



Università degli Studi di Cagliari

Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria per l'Ambiente ed il Territorio

Anno Accademico 2006 / 2007

**Relazione per il Laboratorio di
Problemi numerici dell'Ingegneria**

**Risoluzione numerica dell'equazione della diffusività in
condizioni non stazionarie**

Docente

Prof. Giuseppe Rodriguez

Studenti

Corrias Gianluca 35561

Gaviano Andrea 35710

Sommario

| | |
|---|---------|
| Introduzione..... | pag. 3 |
| Capitolo I – Descrizione del problema fisico..... | pag. 4 |
| Capitolo II – Soluzione analitica del problema..... | pag. 6 |
| Capitolo III – Soluzione numerica del problema | |
| 3.1 Metodi alle differenze finite..... | pag. 8 |
| 3.1.1 Metodo di Eulero..... | pag. 9 |
| 3.1.2 Metodo di Crank-Nicolson..... | pag. 10 |
| Capitolo IV – Implementazione in Matlab..... | pag. 13 |
| Conclusioni..... | pag. 24 |

Introduzione

L'obiettivo di questa relazione è utilizzare gli strumenti del calcolo numerico al fine di poter studiare un problema fisico di grande rilevanza nel campo ambientale. Si è scelto di riferirsi al fenomeno diffusionale in condizioni di non stazionarietà.

Il fenomeno della diffusione non stazionaria può essere descritto tramite la Teoria dei due film (1923) utilizzando il modello a mezzo semi-infinito.

Ci si riferisce ad un'interfaccia fluido-fluido e si prende in considerazione il caso della contaminazione di un'acqua pulita da parte di un inquinante avente una certa diffusività.

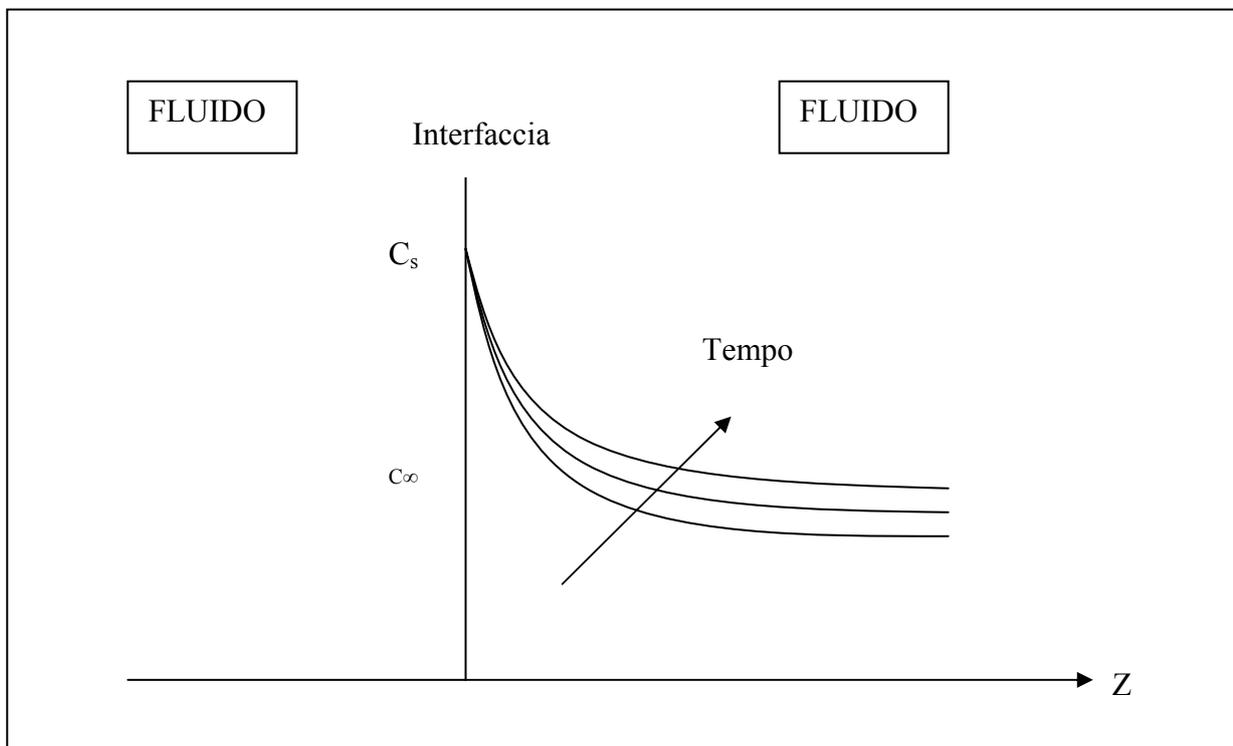
Nei prossimi capitoli si descriverà più in dettaglio la schematizzazione del problema fisico, si tratterà brevemente la soluzione analitica, infine si discuterà la soluzione numerica facendo inoltre ricorso agli strumenti di Matlab per l'implementazione del programma.

Capitolo I – Descrizione del problema fisico

Si considera il caso della contaminazione di un'acqua pulita da parte di un inquinante in condizioni non stazionarie. Tramite il modello a mezzo semi-infinito della Teoria dei due film è possibile schematizzare il problema facendo ricorso a due ipotesi:

- in tutta la fase liquida possono aver luogo solo ed esclusivamente fenomeni di trasporto per diffusione
- i fenomeni diffusionali che hanno luogo nel film non sono stazionari.

E' possibile disegnare uno schema del tipo:



Schematizzazione a mezzo semi-infinito

Nella schematizzazione a mezzo semi-infinito, se la concentrazione a grande distanza è costante significa che il processo diffusionale è lento, ovvero che lo spazio da percorrere in termini di trasporto diffusionale è ampio. Di solito è più facile trovarsi nel caso in cui il fenomeno diffusivo è particolarmente lento.

E' conveniente utilizzare il modello a mezzo semi-infinito quando il tempo caratteristico del fenomeno diffusionale è molto maggiore della scale dei tempi oppure se si sta osservando il fenomeno a tempi così brevi che il processo diffusionale non ha ancora esaurito il transitorio.

L'applicazione che si prende in considerazione è la seguente:

Si consideri un'acqua di falda contaminata da DNAPL (Dense NonAqueous-Phase Liquids). Questi sono contaminanti liquidi più pesanti dell'acqua che hanno solubilità in acqua molto bassa; un esempio di DNAPL è il dicloroetano. Quando un DNAPL entra in una falda acquifera precipita per gravità fino a che incontra un fondo a bassa permeabilità. Sul fondo quindi si crea uno strato sottile al tempo $t = 0$. Si considerino le seguenti condizioni:

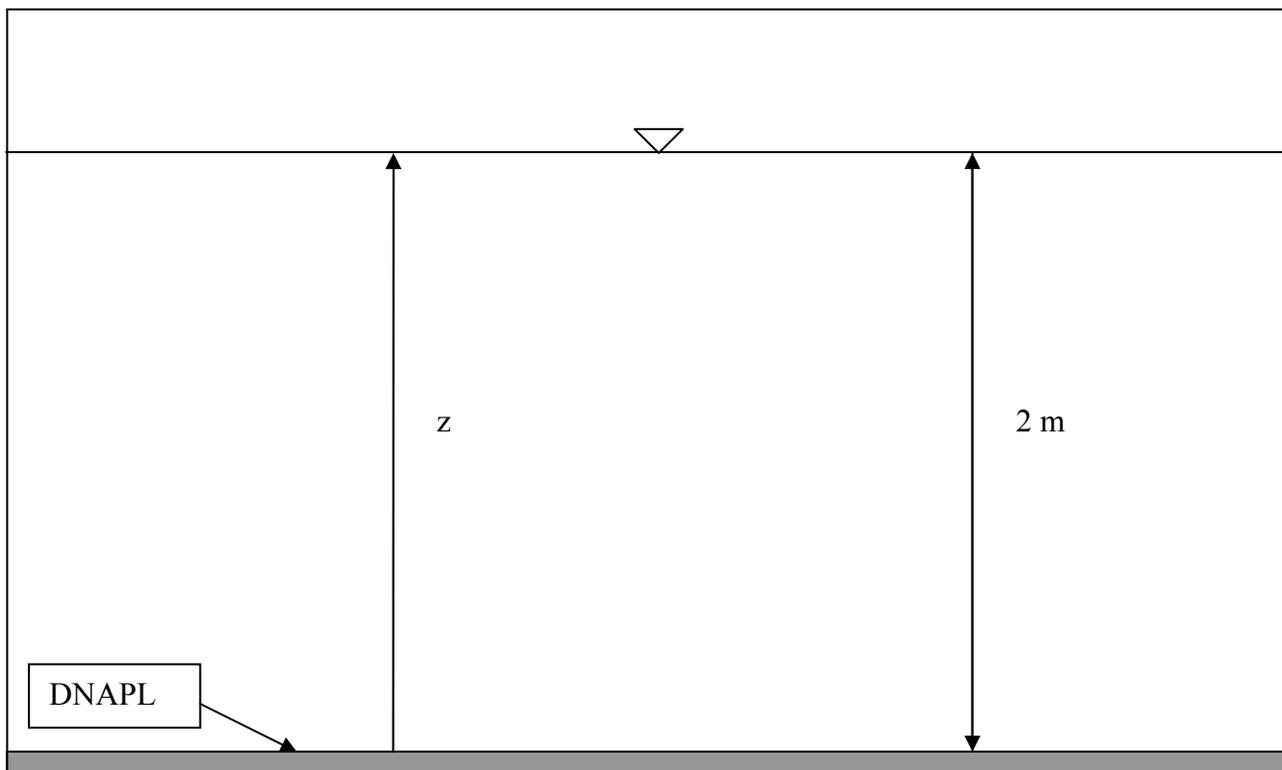
Per $t = 0$ si ha concentrazione nulla di DNAPL in tutta la falda (acqua inizialmente pulita).

Per $t > 0$ il DNAPL diffonde lentamente nell'acqua sovrastante.

Per $z = 0$ (sul fondo) si ha concentrazione pari alla concentrazione di saturazione di 150 ppm.

Il coefficiente di diffusività è pari a $4.4 * 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{s}$.

Si consideri l'acqua di falda stagnante e con una profondità di due metri.



Obiettivi:

Si vuole studiare il profilo di concentrazione a cui è soggetto l'acquifero facendo riferimento ad una generica sezione z .

Considerando un valore limite di concentrazione degli DNAPL nelle acque di falda di $5 * 10^{-3}$ ppm si vuole stimare in quanto tempo si raggiunge questa concentrazione in tutta la falda, prendendo come termine di valutazione il superamento di tale soglia al pelo libero della falda.

Capitolo II – Soluzione analitica del problema

Il fenomeno diffusionale è descritto matematicamente dalla seguente equazione differenziale:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

Per risolvere questa equazione differenziale sono necessarie tre condizioni al contorno: una per il tempo e due per lo spazio. Ipotizzando che prima dello sversamento dell'inquinante e a grande distanza dalla sorgente l'acqua sia pulita ($C = 0$), si può scrivere:

$$\begin{aligned} t = 0 \quad , \quad \forall z \quad , \quad C = C_\infty = 0 \\ z = 0 \quad , \quad t > 0 \quad , \quad C = C_s = 150 \text{ ppm} \\ z = \infty \quad , \quad t > 0 \quad , \quad C = C_\infty = 0 \end{aligned}$$

Un modo per risolvere questo problema per via analitica è attraverso la trasformata di Boltzmann. E' necessario quindi utilizzare la seguente variabile:

$$\varphi = \frac{z}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}}$$

Operando quindi un cambio di variabile si ha:

$$\frac{d^2 C}{d\varphi^2} + 2\varphi \frac{dC}{d\varphi} = 0$$

Da cui si ottiene:

$$C = (C_\infty - C_s) \cdot \text{erf}(\varphi) + C_s$$

Definendo la *Error Function* come:

$$\text{erf}(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\varphi e^{-t^2} dt$$

Dalle condizioni al contorno è possibile scrivere:

$$C = C_s \cdot (1 - \text{erf}(\varphi))$$

Definendo la *Complementary Error Function* come:

$$\operatorname{erfc}(\varphi) = 1 - \operatorname{erf}(\varphi)$$

$$C = C_s \cdot \operatorname{erfc}(\varphi)$$

Considerando una concentrazione massima pari al valore limite di $5 \cdot 10^{-3}$ ppm:

$$\frac{C_{\max}}{C_s} = \frac{5 \cdot 10^{-3}}{150} = 0.33 \cdot 10^{-4} = \operatorname{erfc}(\varphi) \quad \Rightarrow \quad \varphi = 2.9341 = \frac{z}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}}$$

$$t = \left(\frac{z}{2 \cdot 2.9341 \cdot \sqrt{4.4 \cdot 10^{-9}}} \right)^2 = 2.64 \cdot 10^7 \text{ secondi} \cong 305 \text{ giorni} \quad , \quad \text{con } z = 2 \text{ m}$$

Al pelo libero della falda sarà raggiunta la concentrazione massima ammissibile dopo 305 giorni dall'inizio del fenomeno diffusivo. Questo risultato sarà da confrontare con la soluzione ottenuta per via numerica col fine di verificare la corretta implementazione dei metodi numerici in Matlab.

Capitolo III – Soluzione numerica del problema

Per la risoluzione numerica del problema si è fatto riferimento al Metodo di Eulero ed al Metodo di Crank-Nicolson.

L'equazione differenziale presa in considerazione può essere scritta nel modo seguente:

$$u_t = D \cdot u_{xx}$$

$$u(0, t) = 150$$

$$u(z, 0) = 0$$

$$u(\infty, t) = 0$$

Dalle condizioni al contorno assegnate si capisce che la sorgente dell'inquinante è posta sul fondo ($z = 0$) e che l'immissione dell'inquinante avviene in maniera continuativa nel tempo. Inoltre si ha che all'istante iniziale l'inquinante non è presente e che a grande distanza dalla sorgente gli effetti della contaminazione sono trascurabili.

E' possibile notare che inizializzando la matrice, che verrà discussa in seguito, come una matrice di zeri, la dichiarazione delle condizioni al contorno spaziali in questo caso può essere omessa.

3.1 Metodi alle differenze finite

A partire dall' equazione

$$u_t = D \cdot u_{xx}$$

$$u(0, t) = 150$$

$$u(z, 0) = 0$$

$$u(\infty, t) = 0$$

è possibile approssimare il valore della derivata seconda come

$$U_{xx} = \frac{U_{i-1}^n - 2U_i^n + U_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$

mentre per andare avanti lungo l'asse temporale è possibile utilizzare una formulazione simile a quella di Cauchy:

$$y' = f(x, y)$$

$$y(x_0) = y_0$$

in cui, in questo caso la f vale $D \cdot u_{xx}$.

3.1.1 Metodo di Eulero

Il primo metodo implementato è quello esplicito di Eulero:

$$E_{i,j+1} = E_{i,j} + D \cdot \Delta t \cdot \left(\frac{E_{i+1,j} - 2E_{i,j} + E_{i-1,j}}{\Delta z^2} \right)$$

Dove:

Δz passo di integrazione spaziale

Δt passo di integrazione temporale.

Per le equazioni paraboliche vale la relazione:

$$\mu = \frac{\Delta t}{\Delta z^2}$$

Nel caso dell'equazione della diffusività si può scrivere:

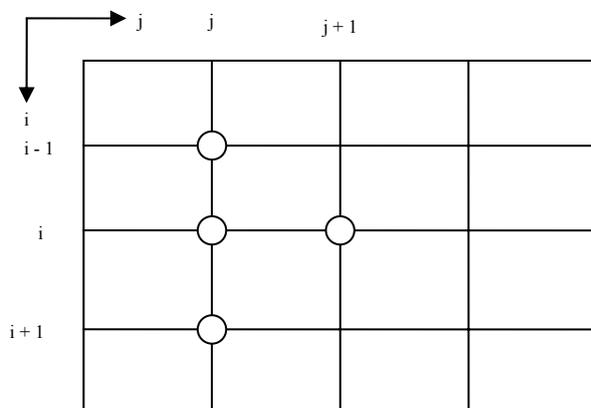
$$\mu = \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta z^2}$$

E' possibile inoltre dimostrare il seguente teorema:

Se $\mu \leq \frac{1}{2}$ allora il metodo è convergente.

Dunque è necessario dare la dovuta attenzione nello scegliere i passi di integrazione.

Per la rappresentazione del dominio si è fatto riferimento ad una matrice costruita in questo modo:



Per calcolare i valori incogniti del livello successivo tramite il Metodo di Eulero si fa ricorso ai valori noti del livello precedente. Essendo noti tre bordi del contorno del dominio è possibile calcolare il campo di concentrazione di tutto il dominio facendo ricorso ad un ciclo for.

Dato che il dominio preso in considerazione ha uno sviluppo di 2 m e deve essere calcolato il campo delle concentrazioni per un arco temporale di almeno 305 giorni (vedi la soluzione analitica), per ottenere una matrice di dimensioni accettabili si è deciso di scegliere come scala dei tempi i giorni e come scala delle lunghezze i centimetri.

Affinché il metodo converga è necessario che sia rispettato il teorema sopra esposto, dunque sono stati scelti come passi di integrazione i seguenti valori (con $D = 3.8016 \text{ cm}^2 / \text{giorno}$):

$$\Delta z = 4 \text{ cm}$$

$$\Delta t = 2 \text{ giorni.}$$

3.1.2 Metodo di Crank-Nicolson

Il secondo metodo implementato è quello implicito di Crank-Nicolson:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \frac{\Delta t}{2} [DC_{xx}|_n + DC_{xx}|_{n+1}]$$

Con la discretizzazione già esposta della derivata seconda e, analogamente a quanto già fatto, definendo:

$$\mu = \frac{\Delta t}{\Delta z^2}$$

si può scrivere che:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \frac{1}{2} \cdot \mu \cdot D \cdot [(C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n) + (C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1})]$$

Riordinando la formula precedente è possibile scrivere che, per i punti interni al dominio, ossia per i che va da 2 a $Z-1$:

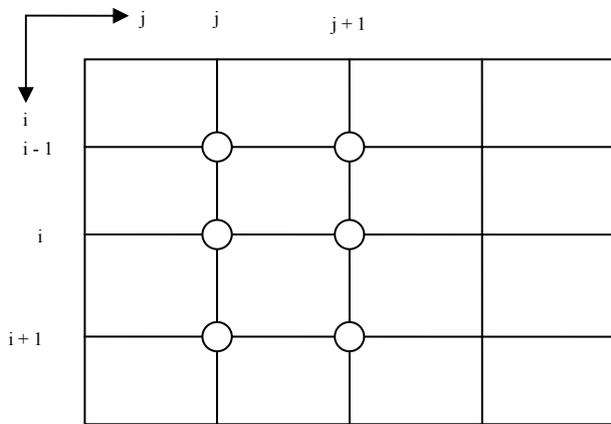
$$-\frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{i-1}^{n+1} + (\mu \cdot D + 1) \cdot C_i^{n+1} - \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{i+1}^{n+1} = \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{i-1}^n + (1 - \mu \cdot D) \cdot C_i^n + \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{i+1}^n$$

Agli estremi del campo di integrazione, invece, si ha

$$(\mu \cdot D + 1) \cdot C_1^{n+1} - \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_2^{n+1} = (1 - \mu \cdot D) \cdot C_1^n - \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_2^n + \frac{C_0^n + C_0^{n+1}}{2} \cdot \mu \cdot D \quad \text{per } i = 1$$

$$(\mu \cdot D + 1) \cdot C_Z^{n+1} - \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{Z-1}^{n+1} = (1 - \mu \cdot D) \cdot C_Z^n + \frac{1}{2}\mu \cdot D \cdot C_{Z-1}^n + \frac{C_{Z+1}^n + C_{Z+1}^{n+1}}{2} \cdot \mu \cdot D \quad \text{per } i = Z$$

Si riporta di seguito la schematizzazione della matrice:



Nella generalità dei casi, ad ogni passo, il metodo richiede la risoluzione di un sistema lineare, così schematizzabile:

$$A \cdot C^{n+1} = B \cdot C^n + f$$

in cui:

$$A = \begin{bmatrix} 1 + \mu \cdot D & -\frac{1}{2} \mu \cdot D & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2} \mu \cdot D & 1 + \mu \cdot D & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 + \mu \cdot D & -\frac{1}{2} \mu \cdot D \\ 0 & \dots & \dots & -\frac{1}{2} \mu \cdot D & 1 + \mu \cdot D \end{bmatrix} \quad \text{di dimensioni } Z \times Z$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 - \mu \cdot D & \frac{1}{2} \mu \cdot D & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{2} \mu \cdot D & 1 - \mu \cdot D & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 - \mu \cdot D & \frac{1}{2} \mu \cdot D \\ 0 & \dots & \dots & \frac{1}{2} \mu \cdot D & 1 - \mu \cdot D \end{bmatrix} \quad \text{di dimensioni } Z \times Z$$

$$f = \begin{bmatrix} \frac{C_0^n + C_0^{n+1}}{2} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ \frac{C_{Z+1}^n + C_{Z+1}^{n+1}}{2} \end{bmatrix} \quad \text{di dimensione } Z$$

I Metodi di Eulero e di Crank-Nicolson verranno implementati nel capitolo IV.

Capitolo IV – Implementazione in Matlab

I parametri da prendere in considerazione sono:

```
%Parametri del problema
D=3.8016; %diffusività [cm^2/giorno] = 4.4*10^(-9) [m^2/s]
Z=50; %numero di passi in direzione z
T=170; %numero di passi in direzione t
dt=2; %passo di integrazione temporale [giorni]
dz=4; %passo di integrazione spaziale [cm]
mu=dt/(dz^2);
```

Affinché si abbia convergenza si deve avere:

```
%Verifica stabilità
if (mu*D)>0.5
    warning('Condizione di stabilità non rispettata. Modificare i passi di integrazione.')
```

```
end
```

Se tale condizione non venisse rispettata nella scelta dei passi di integrazione viene visualizzato un *warning* ma l'elaborazione continua comunque. Questo fatto si riprenderà inseguito quando si mostrerà che anche quando il Metodo di Eulero non converge il Metodo di Crank-Nicolson converge.

Si noti che affinché sia assicurata la convergenza il passo temporale deve essere molto più piccolo

del passo spaziale, infatti si deve avere che: $dt < \frac{0.5 \cdot dz^2}{D}$.

Si definiscono le matrici e le condizioni iniziali del problema:

```
%Definizione matrici
%Matrice di Eulero
E=zeros(Z+2,T+1);

%Matrici di Crank-Nicolson
A=diag((1+mu*D)*ones(Z,1))+diag(-(1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),-1)+diag(-(1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),1);
B=diag((1-mu*D)*ones(Z,1))+diag((1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),-1)+diag((1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),1);
C=zeros(Z+2,T+1);
f=zeros(Z,1);
f(1,1)=150*mu*D;

%Condizioni iniziali del problema
E(1,:)=150;
C(1,:)=150;

i=0;
j=0;
```

Si implementa il Metodo di Eulero:

```
%Eulero
for t=1:T
E(2:Z+1,t+1)=E(2:Z+1,t)+mu*D*(E(1:Z,t)-2*E(2:Z+1,t)+E(3:Z+2,t));

    if E(Z,t+1)>5*10^(-3) & i==0
        i=t+1;
    end

figure(1); clf;
plot (E); grid; xlabel('Altezza falda'); ylabel('Concentrazione [ppm]');
title('METODO DI EULERO - Profilo di concentrazione al variare del tempo');

figure(2); clf;
pcolor(E); xlabel('Tempo'); ylabel('Altezza falda');
shading interp; colorbar;
title('METODO DI EULERO - Campo di concentrazione nel dominio');
end
sprintf('Eulero: Il valore massimo di concentrazione al pelo libero della falda
        è stato superato il giorno %d.',i*dt)
```

Attraverso l' *if* interno al ciclo *for* si vuole trovare il valore temporale al quale viene raggiunta la concentrazione massima ammissibile al pelo libero della falda. Tale valore verrà mostrato a video all'uscita dal ciclo *for*. Questa operazione viene eseguita al fine di confrontare tale risultato con la soluzione analitica, con lo scopo di voler verificare la corretta implementazione del metodo.

Per il Metodo di Crank-Nicolson:

```
%Crank-Nicolson
[L,U] = lu(A);
for t=1:T
C(2:Z+1,t+1)=U\ (L\ (B*C(2:Z+1,t)+f));

    if C(Z,t+1)>5*10^(-3) & j==0
        j=t+1;
    end

figure(3); clf;
plot (C); grid; xlabel('Altezza falda'); ylabel('Concentrazione [ppm]');
title('METODO DI CRANK-NICOLSON - Profilo di concentrazione al variare del tempo');

figure(4); clf;
pcolor(C); xlabel('Tempo'); ylabel('Altezza falda');
shading interp; colorbar;
title('METODO DI CRANK-NICOLSON - Campo di concentrazione nel dominio');
end
sprintf('CN: Il valore massimo di concentrazione al pelo libero della falda è stato
        superato il giorno %d.',j*dt)
```

Si riporta di seguito il listato completo e i grafici ottenuti:

```

1  %Parametri del problema
2  D=3.8016; %diffusività [cm^2/giorno] = 4.4*10^(-9) [m^2/s]
3  Z=50; %numero di passi in direzione z
4  T=170; %numero di passi in direzione t
5  dt=2; %passo di integrazione temporale [giorni]
6  dz=4; %passo di integrazione spaziale [cm]
7  mu=dt/(dz^2);
8
9  %Verifica stabilità
10 if (mu*D)>0.5
11     warning('Condizione di stabilità non rispettata. Modificare i passi di integrazione.')
```

```

12 end
13
14 %Definizione matrici
15 %Matrice di Eulero
16 E=zeros(Z+2,T+1);
17
18 %Matrici di Crank-Nicolson
19 A=diag((1+mu*D)*ones(Z,1))+diag(-(1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),-1)+diag(-(1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),1);
20 B=diag((1-mu*D)*ones(Z,1))+diag((1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),-1)+diag((1/2)*mu*D*ones(Z-1,1),1);
21 C=zeros(Z+2,T+1);
22 f=zeros(Z,1);
23 f(1,1)=150*mu*D;
24
25 %Condizioni iniziali del problema
26 E(1,:)=150;
27 C(1,:)=150;
28
29 i=0;
30 j=0;
31
32 %Eulero
33 for t=1:T
34     E(2:Z+1,t+1)=E(2:Z+1,t)+mu*D*(E(1:Z,t)-2*E(2:Z+1,t)+E(3:Z+2,t));
35
36     if E(Z,t+1)>5*10^(-3) & i==0
37         i=t+1;
38     end
39
40 figure(1); clf;
41 plot(E); grid; xlabel('Altezza falda'); ylabel('Concentrazione [ppm]');
42 title('METODO DI EULERO - Profilo di concentrazione al variare del tempo');
```

```

43
44 figure(2); clf;
45 pcolor(E); xlabel('Tempo'); ylabel('Altezza falda');
46 shading interp; colorbar;
47 title('METODO DI EULERO - Campo di concentrazione nel dominio');
```

```

48 end
49 sprintf('Eulero: Il valore massimo di concentrazione al pelo libero della falda è stato superato il giorno %d.',i*dt)
50
51 %Crank-Nicolson
52 [L,U] = lu(A);
53 for t=1:T
54     C(2:Z+1,t+1)=U\ (L\ (B*C(2:Z+1,t)+f));
55
56     if C(Z,t+1)>5*10^(-3) & j==0
57         j=t+1;
58     end
59
60 figure(3); clf;
61 plot(C); grid; xlabel('Altezza falda'); ylabel('Concentrazione [ppm]');
62 title('METODO DI CRANK-NICOLSON - Profilo di concentrazione al variare del tempo');
```

```

63
64 figure(4); clf;
65 pcolor(C); xlabel('Tempo'); ylabel('Altezza falda');
66 shading interp; colorbar;
67 title('METODO DI CRANK-NICOLSON - Campo di concentrazione nel dominio');
```

```

68 end
69 sprintf('CN: Il valore massimo di concentrazione al pelo libero della falda è stato superato il giorno %d.',j*dt)

```

Tramite il Metodo di Eulero utilizzando come passi di integrazione spaziale e temporale:

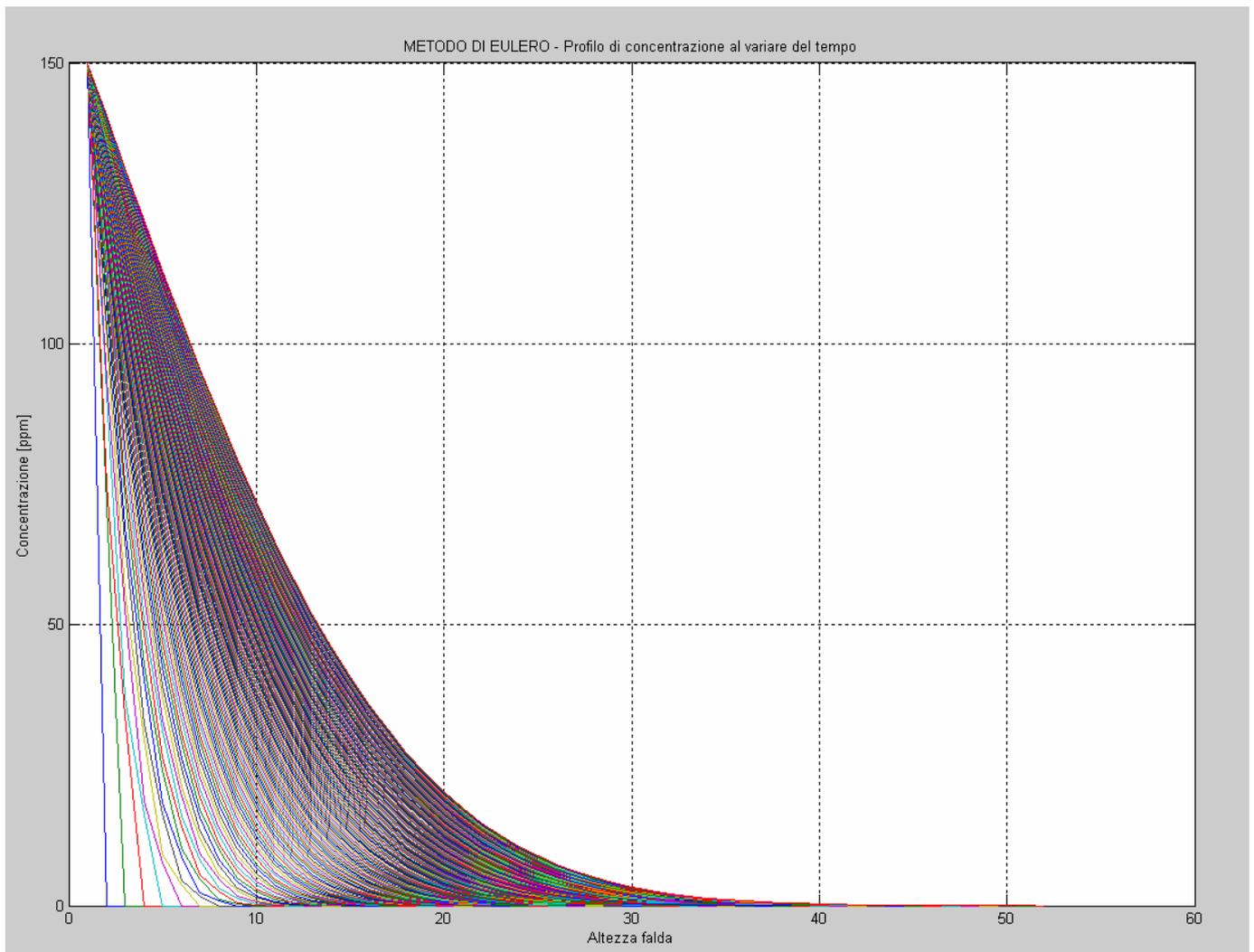
$$dz = 4 \text{ cm} \quad \Longrightarrow \quad Z = 50$$

$$dt = 2 \text{ giorni} \quad \Longrightarrow \quad T = 170$$

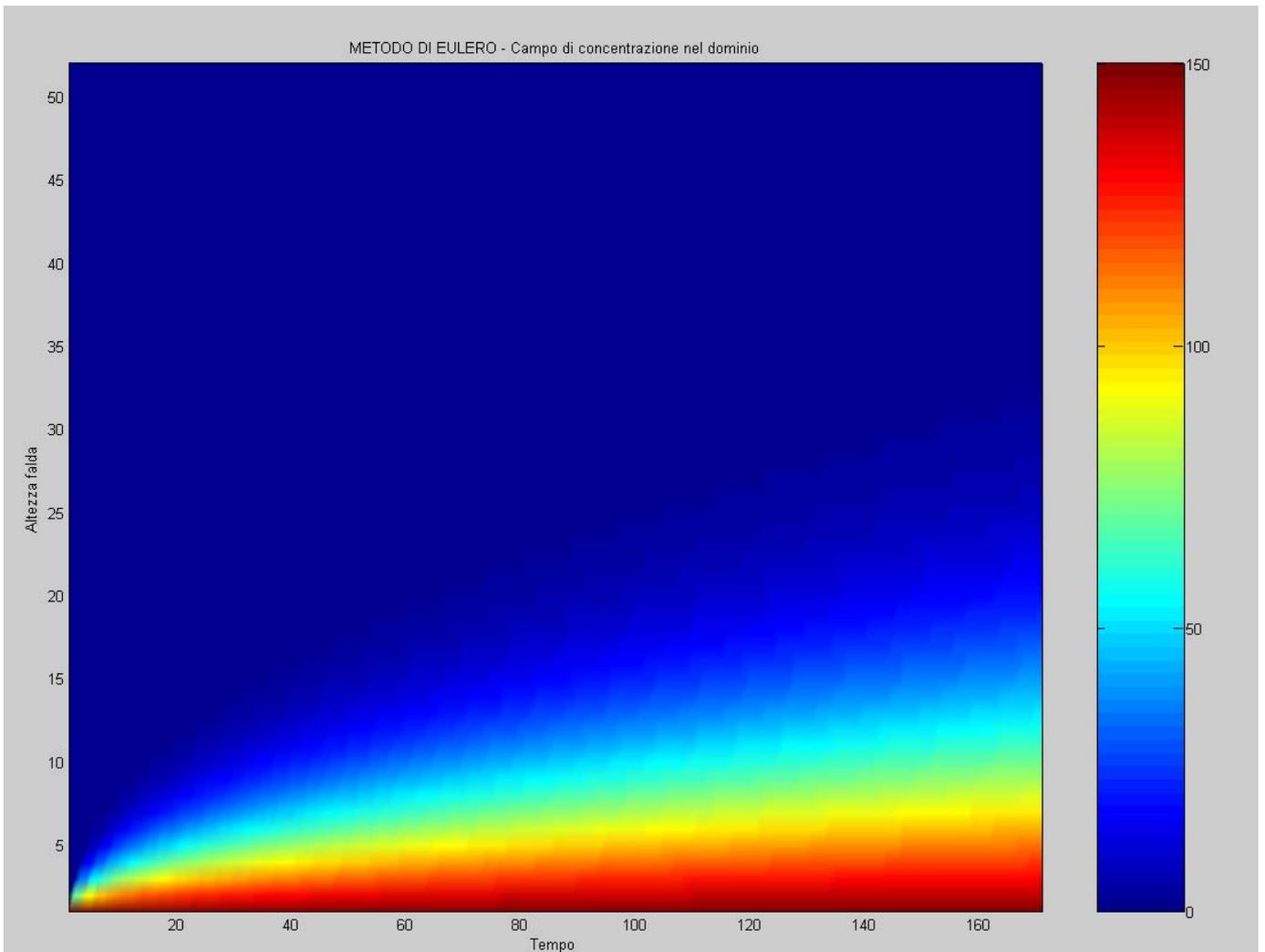
$$\text{con: } \mu = \frac{D \cdot dt}{dx^2} = 0.4752 < 0.5$$

si ottiene:

Metodo di Eulero – Profilo di concentrazione con $dz = 4 \text{ cm}$ e $dt = 2 \text{ giorni}$:



Metodo di Eulero – Campo di concentrazione con $dz = 4$ cm e $dt = 2$ giorni:



La concentrazione massima di $5 \cdot 10^{-3}$ ppm per il Metodo di Eulero si ottiene a 308 giorni.

Tramite il Metodo di Crank-Nicolson utilizzando come passi di integrazione spaziale e temporale:

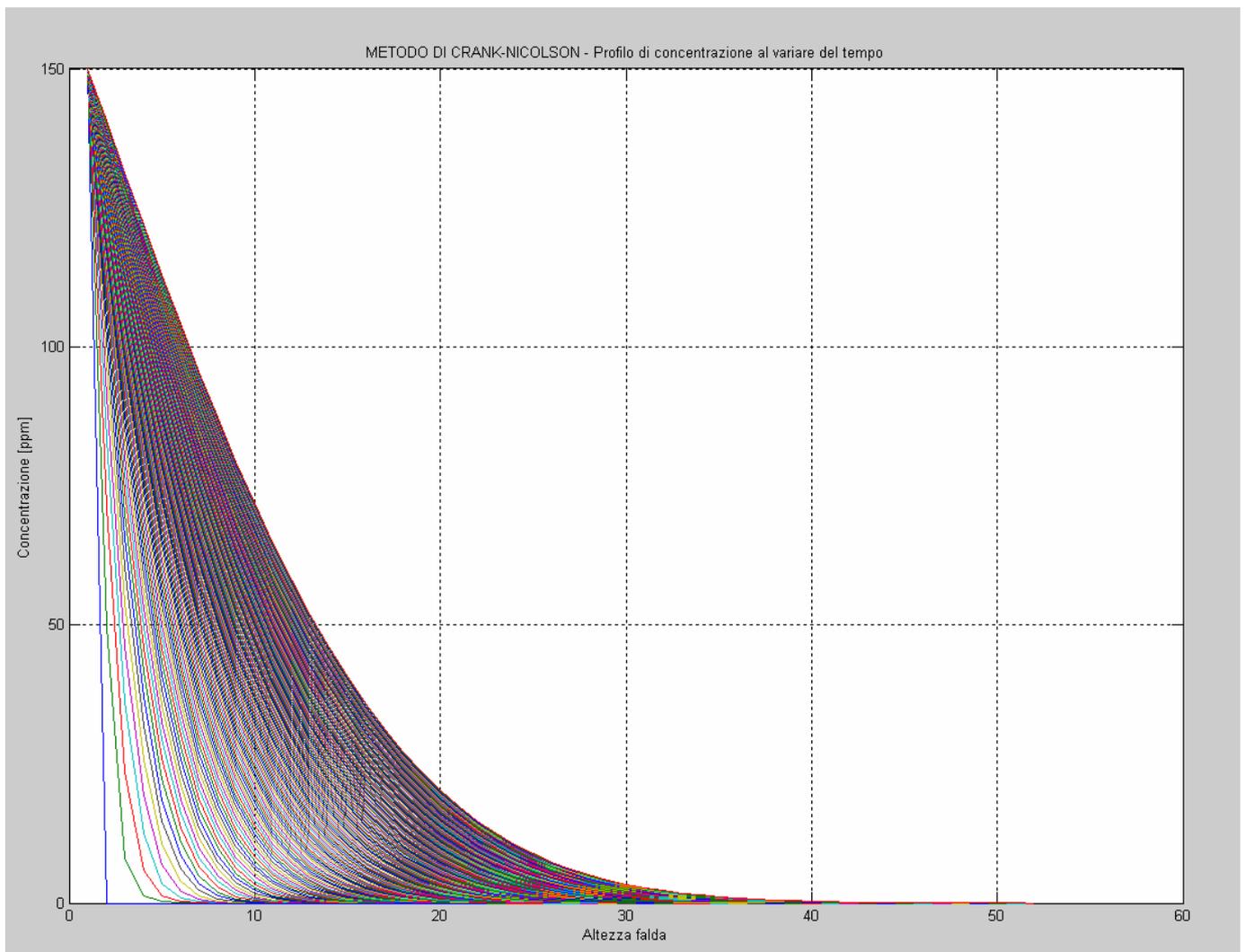
$$dz = 4 \text{ cm} \quad \Longrightarrow \quad Z = 50$$

$$dt = 2 \text{ giorni} \quad \Longrightarrow \quad T = 170$$

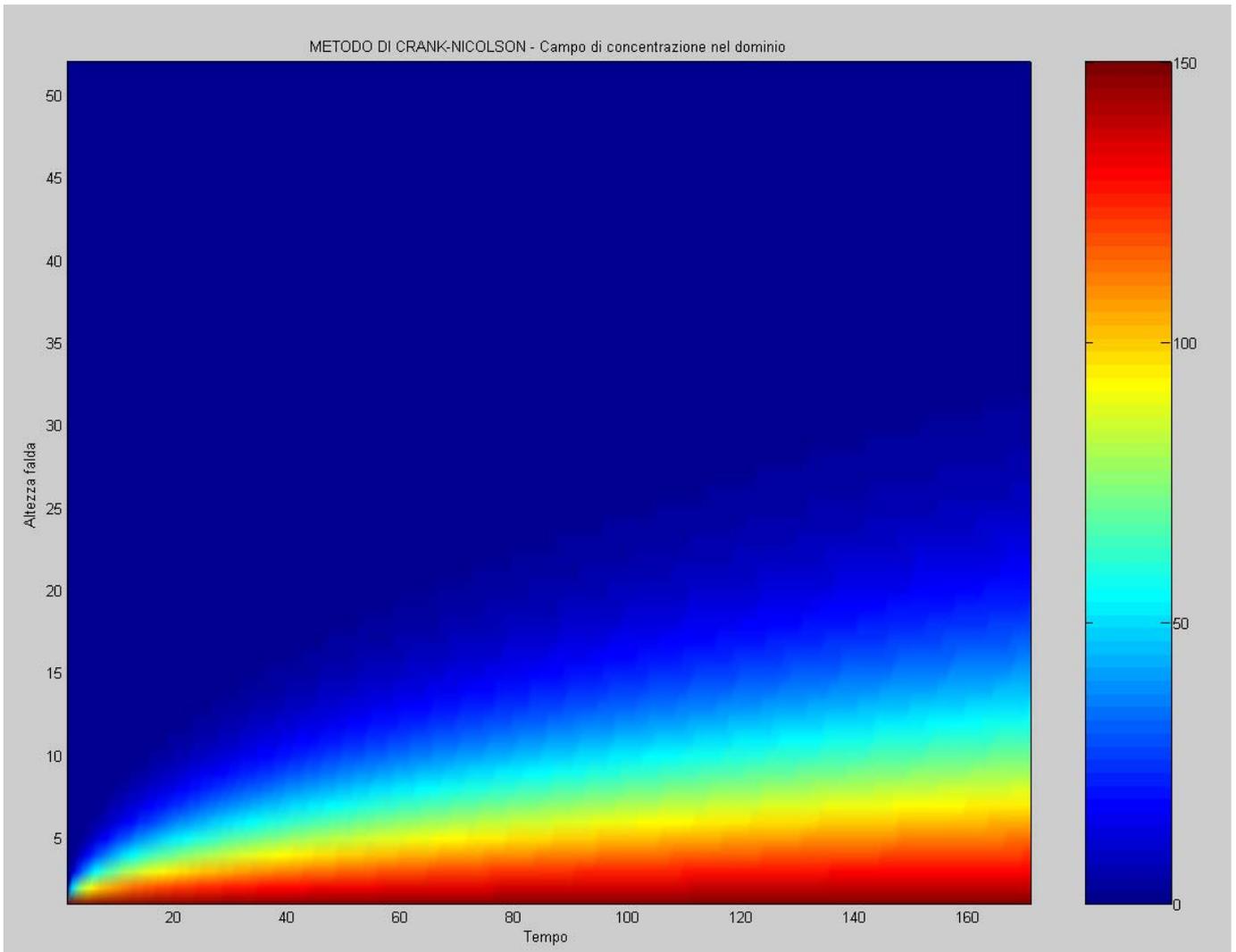
$$\text{con: } \mu = \frac{D \cdot dt}{dx^2} = 0.4752 < 0.5$$

si ottiene:

Metodo di Crank-Nicolson – Profilo di concentrazione con $dz = 4 \text{ cm}$ e $dt = 2 \text{ giorni}$:



Metodo di Crank-Nicolson – Campo di concentrazione con $dz = 4$ cm e $dt = 2$ giorni:



La concentrazione massima di $5 \cdot 10^{-3}$ ppm per il Metodo di Eulero si ottiene a 302 giorni.

Tramite il Metodo di Eulero utilizzando come passi di integrazione spaziale e temporale:

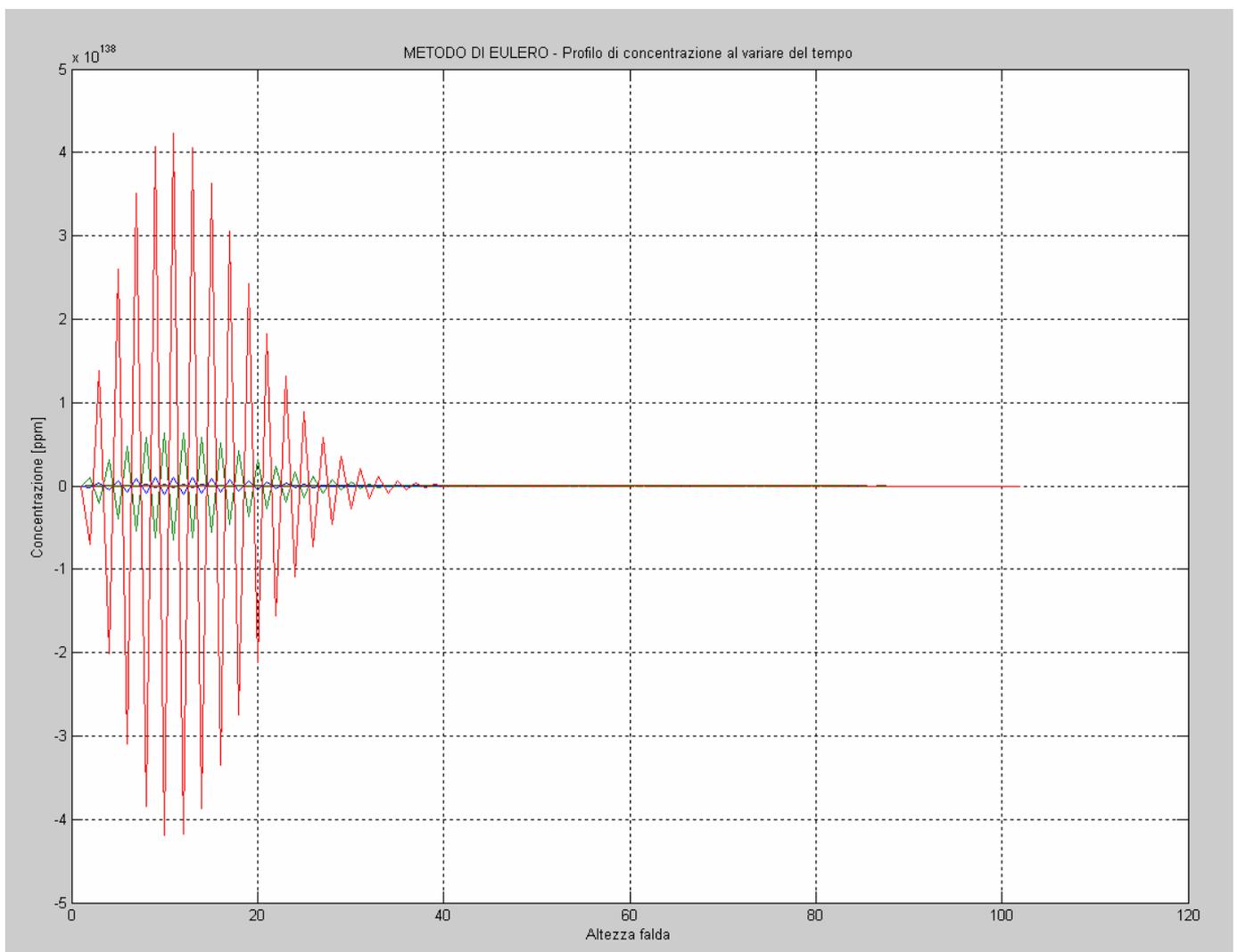
$$dz = 2 \text{ cm} \quad \Longrightarrow \quad Z = 100$$

$$dt = 2 \text{ giorni} \quad \Longrightarrow \quad T = 170$$

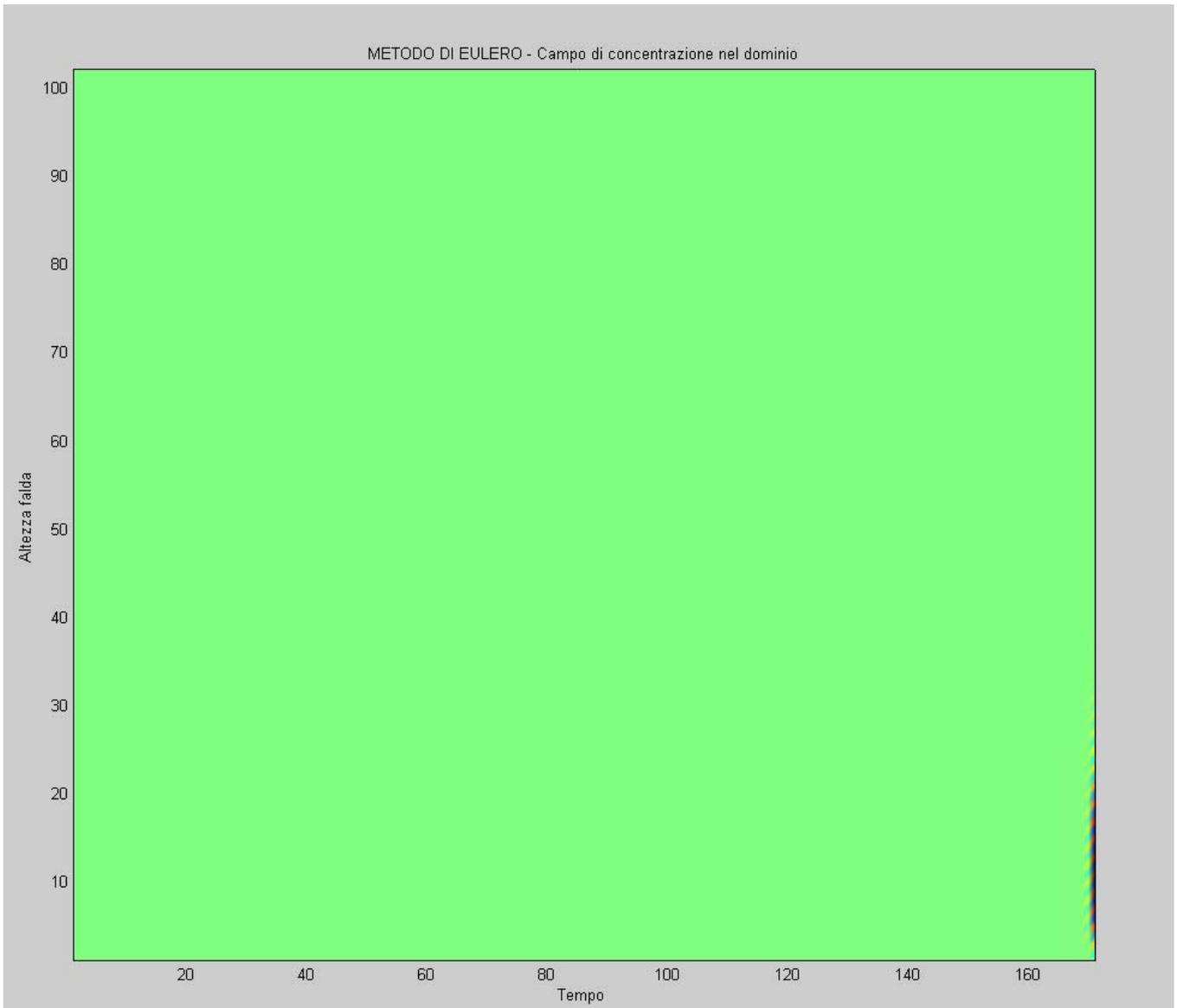
$$\text{con: } \mu = \frac{D \cdot dt}{dx^2} = 1.9008 > 0.5$$

si ottiene:

Metodo di Eulero – Profilo di concentrazione con $dz = 2 \text{ cm}$ e $dt = 2 \text{ giorni}$:



Metodo di Eulero – Profilo di concentrazione con $dz = 2$ cm e $dt = 2$ giorni:



Il metodo di Eulero con $\mu > 0.5$ non converge e perde di significato fisico.

Tramite il Metodo di Crank-Nicolson utilizzando come passi di integrazione spaziale e temporale:

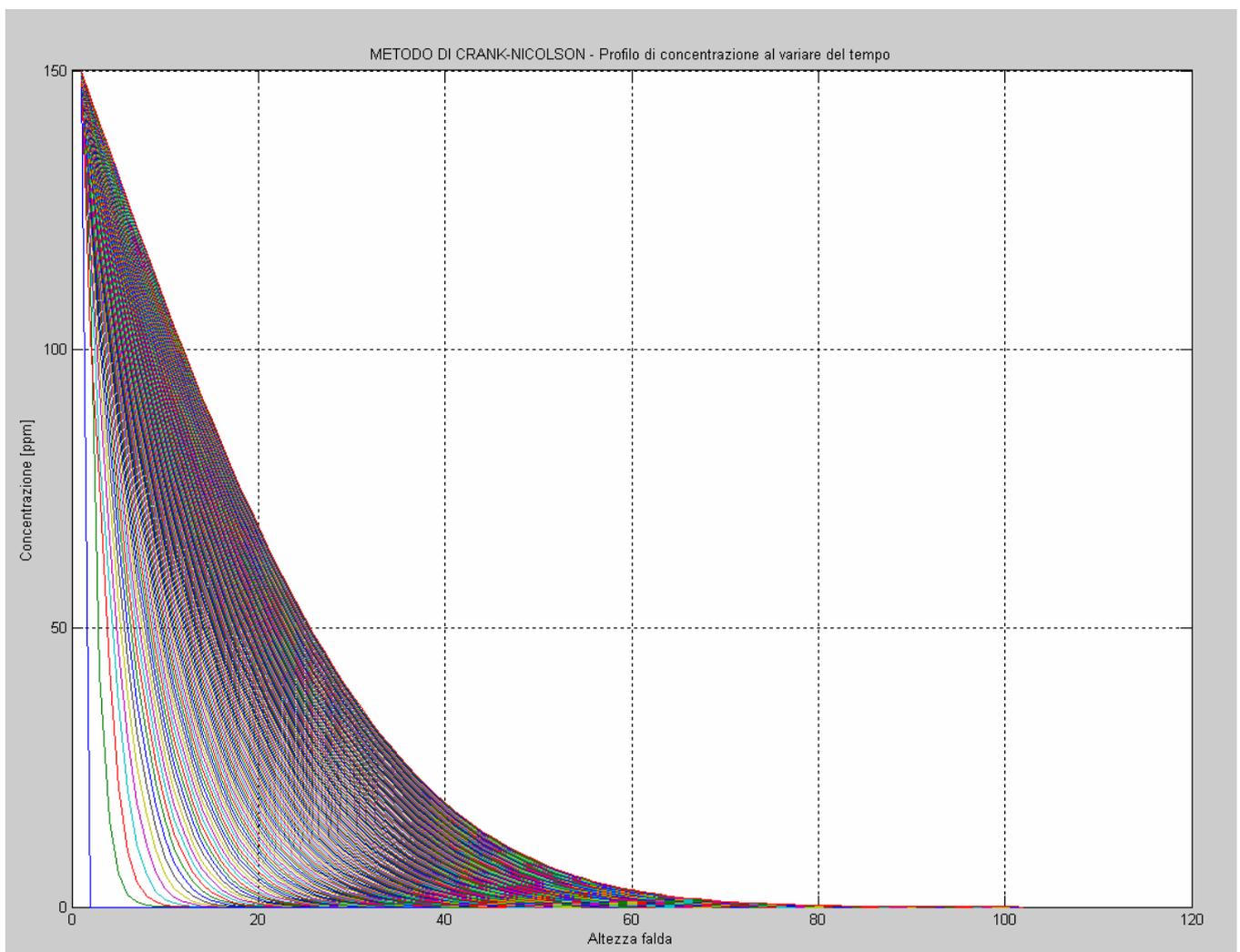
$$dz = 2 \text{ cm} \quad \Longrightarrow \quad Z = 100$$

$$dt = 2 \text{ giorni} \quad \Longrightarrow \quad T = 170$$

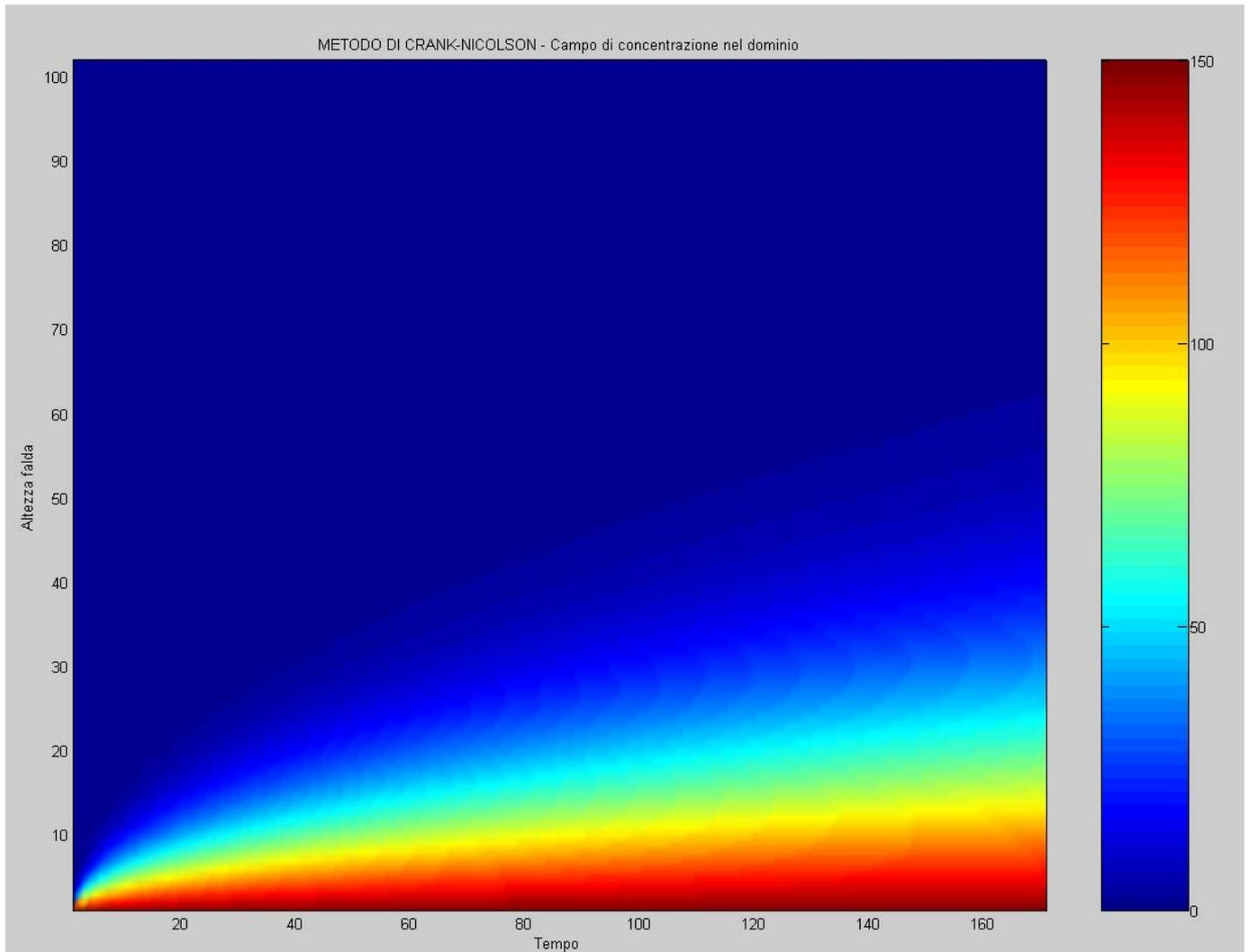
$$\text{con: } \mu = \frac{D \cdot dt}{dx^2} = 1.9008 > 0.5$$

si ottiene:

Metodo di Crank-Nicolson – Profilo di concentrazione con $dz = 2 \text{ cm}$ e $dt = 2 \text{ giorni}$:



Metodo di Crank-Nicolson – Campo di concentrazione con $dz = 2$ cm e $dt = 2$ giorni:



Il Metodo di Crank-Nicolson con $\mu > 0.5$ converge. Ciò significa che è possibile avere una discretizzazione più fitta rispetto al Metodo di Eulero.

Conclusioni

Sia con il metodo di Eulero che col metodo di Crank-Nicolson si sono trovati risultati concordanti con la teoria e con la soluzione analitica del problema.

Infatti i profili di concentrazione al variare del tempo sono in accordo con i profili reperibili in letteratura.

Inoltre dalla soluzione analitica si è trovato che la concentrazione massima ammissibile di $5 * 10^{-3}$ ppm si raggiunge al pelo libero della falda al giorno 305. Dalla soluzione numerica si ottiene che tale valore di concentrazione viene raggiunto con il Metodo di Eulero al giorno 308, mentre per il Metodo di Crank-Nicolson al giorno 302. Ciò conferma il corretto procedimento adottato al fine di risolvere il problema numericamente.

Variando i passi di discretizzazione in modo che non sia verificata la condizione per cui è assicurata la convergenza, si è notato che il Metodo di Crank-Nicolson continua a convergere anche quando il Metodo di Eulero non converge e perde di significato fisico. Ciò comporta che con il Metodo di Crank-Nicolson è possibile effettuare una discretizzazione più accurata, dato che si possono scegliere dei passi di integrazione spaziale più piccoli a parità di passo temporale rispetto al Metodo di Eulero.

Nel listato relativo al metodo di Crank-Nicolson si è scelto di fattorizzare LU la matrice A , perché Matlab è in grado di riconoscere le matrici triangolari risultanti, diminuendo il numero di operazioni e l'entità degli errori.

Questo non è strettamente necessario in quanto la matrice A risulta tridiagonale e diagonalmente dominante: anche in questo caso il software sarebbe stato in grado di risolverla con un algoritmo particolarmente efficiente.