Metodi Numerici, a.a. 2011-2012. Progetto Finale n.4 (F. Memma)
 (da articolo Ecological Modelling 220 (2009) 27512769)

La seguente equazione differenziale descrive in una approssimazione 1D (mediando su piani paralleli alla superficie del sedimento), la variazione temporale nella concentrazione delle sostanze disciolte nel sedimento (mediante processi di diffusione molecolare, deposizione, *bioturbamento* e di compressione):

$$\frac{\partial S_i}{\partial t} = \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{S_i} \frac{\partial S_i}{\partial z} \right) + \frac{1}{\theta} r_{S_i}, \quad z \in [z_{surf}, z_{max}], t \geq 0,$$

con condizioni al bordo $S_i(z_{surf}) = S_{i,wat}$ (alla superficie) e $\frac{\partial S_i}{\partial z}(z_{max}) = 0$. In questa equazione, t è il tempo, z è la coordinata di profondità nel sedimento ($z_{surf} = 0$ sulla superficie del sedimento, ed è positivo andando all'ingiù, z_{max} è la coordinata più profonda), S_i è la concentrazione della sostanza disciolta "i" nel *sediment pore water* (massa per volume di pore water), θ è la porosità del sedimento, D_{S_i} è il coefficiente di diffusione molecolare della sostanza i , r_{S_i} è il rapporto di trasformazione totale della sostanza i disciolta (massa per volume di sedimento totale e tempo).

Si considerino i seguenti valori dei coefficienti per la sostanza $i = O_2$ (si veda Tab.1):

- * $z_{surf} = 0cm, z_{max} = 0.3cm$
- * $S_{i,wat} = 0.25$
- * $\theta(z) = \frac{z-z_{max}}{z_{surf}-z_{max}}\theta_{surf} + \frac{z_{surf}-z}{z_{surf}-z_{max}}\theta_{deep}$, con $\theta_{deep} = 0.75, \theta_{surf} = 0.95$
- * $r_{S_i} = 0.5$
- * Condizione iniziale: $S_i(z, 0) = S_{i,wat} + \sin(\frac{z}{z_{max}} \frac{\pi}{2})$.

Determinare una approssimazione della soluzione del problema parabolico mediante differenze finite, sfruttando un metodo *implicito* per la discretizzazione temporale. In particolare:

1. Presentare una breve introduzione al problema;
2. Presentare il metodo numerico usato;
3. Visualizzare l'evoluzione della soluzione mediante grafico bi/tridimensionale;
4. Studiare graficamente il comportamento del modello all'aumentare dei punti di griglia spaziali.
5. Studiare come varia la soluzione numerica al variare di $\theta_{deep}, \theta_{surf}$; giustificare fisicamente una tale eventuale scelta di coefficienti.