioni iniziali
tutte nulle

$$u = 1 \text{ Km/h}$$
$$D = 0.1 \text{ m}^2/\text{s}$$

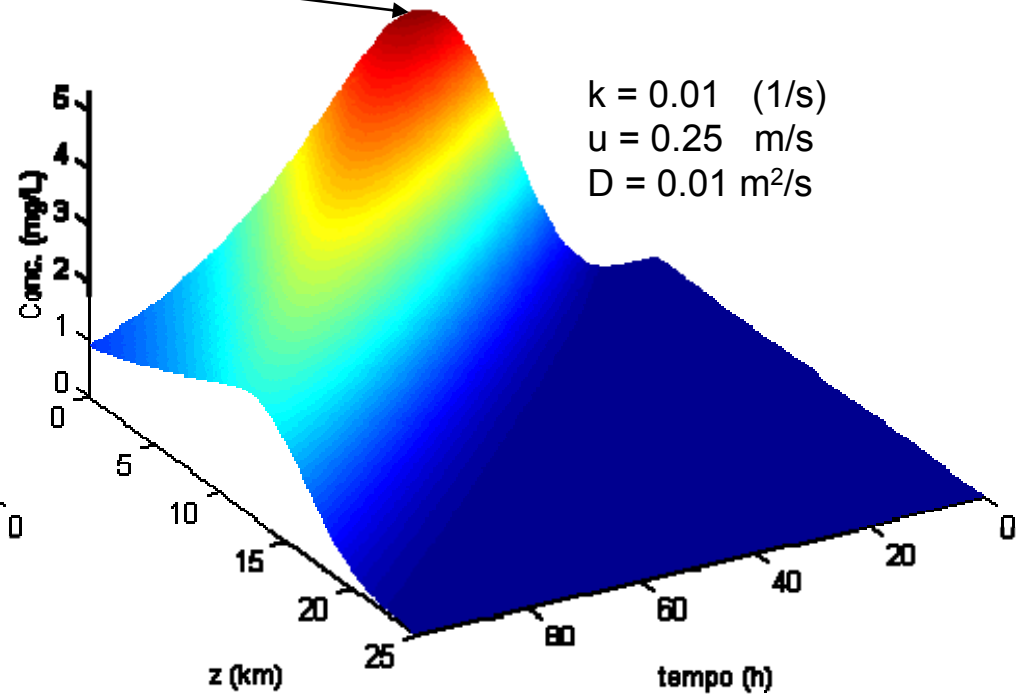
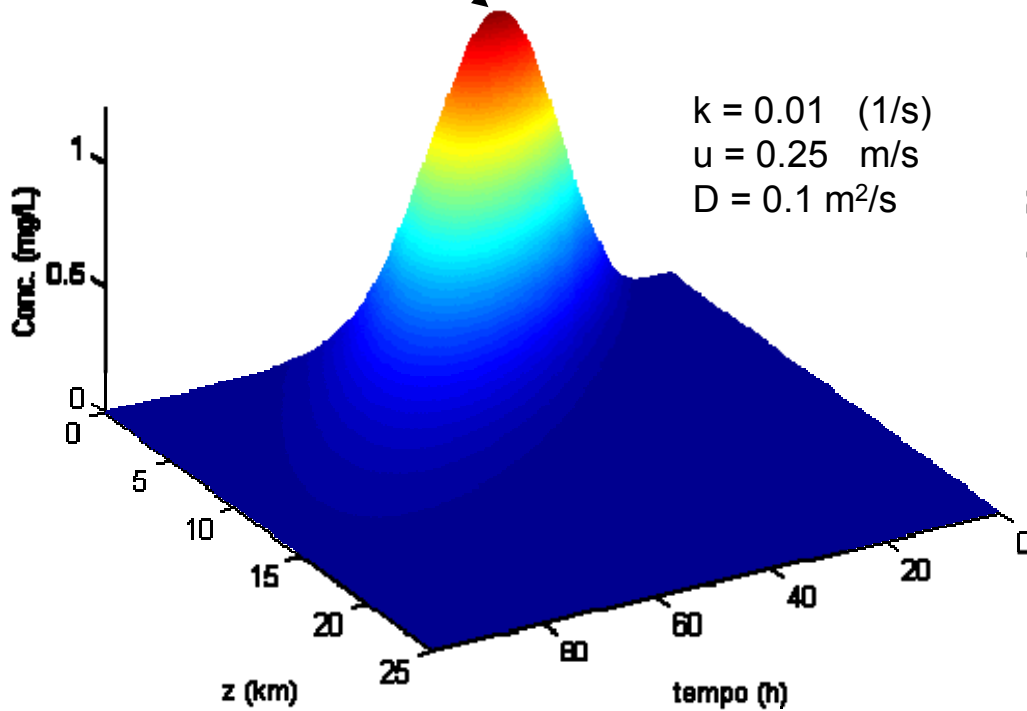
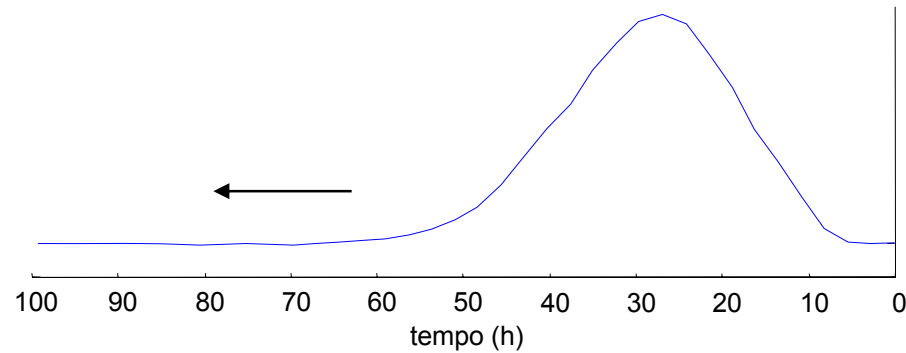
Il picco di inquinante
si propaga verso
valle con la velocità
di scorrimento

Propagazione a valle di un impulso da monte



Risposta all'impulso al variare di D

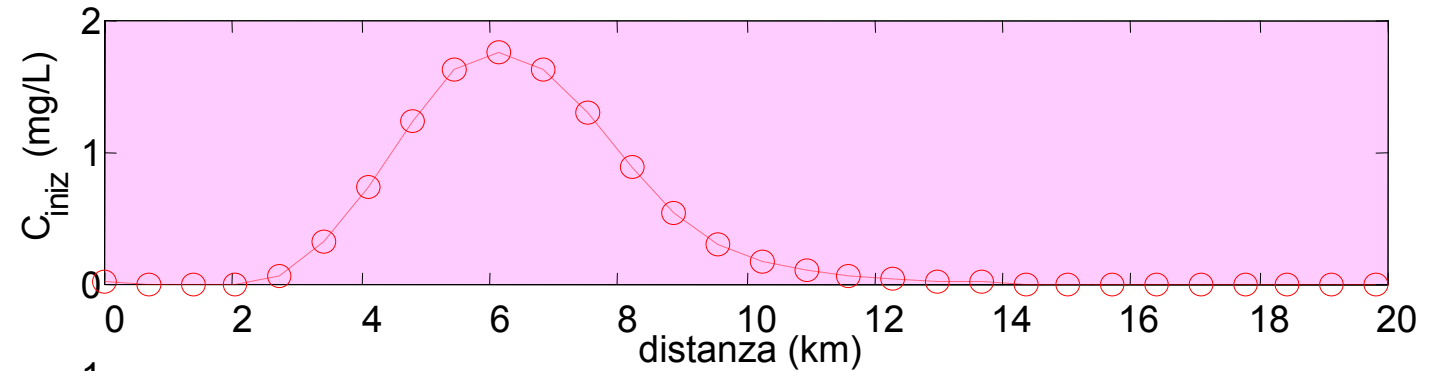
Il picco è più basso perché la maggiore diffusione propaga più velocemente la massa



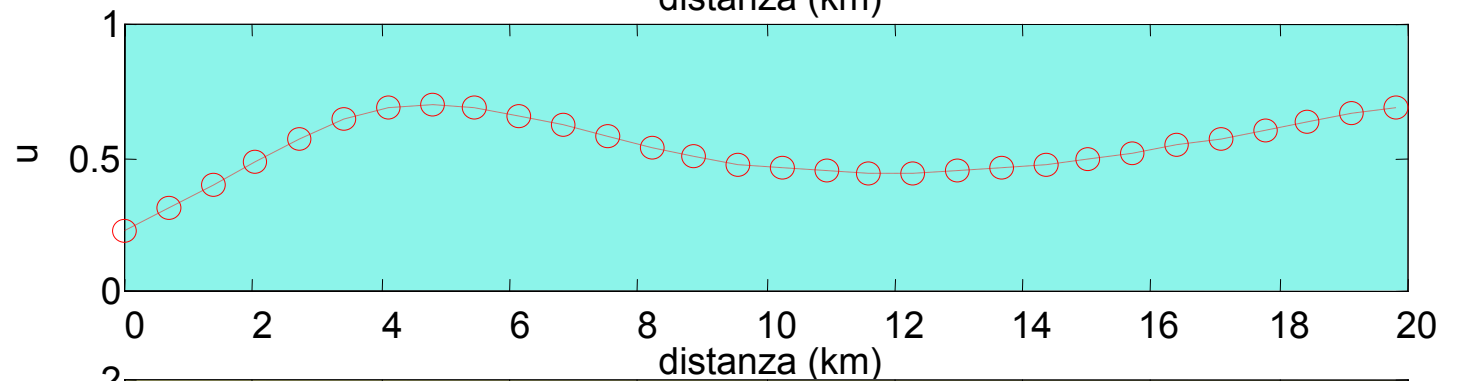
Condizioni al contorno tempo-varianti

Profilo iniziale
di concentrazione

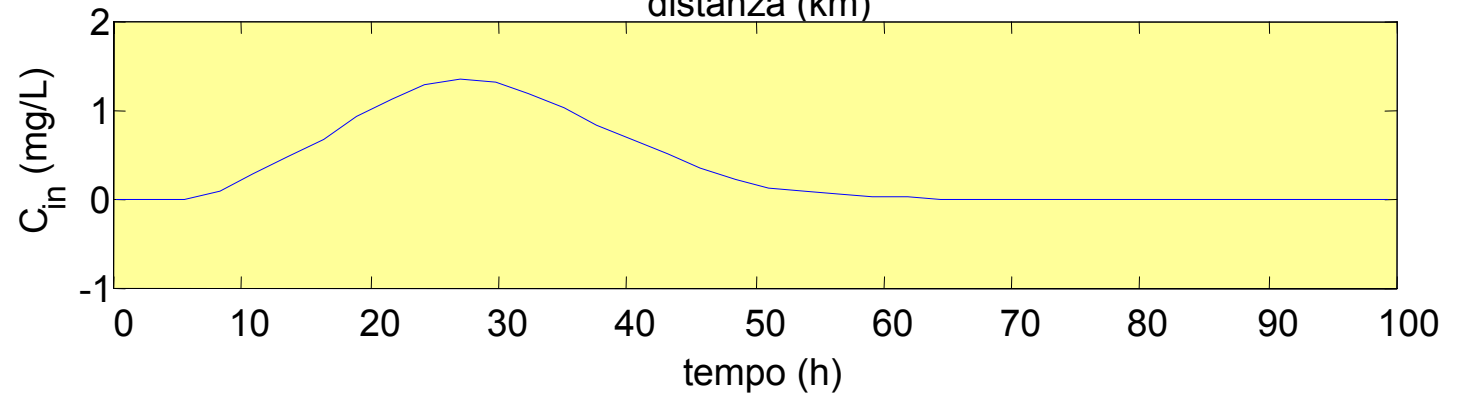
*I cerchi si riferiscono alle
celle in cui è stato suddiviso
il fiume*



Profilo di velocità



Profilo di ingresso
da monte



Risposta con ingresso e condizioni qualsiasi

