



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.
CORSO DI LAUREA IN MATEMATICA

Tesi di Laurea Magistrale in Matematica

Modelli matematici di biorisanamento ambientale

Candidata
Valentina Pitzianti

Relatore
Prof. Renato Spigler

ANNO ACCADEMICO 2008-2009
Ottobre 2009

Classificazione AMS: 34B14, 35E99, 35G60, 35K55, 35K57, 35K61, 35Q92, 65L10, 65L12, 65N06

Parole chiave: biorisanamento, equazioni di reazione-diffusione, equazioni differenziali alle derivate parziali non lineari, equazioni differenziali ordinarie non lineari.

Prefazione

Nel mio lavoro ho evidenziato ed analizzato il problema del biorisanamento dei terreni.

Sono partita con lo studio di una parte introduttiva riguardante le strutture chimico-fisiche del terreno, sintetizzate nelle equazioni di reazione e diffusione, che considerano il bilancio di massa del substrato, dell'ossigeno e della biomassa. Per risolvere il sistema delle tre equazioni differenziali ho usato il metodo alle differenze finite, esplicito ed implicito, in una e due dimensioni. Per rendere visibili i risultati del mio studio, ho rappresentato con dei grafici le soluzioni delle concentrazioni trovate e ne ho evidenziato il loro comportamento. Inoltre ho analizzato, per quanto riguarda la risoluzione analitica del sistema, diversi teoremi per portare a delle conclusioni riguardo l'esistenza e l'unicità della soluzione del problema studiato, portando degli esempi di soluzioni appropriate. Gran parte del mio operato è stato quello di creare dei codici, in Matlab e Fortran 90, che permettessero la risoluzione numerica del sistema di equazioni differenziali; ho realizzato codici sia per quanto concerne il metodo esplicito che quello implicito.

Ringraziamenti

Ringrazio il Ch.mo Prof. Ing. Renato Spigler per avermi dato l'opportunità di approfondire un argomento così importante ed attuale, che da tempo era nei miei interessi.

Vorrei porgere, inoltre, un sentito ringraziamento, per il supporto dato, riguardo alla compilazione dei codici in Fortran 90, al Dottor Piero Lanucara.

Indice

1	Introduzione	4
2	Sviluppo del modello	10
2.1	Premesse	10
2.2	Notazioni	11
2.3	Formulazione del problema	13
2.4	Derivazione dell'equazione per il bilancio di massa	18
3	Algoritmo	20
3.1	Modello numerico	20
3.2	Metodo esplicito	21
3.3	Metodo implicito	25
4	Comportamento delle concentrazioni	31
4.1	Analisi dei risultati	31
4.2	Studio del comportamento delle soluzioni	36
	Idee per sviluppi futuri	40
A	Definizioni e concetti fondamentali	41
B	Programmi usati per calcolare la soluzione del problema	52
B.0.1	Programma unidimensionale	52
B.0.2	Programma bidimensionale esplicito	56
B.0.3	Programma bidimensionale implicito	62
	Bibliografia	76

Capitolo 1

Introduzione

I progressi dell'uomo in ambito scientifico e tecnologico hanno determinato un grande sviluppo dell'attività industriale ed agricola. Ciò ha permesso un netto miglioramento delle condizioni di vita umane, che a sua volta ha aumentato le esigenze di beni e di servizi per l'umanità stessa. Tutte queste attività, da quella in macroscala della produzione industriale ed agricola, a quella in microscala individuale, rilasciano sostanze chimiche che inesorabilmente si riversano nella biomassa, cioè nello strato di aria, suolo ed acqua di cui è costituito il nostro Pianeta. Questo determina un impatto sempre più aggressivo nei confronti dell'ambiente, che in questo modo viene profondamente degradato. Infatti, al giorno d'oggi, questo è uno dei problemi principali attuali dei più importanti Paesi del mondo.

Quando, ad esempio, si è in presenza dell'inquinamento dell'acqua sotterranea, è necessario eliminare la sorgente inquinante. Fatto ciò, l'inquinante nella falda comunque si sposta e bisogna perciò cercare di bloccarlo ed eliminarlo.

I problemi di inquinamento riscontrati sono due: quelli accidentali, ma localizzati, che avvengono di tanto in tanto e quelli ciclici che avvengono in una zona molto ampia e le sorgenti inquinanti sono disseminate in essa.

Ne segue che anche i metodi di bonifica sono diversi. Ci sono quelli che non consentono all'inquinante di entrare nella falda o che ne bloccano lo spostamento, oppure quelli che bonificando l'acquifero rimuovono la sorgente inquinante ed anche l'acqua ed il terreno inquinati.

I primi problemi che si presentano e di cui bisogna tener conto sono la caratteristica idrogeologica e geochemica dell'acquifero inquinato e le proprietà chimico-fisiche dell'inquinante.

I motivi che non permettono di attuare la bonifica sono:

- la bassa velocità del flusso di falda,
- la difficoltà nel valutare gli effetti della permeabilità rispetto all'inquinante,
- il basso contenuto d'ossigeno e la mancanza di reattività biologica nell'acquifero,
- l'assorbimento di certi minerali nel suolo,
- il non poter portare da una zona all'altra le tecniche di bonifica,
- non conoscere quale sia la sorgente inquinante.

Si può attuare la bonifica nei seguenti modi:

- 1) Rimozione della sorgente inquinante.
- 2) Rimozione del suolo che è stato inquinato e rimpiazzo con un terreno pulito.
- 3) Costruzione di pozzi per drenare l'acqua inquinata che poi sarà 'curata' in un sito apposito.
- 4) Impermeabilizzazione della zona inquinata per non far lisciviare l'inquinante.
- 5) Costruzione di barriere impermeabili per circoscrivere la zona inquinata.
- 6) Provocare in situ reazioni chimico-biologiche per rendere inefficace e bloccare l'inquinante.

È di fondamentale importanza conoscere i cambiamenti del flusso di falda e delle concentrazioni chimiche nell'acquifero a seconda del metodo da usare, per stabilire ed attuare quale tipo di bonifica sia più adatta. Per fare ciò si ha bisogno dei dati basilari per poter studiare il sistema acquifero e di conseguenza elaborare un modello di simulazione per rappresentare il sistema di flusso come si sposta l'inquinante e la natura e velocità delle reazioni chimico-biologiche.

Gli inquinanti hanno varie complessità di problemi perché si presentano in tre modi differenti:

- i. materiale liquido che si deposita sul fondo oppure che rimane galleggiante sull'acqua,
- ii. porzione di questo materiale viene assorbito dal suolo,
- iii. porzione di questo materiale è in soluzione nell'acqua di falda.

La consistenza delle tre situazioni sopra descritte varia sia a seconda delle caratteristiche chimico-fisiche dell'inquinante e sia dalle caratteristiche idrogeologiche del terreno.

I materiali poco solubili nell'acqua si presentano sia allo stato liquido sia assorbiti dal terreno, ma c'è un'altra piccola parte che è in soluzione con l'acqua, ed è proprio questa, a causa del flusso di falda, ad inquinare le vaste zone della falda stessa.

La fase liquida si muove o defluisce molto lentamente, quella assorbita dal terreno non si sposta ma, potrebbe, al limite, subire un processo di lisciviazione o desorbimento ed entrare in soluzione con l'acqua.

Le operazioni di bonifica sono ostacolate dal fatto che queste tre fasi sono collegate tra di loro: il liquido scorre e viene un po' assorbito dal suolo che via via incontra. inoltre l'acqua che scende dai monti liscivia il terreno inquinato e diluisce parte del liquido, allungando così il pennacchio dell'acqua inquinata.

Per cui la bonifica deve tener conto di queste fasi tutte e tre insieme.

Lo scopo del mio studio è quello di trattare proprio di questo, nello specifico riguarda la bonifica di terreni attraverso particelle organiche.

I microrganismi esistenti nel sottosuolo hanno la capacità di biodegradare molti tipi di composti organici, specialmente se di origine naturale, mentre molti prodotti creati dall'uomo sono piuttosto refrattari a questo tipo di processo.

Di frequente nel sottosuolo esistono già microrganismi idonei allo scopo e in questi casi si tratta solo di farne aumentare la crescita aggiungendo nel terreno opportuni materiali nutritivi (azoto e fosforo). I prodotti nutritivi ed eventualmente anche l'ossigeno, se si tratta di microrganismi aerobici, devono essere immessi nel sottosuolo mediante dei pozzi; per la materia nutritiva si fanno soluzioni dello 0.005-0.02%, mentre l'ossigeno viene immesso allo stato naturale o anche in forma di perossido d'idrogeno (acqua ossigenata), che però è tossica per alcuni tipi di batteri. Se però nel terreno non esiste la specie di microrganismi adatta allo scopo, si deve operare in modo da immetterla nel sottosuolo.

Poiché la biodegradazione avviene da parte di alcuni tipi di microrganismi che vivono cibandosi dei prodotti inquinanti, è evidente che con il passare del tempo essi aumentano di numero andando ad intasare sempre più il terreno, con conseguente diminuzione della sua permeabilità, il che porta a bloccare, anche se parzialmente, l'immissione dei prodotti nutrienti stessi, causando l'interruzione del processo.

Come si può vedere, non è possibile fare una trattazione completa dell'argomento, in quanto ogni caso va studiato e risolto per suo conto; infatti si deve sapere se il prodotto inquinante è biodegradabile o meno ed eventualmente da quale specie di batteri. Questo non è argomento facile e alla portata di tutti e inoltre viene studiato solo da poco tempo; in merito esiste una letteratura limitata che dovrà essere attentamente studiata da chi è interessato al problema.

Anche questo metodo ha i suoi vantaggi e svantaggi. Tra i vantaggi si ricorda che è molto indicato per eliminare inquinanti organici e idrocarburi quando questi sono molto diluiti; è un metodo sicuro, veloce ed economico che non crea alterazioni idrologiche; non è necessario che la zona inquinata sia stazionaria perché il processo biodegradante avviene anche se essa è in movimento. Non è invece consigliabile per i seguenti motivi: non è adatto a certi tipi di inquinanti; i batteri e i loro escrementi possono causare l'intasamento del terreno; l'eventuale aggiunta di prodotti nutritivi può causare un'alterazione chimica dell'acqua di falda.

Questo metodo viene usato specialmente per eliminare quella parte di idrocarburi che sono in soluzione acquosa e che perciò non è possibile recuperare con i pozzi. Per esempio gli idrocarburi aromatici che sono più solubili di quelli alifatici.

Come tutti i metodi di bonifica, anche la biodegradazione presenta vantaggi e svantaggi. Fin'ora uno dei sistemi più diffusi è quello chiamato "pompa e tratta", sistema in cui le acque vengono pompate fino in superficie, trattate e poi scaricate nuovamente.

La bonifica in situ è molto efficace per la maggior parte degli inquinanti organici. L'acqua e i nutrienti sono applicati sulla superficie in modo tale che l'ossigeno e l'azoto siano trasportati con l'acqua al substrato. Tali acque possono essere trattate prima che siano rimesse in circolazione. Il ricircolo d'acqua solleva gli inquinanti dal suolo e fornisce ossigeno e nutrienti per la bonifica in situ. L'assorbimento convettivo, le trasformazioni chimiche e biologiche sono processi molto importanti che controllano il risultato finale

ed il trasporto di sostanze chimiche nel sottosuolo.

Secondo Mackay e Cherry (1989) [4], le falde acquifere contengono numerosi strati di fango e argilla nei quali è sensibile il trasporto per diffusione. Le particelle del suolo formano aggregati entro i quali il flusso convettivo è molto lento o addirittura assente. La dispersione e la convezione dominano il processo di trasporto nei macrovuoti, inoltre la diffusione è importante per il trasporto nella fase immobile.

Rao (1980), Goltz e Roberts (1986 e 1988), Crittenden (1986), Roberts (1987), Fong e Mulkey (1989) [4], hanno simulato il trasporto di soluto attraverso gli aggregati medi. Il vuoto nel suolo poroso medio consiste in una fase mobile, che ha pori relativamente ampi, detti macrovuoti, ed una fase immobile, tra piccoli pori, microvuoti. Pellet (1966), Satterfield (1973), Prasher e Ma (1977), Ball e Roberts (1990)[4] hanno esaminato l'importanza della diffusione di soluto ed i suoi assorbimenti negli aggregati per descrivere la dinamica nel terreno studiato. Erickson (1990) e Dhawan (1991)[4] hanno dimostrato che nella modellizzazione per la bonifica di contaminanti in più aggregati la diffusione nei pori deve essere considerata .

La biodegradazione degli organismi è stata studiata da numerosi ricercatori. Un problema associato al trattamento in situ della bonifica è la riduzione della permeabilità dovuta a biofilms microbici sia nei macrovuoti che nei pori più piccoli del suolo. Il problema è più serio per quanto riguarda l'applicazione o l'iniezione dei nutrienti.

Nell'articolo di Dhawan, Erickson e Fan (1993) [4] è stato sviluppato un modello di flusso misto di macropori, combinato con un modello di biorisanamento di aggregati contaminati per caratterizzare la bonifica nei macropori o negli spazi interstiziali tra gli aggregati del suolo, i macropori e le particelle del terreno negli aggregati del letto. Si possono così esaminare gli effetti della riparazione del suolo e dell'acqua del substrato, la concentrazione iniziale del contaminante e le dimensioni degli aggregati sulla velocità di degradazione del contaminante tramite la simulazione numerica del comportamento dinamico del processo di biorisanamento. L'ossigeno è comunemente utilizzato per contenere gli elettroni per la bonifica eterotrofica, tuttavia la sua concentrazione nel sottosuolo è spesso bassa. La velocità di bonifica in situ è spesso limitata dalla velocità di trasporto dell'ossigeno nei microrganismi, e ciò limita la determinazione del tempo totale di biorisanamento. Molti modelli numerici di bonifica prendono in considerazione il trasporto dell'ossigeno anche se, come citato prima, esso è limitativo. Poiché l'inquinante organico si diffonde

fuori dall'aggregato mentre l'ossigeno si diffonde all'interno, il tempo di biorisanamento dipende da entrambi i reagenti. In questo modello vengono considerati la diffusione, i contaminanti e l'assorbimento della biomassa nonché la biodegradazione.

Nel 1991 Dhawan [5] ha simulato il biorisanamento negli aggregati, dimostrando che il tempo di bonifica è notevolmente ridotto rispetto al processo "pompa e tratta", nel quale si considera solo il trasporto del contaminante. Attualmente, vi è una notevole incertezza associata alla previsione del risanamento di siti contaminati. Uno degli obiettivi di questo lavoro è sviluppare un modello che possa stimare l'andamento delle concentrazioni presenti in fase di bonifica.

Si è considerato un modello di flusso misto di macropori perché esso può essere combinato facilmente con il modello per la diffusione e la biodegradazione all'interno degli aggregati. Un altro obiettivo di questo lavoro è quello di esaminare gli effetti della partizione del coefficiente suolo-acqua del contaminante, la concentrazione iniziale di contaminante e le dimensioni degli aggregati nel tempo di biorisanamento. Per comodità, il modello di flusso misto viene usato per rappresentare il flusso nei macrovuoti.

Capitolo 2

Sviluppo del modello

Gli inquinanti organici sono considerati, inizialmente, depositati in modo uniforme nel letto del terreno. I microrganismi sono sospesi in acqua sia nei macropori che nei micropori e sono uniti in gruppi alla superficie solida. I microrganismi crescono consumando inquinanti organici e ossigeno. I grandi spazi interstiziali (macrovuoti) tra gli aggregati sono considerati macropori; i piccoli pori negli aggregati sono considerati micropori. L'acqua fluisce attraverso i macropori del sistema; è rimessa in circolazione all'inizio della zona contaminata dopo essere stata arricchita di ossigeno. La degradazione degli inquinanti ha luogo alla base del terreno. Il ricircolo d'acqua è riempito con ossigeno prima della sua entrata nel letto; la concentrazione di microrganismi e di contaminanti rimangono la stessa durante il loro riciclaggio dal basso verso l'inizio del letto.

2.1 Premesse

Le seguenti ipotesi vengono effettuate derivando il modello di biorisanamento negli aggregati del letto del terreno.

- Il letto è composto da aggregati sferici di raggio uniforme R .
- Gli aggregati sono saturi, omogenei e isotropi, e sono composti da particelle di fango e argilla.
- La temperatura del letto è costante.
- La velocità di reazione segue il modello cinetico di Monod (Bailey e Ollis, 1986) [4] e dipende esclusivamente dalla concentrazione di

tre componenti, ossigeno, biomassa, e substrato (contaminante). I contaminanti non sono tossici e non ostacolano la degradazione.

- Il trasporto negli aggregati avviene solo per diffusione.
- La resistenza al trasporto del substrato e dell'ossigeno attraverso le microcolonie insieme alla superficie delle particelle del suolo è trascurabile; pertanto, le microcolonie rispondono alle variazioni delle maggiori concentrazioni dei pori nel liquido.
- Il liquido dei macrovuoti del letto è completamente misto: quindi, le concentrazioni di ossigeno, biomassa, e substrato che lasciano la base del suolo sono uguali a quelli dei macropori del letto (Levenspiel, 1972) [4].
- Il processo di assorbimento è sufficientemente rapido, così che l'equilibrio che esiste sulla superficie del suolo fissa le concentrazioni dei componenti del liquido e le fasi assorbite.
- Tra i componenti della fase liquida nei macropori e quelle sulla superficie degli aggregati del letto è mantenuta una concentrazione d'equilibrio.
- I contaminanti sono biodegradati a biossido di carbonio e acqua.
- Il trasporto di microorganismi entro gli aggregati può essere rappresentato da un termine di diffusione nell'equazione della la biomassa.
- L'effetto di biofilms nei macrovuoti sul moto convettivo viene trascurato.

Il modello è presentato nella seguente sottosezione.

2.2 Notazioni

Elenchiamo qui sotto le numerose grandezze e parametri che compaiono nel sistema di equazioni di reazione-diffusione che costituiscono il modello matematico studiato in questa Tesi. Tra parentesi sono indicate le dimensioni fisiche (L=lunghezza, T=tempo, M=massa).

Prima diamo il significato delle sigle contenute nei vari parametri poi quello

delle grandezze e dei parametri.

A = aggregato

M = macropori

$i = b, o, s$ corrispondono ai termini di substrato, ossigeno e della biomassa

ml = fase liquida mobile

pl = poro liquido

sf = interfaccia

so = fase solida

$^-$ = forma adimensionale

a = area interfacciale dell'aggregato per unità di volume del terreno (L^2/L^3)

$C_{i,ml}$ = concentrazione del componente i nel poro liquido (M/L^3)

C_i^f = concentrazione del componente i nel terreno (M/L^3)

C_i^o = concentrazione iniziale del componente i (M/L^3)

\bar{D}_i = coefficiente di diffusione adimensionale del componente i

$D_{i,pl}$ = coefficiente di diffusione del componente i nel poro liquido (L^2/T)

$D_{i,so}$ = coefficiente di diffusione del componente i nella fase solida (L^2/T)

J_i = velocità di trasferimento di massa del componente i ($M/L^2 - T$)

k_d = velocità costante di reazione per il decadimento della biomassa (T^{-1})

K_o = costante di saturazione dell'ossigeno (M/L^3)

K_s = costante di saturazione del substrato (M/L^3)

K_{di} = coefficiente di partizione lineare per il componente i (L^3/M)

Q = velocità di flusso volumetrica nel letto del terreno (L^3/T)

q_i = concentrazione del componente i nella fase solida (M/M)

r = posizione radiale nell'aggregato (L)

R = raggio dell'aggregato (L)

R_i = fattore ritardante del componente i

r_i^{ml} = velocità di reazione nella fase liquida mobile ($M/L^3 - T$)

r_i^{pl} = velocità di reazione nel poro liquido ($M/L^3 - T$)

r_i^{sf} = velocità di reazione nell'interfaccia ($M/M - T$)

t = tempo (T)

T_b = tempo di "rimedio" nel letto del terreno (T)

V = volume del letto del terreno (L^3)

W = fattore di rifornimento d'ossigeno

Y_o = fattore di rendimento d'ossigeno (M/M)

Y_s = fattore di rendimento del substrato (M/M)

β_i = parametro di saturazione del componente i

ϵ_a = frazione volumetrica del liquido nell'aggregato

ϵ_l = frazione volumetrica del liquido nei macrovuoti del letto del terreno

μ_m = massimo tasso di crescita specifico della biomassa (T^{-1})

ρ = densità di massa della particella dell'aggregato (M/L^3)

θ = tempo adimensionale
 θ_l = tempo del processo in un volume di macrovuoto nel letto del suolo (T)
 θ_r = tempo caratteristico per la diffusione (T)
 Φ_1 = modulo di Thiele per la crescita di biomassa
 Φ_2 = modulo di Thiele per la decrescita di biomassa
 τ = tortuosità del poro nell'aggregato.

2.3 Formulazione del problema

Gli studiosi hanno riscontrato delle difficoltà nell'individuare le equazioni di bilancio dei materiali che si trovano nel letto del terreno composto da aggregati di misura finita. Tali difficoltà sono state aggirate studiando e scrivendo le equazioni di bilancio di massa per il letto del terreno in due stadi, il primo per la fase liquida mobile nei macrovuoti, l'altro per gli aggregati. Un bilancio di massa del componente i^{esimo} nella fase liquida mobile (ml) dà origine a

$$\epsilon_l V \frac{dC_{i,ml}}{dt} = Q(C_{i,ml}^f - C_{i,ml}) + \epsilon_l V r_i^{ml} + VaJ_i, \quad (2.1)$$

dove i è s , o o b , per substrato, ossigeno e biomassa, rispettivamente; ϵ_l è la parte vuota della fase liquida mobile nei macrovuoti del letto; Q è la velocità volumetrica del flusso del liquido riciccolante nel letto. Se si prende l'area del letto come unità di misura, la velocità media interstiziale nei macropori è data da $\frac{Q}{\epsilon_l}$. I macrovuoti nell'area interfacciale degli aggregati per unità di volume, a , è scritta come

$$a = \frac{3}{R}(1 - \epsilon_l). \quad (2.2)$$

La velocità di trasferimento di massa del componente i dagli aggregati alla fase liquida mobile è uguale alla somma delle velocità di trasferimento di massa da entrambe le fasi liquida e solida alla superficie egli aggregati, cioè

$$J_i = -\frac{\epsilon_a D_{i,pl}}{\tau} \frac{\partial C_{i,pl}}{\partial r} \Big|_{r=R} - \rho D_{i,so} \frac{\partial q_i}{\partial r} \Big|_{r=R}. \quad (2.3)$$

La relazione di equilibrio di assorbimento-desorbimento spesso può essere descritta da un'assorbimento lineare isoterma; infatti la concentrazione del componente assorbito può essere descritto da

$$q_i = K_{di} C_{i,pl}. \quad (2.4)$$

Sostituendo l'espressione del trasferimento di massa, la (2.3), la relazione d'equilibrio, la (2.4), ed il termine dell'area interfacciale, la (2.2), nell'equazione

(2.1) si ha

$$\begin{aligned} \epsilon_l V \frac{dC_{i,ml}}{dt} &= Q(C_{i,ml}^f - C_{i,ml}) + \epsilon_l V r_i^{ml} \\ &- V \frac{3}{R} (1 - \epsilon_l) \left(\frac{\epsilon_a D_{i,pl}}{\tau} + \rho K_{di} D_{i,so} \right) \frac{\partial C_{i,pl}(r=R)}{\partial r}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Questa è l'equazione per il componente i^{esimo} nella fase liquida mobile nei macrovuoti del letto. I termini di reazione del substrato, dell'ossigeno e della biomassa sono espressi in termini del cosiddetto "modello Monod" [4]. La velocità di consumo del substrato dai microrganismi nella fase liquida mobile, $-r_s^{ml}$, può essere espressa da

$$-r_s^{ml} = \frac{\mu_m}{Y_s} C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right), \quad (2.6)$$

la velocità dell'ossigeno consumato nella fase liquida mobile, $-r_o^{ml}$, può essere espressa da

$$-r_o^{ml} = \frac{\mu_m}{Y_o} C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right), \quad (2.7)$$

mentre la velocità di crescita della biomassa nella forma di microrganismi sospesi nella fase liquida mobile, $-r_b^{ml}$, è data da

$$-r_b^{ml} = \mu_m C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right) - k_d C_{b,ml}. \quad (2.8)$$

Sostituendo l'espressione cinetica per il consumo del substrato, cioè la (2.6), nell'equazione (2.5) si ha

$$\begin{aligned} \epsilon_l V \frac{dC_{s,ml}}{dt} &= Q(C_{s,ml}^f - C_{s,ml}) - \epsilon_l V \frac{\mu_m}{Y_s} C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right) \\ &- \frac{3V}{R} (1 - \epsilon_l) \left(\frac{\epsilon_a D_{s,pl}}{\tau} + \rho K_{di} D_{s,so} \right) \frac{\partial C_{s,pl}(r=R)}{\partial r}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

L'assorbimento dell'ossigeno nella fase solida è trascurato ($K_{do} = 0$); quindi

$$\begin{aligned} \epsilon_l V \frac{dC_{o,ml}}{dt} &= Q(C_{o,ml}^f - C_{o,ml}) - \epsilon_l V \frac{\mu_m}{Y_o} C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right) \\ &- \frac{3V}{R} (1 - \epsilon_l) \frac{\epsilon_a D_{o,pl}}{\tau} \frac{\partial C_{o,pl}(r=R)}{\partial r}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

La diffusione della biomassa sulla superficie della fase solida è trascurata, cioè $D_{b,so} = 0$; da cui

$$\begin{aligned} \epsilon_l V \frac{dC_{o,ml}}{dt} &= Q(C_{b,ml}^f - C_{b,ml}) - \epsilon_l V \mu_m C_{b,ml} \left(\frac{C_{s,ml}}{K_s + C_{s,ml}} \right) \left(\frac{C_{o,ml}}{K_o + C_{o,ml}} \right) \\ &- \epsilon_l V k_d C_{b,ml} - \frac{3V}{R} (1 - \epsilon_l) \frac{\epsilon_a D_{b,pl}}{\tau} \frac{\partial C_{b,pl}(r=R)}{\partial r}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Sono così date le equazioni del bilancio di massa o quelle che governano gli aggregati. Le condizioni al bordo per queste equazioni sono considerate identiche per tutti gli aggregati .

In questa sezione considero le equazioni con variabili adimensionali ponendo

$$\begin{aligned} \bar{C}_{b,ml} &= \frac{C_{b,ml} R_b}{C_{s,pl}^o R_s Y_s}, \quad \bar{C}_{o,ml} = \frac{C_{o,ml}}{C_o^f}, \quad \bar{C}_{s,ml} = \frac{C_{s,ml}}{C_{s,pl}^o}, \\ \bar{C}_{b,pl} &= \frac{C_{b,pl} R_b}{C_{s,pl}^o R_s Y_s}, \quad \bar{C}_{o,pl} = \frac{C_{o,pl}}{C_o^f}, \quad \bar{C}_{s,pl} = \frac{C_{s,pl}}{C_{s,pl}^o}, \\ \theta &= \frac{t}{\theta_r}, \quad \phi_1 = \frac{R}{3} \sqrt{\frac{\mu_m \tau C_{s,pl}^o C_o^f}{K_s K_o D_{s,pl}}}, \quad \phi_2 = \frac{R}{3} \sqrt{\frac{\tau k_d}{D_{s,pl}}}, \\ \beta_o &= \frac{C_o^f}{K_o}, \quad \beta_s = \frac{C_{s,pl}^o}{K_s}, \quad R_b = 1 + \frac{\rho K_{db}}{\epsilon_a}, \\ R_s &= 1 + \frac{\rho K_{ds}}{\epsilon_a}, \quad \theta_r = \frac{R^2 K_{ds}}{\epsilon_a}, \quad W = \frac{C_{s,pl}^o R_s Y_s}{C_o^f Y_o}, \\ \bar{D}_s &= \frac{D_{s,pl}/\tau + D_{s,so}(R_s - 1)}{D_{s,pl}/\tau}, \quad \bar{D}_o = \frac{D_{o,pl}}{D_{s,pl}}, \quad \bar{D}_b = \frac{D_{b,pl}}{D_{s,pl}}, \\ \theta_l &= \frac{\epsilon_l V}{Q}, \quad \epsilon_m = \frac{3(1 - \epsilon_l) \epsilon_a}{\epsilon_l}, \quad \bar{r} = \frac{r}{R}. \end{aligned}$$

Sostituendo le variabili adimensionali nelle equazioni (2.9), (2.10) e (2.11) si ha

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{C}_{s,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l} (\bar{C}_{s,ml}^f - \bar{C}_{s,ml}) - 9\phi_1^2 \frac{R_s}{R_b} C_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\ &- \epsilon_m \bar{D}_s \frac{\partial \bar{C}_{s,pl}(\bar{r} = 1)}{\partial \bar{r}}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{C}_{o,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l} (1 - \bar{C}_{o,ml}) - 9\phi_1^2 \frac{W}{R_b} C_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\ &- \epsilon_m \bar{D}_o \frac{\partial \bar{C}_{o,pl}(\bar{r} = 1)}{\partial \bar{r}}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{C}_{b,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l}(\bar{C}_{b,ml}^f - \bar{C}_{b,ml}) - 9\phi_1^2 C_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\
&- \epsilon_m \bar{D}_b \frac{\partial \bar{C}_{b,pl}(\bar{r} = 1)}{\partial \bar{r}} - 9\phi_2^2 \bar{C}_{b,ml}.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Il tempo adimensionale, θ , è basato sulla diffusività del substrato nel poro liquido, $D_{s,pl}$, sulla tortuosità, τ , e sul raggio dell'aggregato, R . I parametri adimensionali, ϕ_1 e ϕ_2 , sono i cosiddetti moduli di Thiele, rispettivamente, per l'evoluzione ed il disfacimento della biomassa. Per grandi valori di ϕ_1 , la crescita nell'aggregato è controllata dalla diffusione dei contaminanti e/o dall'ossigeno. I parametri di saturazione, β_s e β_o , sono per il substrato e l'ossigeno, rispettivamente; il valore di β_s dipende dalla concentrazione iniziale del contaminante. Il valore del fattore ritardante del contaminante, R_s , dipende dal valore del fattore di partizione suolo-acqua, K_{ds} ; quest'ultimo è grande per composti che assorbono fortemente le particelle del terreno. Il numero di fornitura d'ossigeno, W , è l'ossigeno richiesto per la relativa bonifica alla concentrazione influente; maggiore è il valore di W , maggiore è la quantità d'ossigeno saturato influente richiesto per il biorisanamento (Wu,1990) [4]. Il parametro θ_l è lo spazio-tempo; per un letto di terreno stretto può essere definito come il tempo per alimentare un macroporo (cioè il suo volume) nella reazione. Si nota che ϵ_m è definito come tre volte il rapporto tra il volume dell'aggregato del poro liquido ed il volume della fase liquida mobile. Le condizioni iniziali per la fase mobile sono: $\bar{C}_{s,ml} = 1$, $\bar{C}_{o,ml} = 0.05$, $\bar{C}_{b,ml} = 10^{-7}$, in $\theta = 0$.

Per gli aggregati, le equazioni del bilancio di massa disponibili, menzionate alla fine della sottosezione, sono date da

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \theta} &= \frac{\bar{D}_s}{R_s} \left(\frac{2}{\bar{r}} \frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{s,pl}}{\partial \bar{r}^2} \right) \\
&- 9\phi_1^2 C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right)
\end{aligned} \tag{2.15}$$

per l'equazione del substrato,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{C}_{o,pl}}{\partial \theta} &= \bar{D}_o \left(\frac{2}{\bar{r}} \frac{\partial \bar{C}_{o,pl}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{o,pl}}{\partial \bar{r}^2} \right) \\
&- 9\phi_1^2 W C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right)
\end{aligned} \tag{2.16}$$

per l'equazione dell'ossigeno e

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{C}_{b,pl}}{\partial \theta} &= \frac{\bar{D}_b}{R_b} \left(\frac{2}{\bar{r}} \frac{\partial \bar{C}_{b,pl}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{b,pl}}{\partial \bar{r}^2} \right) \\
&+ 9\phi_1^2 \bar{C}_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\
&- 9\phi_2^2 \bar{C}_{b,pl}
\end{aligned} \tag{2.17}$$

per l'equazione della biomassa.

Le condizioni iniziali adimensionali e le condizioni al bordo sono:

$$\begin{aligned}
\bar{C}_{s,pl} &= 1, \bar{C}_{o,pl} = 0.05, \bar{C}_{b,pl} = 10^{-7}, \text{ per } 0 \leq \bar{r} \leq 1 \text{ in } \theta = 0 \\
\frac{\partial \bar{C}_{i,pl}}{\partial \bar{r}} &= 0, \quad i = s, o, b, \text{ per } \theta \geq 0 \\
\bar{C}_{s,pl} &= \bar{C}_{s,ml}, \bar{C}_{o,pl} = \bar{C}_{o,ml}, \bar{C}_{b,pl} = \bar{C}_{b,ml}, \text{ per } \theta < 0.
\end{aligned}$$

I valori dei paramentri delle equazioni usati nella simulazione numerica sono elencati nella seguente tabella

C_p^o	$1.0 \cdot 10^{-7} \text{ g/cm}^3$
C_o^f	$8.0 \cdot 10^{-6} \text{ g/cm}^3$
$D_{b,pl}$	$1.0 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$
$D_{o,pl}$	$2.0 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$
$D_{s,pl}$	$4.0 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$
$D_{s,so}$	0
k_d	$2.78 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$
K_o	$1.0 \cdot 10^{-8} \text{ g/cm}^3$
K_s	$1.0 \cdot 10^{-6} \text{ g/cm}^3$
K_{db}	$30.0 \text{ cm}^3/\text{g}$
Q	$2.16 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^3/\text{s}$
Y_o	1.0 g/g
Y_s	0.5 g/g
V	30.48 cm^3
ϵ_α	0.37
ϵ_l	0.37
μ_m	$2.78 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$
ρ	1.72 g/cm^3
τ	1.4

2.4 Derivazione dell'equazione per il bilancio di massa

In questa sezione ho studiato le equazioni che derivano dal bilancio di massa. Negli aggregati la massa del componente i^{simo} al tempo t è ottenuta da

$$\frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 [\epsilon_a C_{i,pl}(t) + \rho q_i(t)] r^2 dr \quad (2.18)$$

Ad ogni passo di tempo Δt la formazione dell' i^{esimo} componente dovuta alla reazione può essere scritta come

$$\frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_t^{t+\Delta t} \int_0^1 [\epsilon_a r_i^{pl}(t) + \rho r_i^{sf}(t)] r^2 dr dt$$

Il bilancio totale per gli aggregati nell'intervallo di tempo $[t, t + \Delta t]$ può essere sintetizzato dalla formula Accumulazione = Trasporto nel letto + Produzione.

La quantità del componente i , dove, ricordo, $i = s, o, b$, sta per substrato, ossigeno o biomassa, trasportato dall'aggregato alla fase mobile nel periodo di tempo Δt si traduce anche come

$$\begin{aligned} \text{Trasporto fuori} &= \text{Produzione} - \text{Accumulazione} \\ &= \text{Produzione} - [ma(t + \Delta t) - ma(t)] \\ &= -\frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 [\epsilon_a C_{i,pl}(t + \Delta t) + \rho q_i(t + \Delta t)] r^2 dr \\ &+ \frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 [\epsilon_a C_{i,pl}(t) + \rho q_i(t)] r^2 dr \\ &+ \frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_t^{t+\Delta t} \int_0^1 [\epsilon_a r_i^{pl}(t) + \rho r_i^{sf}(t)] r^2 dr dt. \end{aligned}$$

Il termine di flusso tra gli aggregati e la fase mobile è dato dal rapporto del termine per il trasporto di massa con gli aggregati alla fase mobile, (2.19), con Δt , e considerando il limite $\Delta t \rightarrow 0$ si ottiene

$$\begin{aligned} VaJ_i &= -\frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 \left[\epsilon_a \frac{\partial C_{i,pl}}{\partial t} + \rho \frac{\partial q_i}{\partial t} \right] r^2 dr \\ &+ \frac{3V(1 - \epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 [\epsilon_a r_i^{pl}(t) + \rho r_i^{sf}(t)] r^2 dr. \end{aligned}$$

Se sostituisco tale equazione alla (2.18) si ha

$$\begin{aligned}
\epsilon_l V \frac{dC_{i,ml}}{dt} &= Q (C_{i,ml}^f - C_{i,ml}) + \epsilon_l V r_i^{ml} \\
&- \frac{3V(1-\epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 \left[\epsilon_a \frac{\partial C_{i,pl}}{\partial t} + \rho \frac{\partial q_i}{\partial t} \right] r^2 dr \\
&+ \frac{3V(1-\epsilon_l)}{R^3} \int_0^1 \left[\epsilon_a r_i^{pl}(t) + \rho r_i^{sf}(t) \right] r^2 dr.
\end{aligned}$$

Ciò dà le equazioni per le componenti i^{sime} .

Nelle equazioni della fase mobile descritte da (2.12), (2.13) e (2.14) i termini della massa trasferita sono stati ottenuti calcolando i gradienti delle concentrazioni sulla superficie degli aggregati.

Sostituendo la relazione d'equilibrio (2.19) a quelle del substrato, ossigeno e biomassa adimensionali si hanno le equazioni

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{C}_{s,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l} (\bar{C}_{s,ml}^f - \bar{C}_{s,ml}) - 9\phi_1^2 \frac{R_s}{R_b} C_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\
&- \epsilon_m R_s \int_0^1 \frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \theta} \bar{r}^2 d\bar{r} \\
&- 9\phi_1^2 R_s \int_0^1 C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,pl}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,pl}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,pl}} \right) \bar{r}^2 d\bar{r}, \quad (2.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{C}_{o,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l} (\bar{C}_{o,ml}^f - \bar{C}_{o,ml}) - 9\phi_1^2 \frac{W}{R_b} C_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\
&- \epsilon_m \int_0^1 \frac{\partial \bar{C}_{o,pl}}{\partial \theta} \bar{r}^2 d\bar{r} \\
&- 9\phi_1^2 W \int_0^1 C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,pl}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,pl}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,pl}} \right) \bar{r}^2 d\bar{r}, \quad (2.20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{C}_{b,ml}}{d\theta} &= \frac{\theta_r}{\theta_l} (\bar{C}_{b,ml}^f - \bar{C}_{b,ml}) + 9\phi_1^2 \bar{C}_{b,ml} \left(\frac{\bar{C}_{s,ml}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right) \\
&- \epsilon_m R_b \int_0^1 \frac{\partial \bar{C}_{b,pl}}{\partial \theta} \bar{r}^2 d\bar{r} \\
&+ 9\phi_1^2 W \int_0^1 C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,pl}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,pl}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,pl}} \right) \bar{r}^2 d\bar{r} \\
&- 9\phi_2^2 \epsilon_m R_b \int_0^1 \frac{\partial \bar{C}_{b,pl}}{\partial \theta} \bar{r}^2 d\bar{r} - 9\phi_2^2 \bar{C}_{b,ml}. \quad (2.21)
\end{aligned}$$

Capitolo 3

Algoritmo

Il processo di biorisanamento è relativamente lento e le concentrazioni nelle fasi liquide mobili e nei pori dell'aggregato cambiano piuttosto lentamente. Di conseguenza, le concentrazioni e il tasso di flusso del substrato, ossigeno e la biomassa tra gli aggregati e la fase mobile liquida restano relativamente costanti per un piccolo passo di tempo, Δt , che è il tempo di integrazione delle equazioni. Questa assunzione di regolarità è il cosiddetto stato pseudo stabile (pseudo regolare). I nuovi valori limite delle condizioni di cui collegare il set di ODE's a favore di una serie di PDE sono determinate ogni volta per ogni passo. Il corso del flusso dagli aggregati alla fase liquida mobile è valutato per calcolare le pendenze delle concentrazioni in superficie degli aggregati.

3.1 Modello numerico

Per studiare il sistema di equazioni di reazione e diffusione ho iniziato con l'analizzare un modello numerico monodimensionale, proprio perché negli articoli, da me trattati, il modello era espresso in coordinate sferiche radiali, r , e nella dimensione temporale, t .

Perciò ho preso in considerazione il programma in matlab chiamato *'ode15.m'*, per il sistema di equazioni differenziali ordinarie, e *'pdede.m'*, per le equazioni differenziali parziali. Fatto ciò ho considerato la soluzione del sistema di ODE come dato iniziale per quello delle PDE e le ho sostituite negli altri programmi nel caso bidimensionale.

Per quanto riguarda la simulazione numerica nel caso bidimensionale nello spazio, ho discretizzato l'equazione, prendendo ad esempio la prima equazione del sistema, cioè quella che riguarda il substrato, data da

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \theta} &= \frac{\bar{D}_s}{R_s} \left(\frac{2}{\bar{r}} \frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{s,pl}}{\partial \bar{r}^2} \right) \\ &- 9\phi_1^2 C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right),\end{aligned}\quad (3.1)$$

che riscritta in modo più schematico è

$$\frac{\partial \bar{C}_{s,pl}}{\partial \theta} = \tilde{A}_s \left(\frac{\partial^2 \bar{C}_{s,pl}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}_{s,pl}}{\partial y^2} \right) - \tilde{B}_s F(\bar{C}_{b,pl}, \bar{C}_{s,pl}, \bar{C}_{o,pl}), \quad (3.2)$$

dove $\tilde{A}_s = \frac{\bar{D}_s}{R_s}$ e $\tilde{B}_s = 9\phi_1^2 C_{b,pl}$ sono costanti ed $F = C_{b,pl} \left(\frac{\bar{C}_{s,pl}}{1 + \beta_s \bar{C}_{s,ml}} \right) \left(\frac{\bar{C}_{o,ml}}{1 + \beta_o \bar{C}_{o,ml}} \right)$ è una funzione che dipende dalle tre concentrazioni di substrato, biomassa ed ossigeno. Usando il metodo delle differenze finite e discretizzando (x, y, t) rispettivamente con passo Δx , Δy e Δt , che hanno indici i, l, n , si ha che

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &= \frac{u_{i+1,l} - 2u_{i,l} + u_{i-1,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,l+1} - 2u_{i,l} + u_{i,l-1}}{(\Delta y)^2}.\end{aligned}$$

Considerando $\Delta x = \Delta y$ si ha

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{u_{i+1,l} + u_{i-1,l} + u_{i,l+1} + u_{i,l-1} - 4u_{i,l}}{(\Delta x)^2}.$$

Quindi la (3.2) diventa

$$\frac{u_{i,l}^{n+1} - u_{i,l}^n}{\Delta t} = \tilde{A}_s \left(\frac{u_{i+1,l}^j + u_{i-1,l}^j + u_{i,j+1}^j + u_{i,j-1}^j - 2u_{i,l}^j - 4u_{i,l}^j}{(\Delta x)^2} \right) - \tilde{B}_s f_{i,l}^n,$$

dove j varia a seconda del metodo usato: $j = n$ se impiego un metodo esplicito, $j = n + 1$ se ne impiego uno implicito.

Inoltre $f_{i,l}^n = w_{i,l} \left(\frac{u_{i,l}^n}{1 + \beta_s u_{i,l}^n} \right) \left(\frac{v_{i,l}^n}{1 + \beta_o v_{i,l}^n} \right)$, dove u, v, w rappresentano rispettivamente le concentrazioni di substrato, ossigeno e biomassa.

3.2 Metodo esplicito

Come appena descritto, il metodo esplicito è dato ponendo $j = n$, per cui l'equazione si riscrive come

$$\frac{u_{i,l}^{n+1} - u_{i,l}^n}{\Delta t} = \tilde{A}_s \left(\frac{u_{i+1,l}^n + u_{i-1,l}^n + u_{i,l+1}^n + u_{i,l-1}^n - 4u_{i,l}^n}{(\Delta x)^2} \right) - \tilde{B}_s f_{i,l}^n,$$

Qui e le costanti assumono valori diversi a seconda dell'equazione a cui appartengono, substrato, ossigeno o biomassa.

Inoltre si ha che $\tilde{G}_s = 0$.

Definisco $A = \tilde{A} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, $B = \tilde{B} \Delta t$ e l'equazione diventa

$$u_{i,l}^{n+1} = A_s u_{i+1,l}^n + A_s u_{i-1,l}^n (1 - 4A_s) u_{i,l}^n + A_s u_{i,l+1}^n + A_s u_{i,l-1}^n - B_s f_{i,l}^n.$$

Per cui il sistema è dato da

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{i,l}^{n+1} = A_s u_{i+1,l}^n + A_s u_{i-1,l}^n (1 - 4A_s) u_{i,l}^n + A_s u_{i,l+1}^n + A_s u_{i,l-1}^n - B_s f_{i,l}^n \\ u_{i,l}^0 = c_{1,s} \\ u_{0,l}^n = u_{1,l}^n \\ u_{i,0}^n = u_{i,1}^n \\ u_{nx,l}^n = c_{2,s} \\ u_{i,ny}^n = c_{2,s} \end{array} \right.$$

dove nx e ny sono rispettivamente i punti della griglia x e y .

Il sistema è formato non da una singola equazione ma bensì da tre equazioni, ciascuna delle quali studia il comportamento del substrato, dell'ossigeno e della biomassa. Per cui la u del sistema assume le funzioni delle tre concentrazioni sopra citate. Inoltre $c_{1,s} = 1$ e $c_{2,s} = 9 \cdot 10^{-4}$. Nel metodo esplicito il sistema si risolve calcolando $u^{n+1} = \mathcal{M}u^n + h(u^n)$, dove h è funzione di u^n ed \mathcal{M} è una matrice pentadiagonale, e più \tilde{A} una matrice tridiagonale a blocchi.

La matrice del sistema \mathcal{M} è data da

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1 & \mathcal{B} & 0 & \cdots & 0 \\ \mathcal{B} & \mathcal{G} & \mathcal{B} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mathcal{B} & \mathcal{G} & \mathcal{B} \\ 0 & \cdots & 0 & \mathcal{B} & \mathcal{G} \end{pmatrix}$$

dove \mathcal{G}_1 è matrice tridiagonale ed è data da

$$\mathcal{G}_1 = \begin{pmatrix} 1 - 2A_s & A_s & 0 & \cdots & 0 \\ A_s & 1 - 3A_s & A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & A_s & 1 + 3A_s & A_s \\ 0 & \cdots & 0 & A_s & 1 - 3A_s \end{pmatrix}$$

La matrice tridiagonale \mathcal{G} è della forma

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 + 3A_s & -A_s & 0 & \cdots & 0 \\ -A_s & 1 + 4A_s & -A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -A_s & 1 + 4A_s & -A_s \\ 0 & \cdots & 0 & -A_s & 1 + 4A_s \end{pmatrix}$$

Mentre la matrice \mathcal{B} è a diagonale principale

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} A_s & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & A_s \end{pmatrix}$$

Il vettore $h(u^n) = h^n$ dei termini noti è della forma

$$h^n = \begin{pmatrix} -B_s f_{1,1}^n \\ \vdots \\ -B_s f_{nx,1}^n \\ -B_s f_{1,2}^n \\ \vdots \\ -B_s f_{nx,ny}^n \end{pmatrix}$$

In esso impongo le condizioni di Dirichlet nei punti al bordo della griglia, e precisamente

$$u_{nx,j}^n = u_{i,ny}^n = 9 \cdot 10^{-4}$$

per $i = 1, \dots, nx$ e $j = 1, \dots, ny$ e $u_{i,j}^n$ per $i = (nx - 1) \cdot nx, \dots, nx^2$ ed $j = ny$. Nel programma ho costruito la matrice \mathcal{M} di dimensione $nx^2 \times nx^2$, avendo posto $nx = ny$, a cui ho sommato un vettore di dimensione $1 \times nx^2$, poi, una volta trovato il vettore incognita, riposiziono i suoi elementi in una nuova matrice, per poi poter graficare i risultati. Qui sotto ho posto le rappresentazioni grafiche dei miei risultati.

Nella seguente Figura, (3.1), ho evidenziato il forte calo di substrato nell'aggregato.

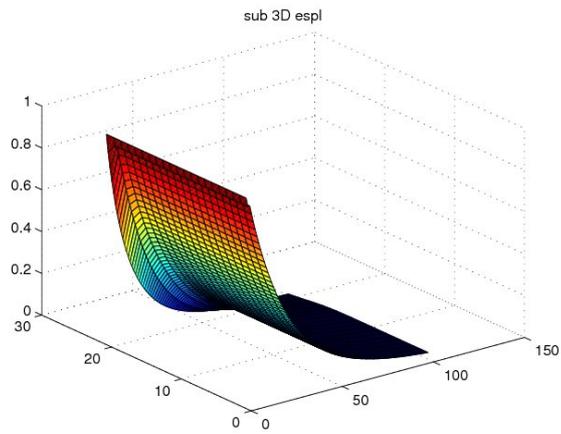
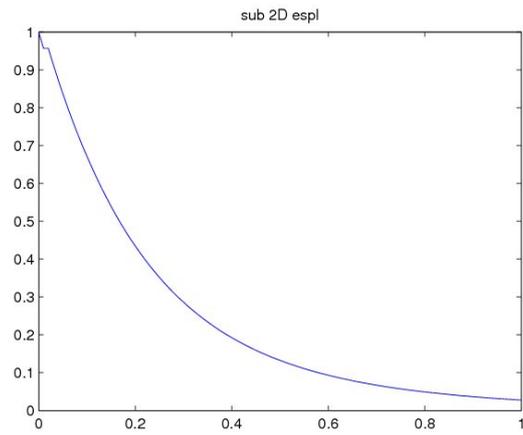


Figura 3.1: grafico del substrato: la prima figura é il caso bidimensionale; la seconda quello tridimensionale

3.3 Metodo implicito

Nel modello implicito, cioè con $j = n + 1$ l'equazione che esprime la concentrazione del substrato é data da

$$\frac{u_{i,l}^{n+1} - u_{i,l}^n}{\Delta t} = \tilde{A}_s \left(\frac{u_{i+1,l}^{n+1} + u_{i-1,l}^{n+1} + u_{i,l+1}^{n+1} + u_{i,l-1}^{n+1} - 4u_{i,l}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right) - \tilde{B}_s f_{i,l}^n,$$

da cui ottengo

$$\begin{aligned} -\tilde{A}_s \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{i+1,l}^{n+1} - \tilde{A}_s \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{i-1,l}^{n+1} + \left(1 + 4\tilde{A}_s \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \right) u_{i,l}^{n+1} \\ - \tilde{A}_s \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{i,l+1}^{n+1} - \tilde{A}_s \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} u_{i,l-1}^{n+1} = +u_{i,l}^n - \tilde{B}_s \Delta t f_{i,l}^n. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Come per il caso esplicito le costanti assumono valori diversi a seconda dell'equazione a cui appartengono.

Impongo sempre $A = \tilde{A} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, $B = \tilde{B} \Delta t$, per cui l'equazione diventa

$$-A_s u_{i+1,l}^{n+1} - A_s u_{i-1,l}^{n+1} + (1 + 4A_s) u_{i,l}^{n+1} - A_s u_{i,l+1}^{n+1} - A_s u_{i,l-1}^{n+1} = u_{i,l}^n - B_s f_{i,l}^n.$$

Il sistema diventa

$$\left\{ \begin{array}{l} -A_s u_{i+1,l}^{n+1} - A_s u_{i-1,l}^{n+1} + (1 + 4A_s) u_{i,l}^{n+1} - A_s u_{i,l+1}^{n+1} - A_s u_{i,l-1}^{n+1} = u_{i,l}^n - B_s f_{i,l}^n \\ u_{i,l}^0 = c_{1,s} \\ u_{0,l}^n = u_{1,l}^n \\ u_{i,0}^n = u_{i,1}^n \\ u_{nx,l}^n = c_{2,s} \\ u_{i,ny}^n = c_{2,s} \end{array} \right.$$

dove nx e ny sono gli stessi del caso esplicito, così come le costanti, inoltre $c_{1,s} = 1$ e $c_{2,s} = 9 \cdot 10^{-4}$.

Nel metodo implicito ho un sistema dato da $\mathcal{M}u^{n+1} = g(u^n)$, dove g è funzione della variabile u^n , che risolvo calcolando direttamente $u^{n+1} =$

$\mathcal{M}^{-1}g(u^n)$, dove \mathcal{M} è una matrice tridiagonale a blocchi.

La matrice \mathcal{M} del sistema è data da

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1 & \mathcal{B} & 0 & \cdots & 0 \\ \mathcal{B} & \mathcal{G} & \mathcal{B} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mathcal{B} & \mathcal{G} & \mathcal{B} \\ 0 & \cdots & 0 & \mathcal{B} & \mathcal{G} \end{pmatrix}$$

dove \mathcal{G}_1 è matrice tridiagonale ed è data da

$$\mathcal{G}_1 = \begin{pmatrix} 1 + 2A_s & -A_s & 0 & \cdots & 0 \\ -A_s & 1 + 3A_s & -A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -A_s & 1 + 3A_s & -A_s \\ 0 & \cdots & 0 & -A_s & 1 + 3A_s \end{pmatrix}$$

La diagonale principale di \mathcal{G}_1 è determinata dalle condizioni iniziali di Neumann dovute al fatto che

$$u_{0,l}^n = u_{1,l}^n \text{ e } u_{i,0}^n = u_{i,1}^n$$

per cui nella prima equazione, al tempo $n + 1 = 2$ e $i = j = 1$, si ha

$$-A_s u_{2,1} - A_s u_{0,1} + (1 + 4A_s) u_{1,1} - A_s u_{1,2} - A_s u_{1,0} = u_{1,1}^n - B_s f_{1,1}^n$$

dove il secondo membro è noto perché è al tempo iniziale $n = 1$. Nel primo membro, proprio per le condizioni di Neumann sopra citate, sommo insieme il secondo, il terzo ed il quinto termine, ottenendo perciò

$$-A_s u_{2,1} + (1 + 2A_s) u_{1,1} - A_s u_{1,2} = u_{1,1}^n - B_s f_{1,1}^n.$$

Faccio la stessa cosa per tutti i termini che via via trovo iterando nello spazio, prima col ciclo delle i e poi con quello delle j .

La matrice tridiagonale \mathcal{G} è della forma

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 + 3A_s & -A_s & 0 & \cdots & 0 \\ -A_s & 1 + 4A_s & -A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -A_s & 1 + 4A_s & -A_s \\ 0 & \cdots & 0 & -A_s & 1 + 4A_s \end{pmatrix}$$

Anche qui il motivo della costruzione della diagonale principale di \mathcal{G} deriva dalle stesse condizioni di Neumann che ho sopra citato per quella della matrice \mathcal{G}_1 .

Mentre la matrice \mathcal{B} è a diagonale principale

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} -A_s & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -A_s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -A_s \end{pmatrix}$$

La costruzione del vettore termine noto $g(u^n) = g^n$ è data da

$$g^n = \begin{pmatrix} u_{1,1}^n - B_s f_{1,1}^n \\ \vdots \\ u_{nx,1}^n - B_s f_{nx,1}^n \\ u_{1,2}^n - B_s f_{1,2}^n \\ \vdots \\ u_{nx,ny}^n - B_s f_{nx,ny}^n \end{pmatrix}$$

Anche qui, come nel caso del metodo esplicito, considerando le condizioni di Dirichlet nei punti al bordo della griglia, si ha

$$u_{nx,j}^n = u_{i,ny}^n = 9 \cdot 10^{-4}$$

per $i = 1, \dots, nx$ e $j = 1, \dots, ny$ e $u_{i,j}^n$ per $i = (nx - 1) \cdot nx, \dots, nx^2$ e $j = ny$. Ho costruito la matrice \mathcal{M} di dimensione $nx^2 \times nx^2$, con $nx = ny$, ed un vettore di dimensione $1 \times nx^2$, poi, trovato il vettore incognita, e riposizionando i suoi elementi in una nuova matrice, ho graficato i risultati.

Nelle Figure (3.2) e (3.3) ho evidenziato come la concentrazione del substrato diminuisce nel tempo e come sia rapida la sua diffusione all'interno dell'aggregato.

Nelle seguenti Figure, (3.4) e (3.5), è evidenziato quanto cresce la disponibilità d'ossigeno il quale comporta un fattore determinante per la bonifica.

La biomassa nella fase liquida aumenta, come mostra la Figura (3.7), più che nell'aggregato, rappresentato in Figura (3.6).

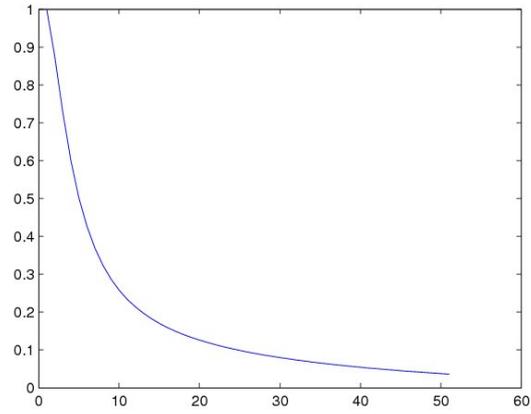


Figura 3.2: Evoluzione nel tempo della concentrazione del substrato

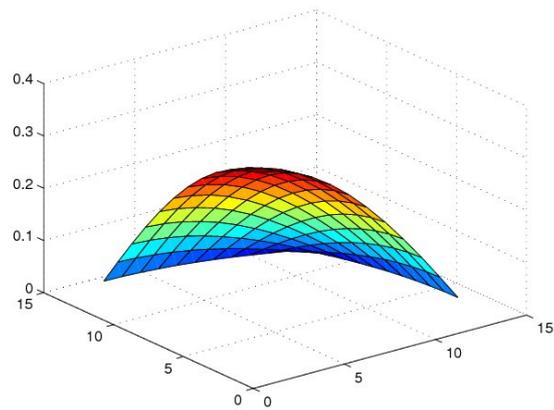


Figura 3.3: Concentrazione del substrato al tempo $t=40$

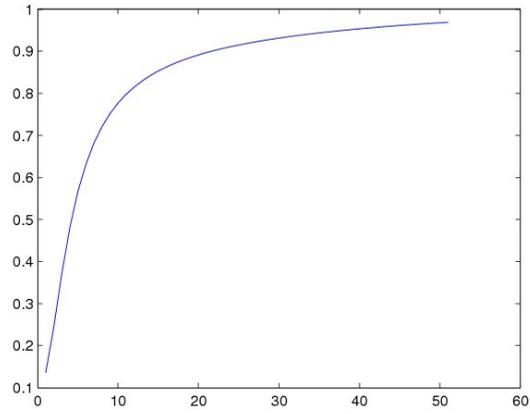


Figura 3.4: Evoluzione nel tempo della concentrazione dell'ossigeno

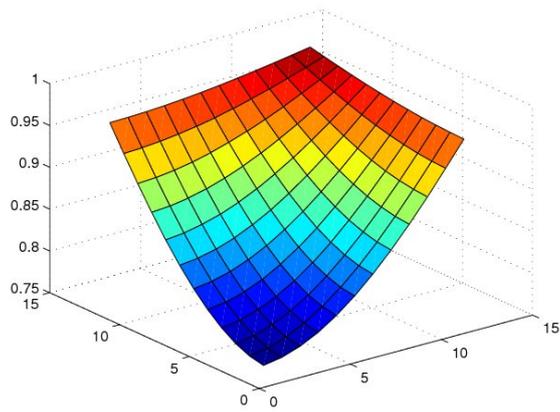


Figura 3.5: Concentrazione dell'ossigeno al tempo $t=50$

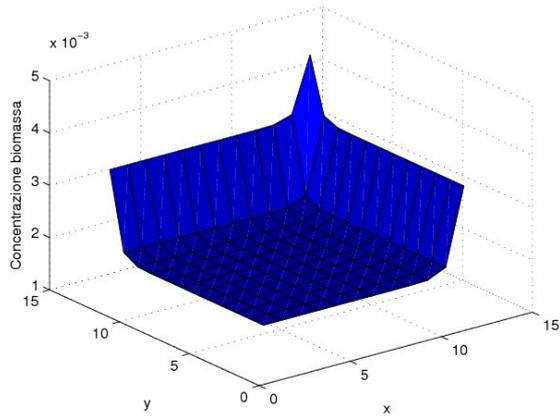


Figura 3.6: Concentrazione della biomassa al tempo $t=41$

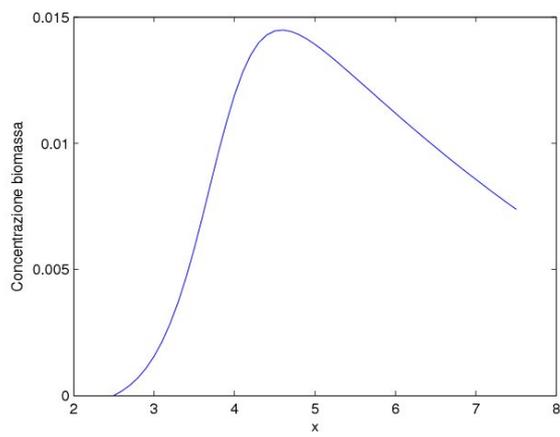


Figura 3.7: Evoluzione nel tempo della concentrazione della biomassa

Capitolo 4

Comportamento delle concentrazioni

4.1 Analisi dei risultati

I grafici da me sviluppati permettono le seguenti conclusioni.
I dati dei parametri noti sono espressi nella Tabella 3.1.

Caso numero	Concentrazione iniziale di substrato q_s^0 , mg/kg	Raggio aggregato R , cm	Coefficiente di partizione K_{ds} , cm ³ /g	Fattore ritardante R_s
1	600	1	1500	6974
2	600	1	15	71
3	600	1	1.5	8
4	600	1	15	71
caso numero	Parametro di saturazione β_s	Modulo di Thiele ϕ_1	Fattore per fornire ossigeno W	
1	0.4	18.6	174	
2	40	0	177	
3	400	588	200	
4	40	186	177	

Tabella 4.1: Tabella dei parametri usati nelle equazioni di reazione e diffusione

Nel caso 1, riferendosi a ciò che avviene negli aggregati, si ha un coef-

ficiente di partizione del substrato alto, di conseguenza il fattore ritardante è molto elevato, per cui, come viene evidenziato dal grafico, Figura (4.1), si riduce il tasso di diffusione dei contaminanti e quindi rallenta il tasso di biodegradazione.

Nella fase liquida mobile, Figura (4.1), il tempo di biodegradazione è ridotto rispetto a quello negli aggregati, questo perché, nel terreno, i contaminanti sono fortemente assorbiti.

Si nota che in tutti e due i casi la diffusione dell'ossigeno è sostanziale, ciò perché esso determina il tempo totale di bonifica, insieme alla diffusione del contaminante.

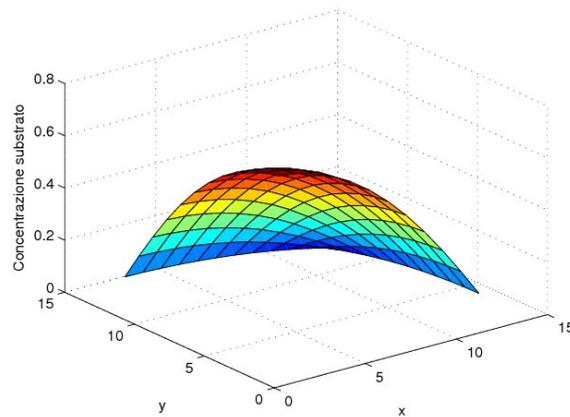


Figura 4.1: Concentrazione del substrato, nell'aggregato, al tempo $t=40$

Per quanto riguarda il caso 2, negli aggregati, avendo un coefficiente di partizione piccolo e, quindi, un fattore ritardante altrettanto basso, si deduce, ed è mostrato in Figura (4.1), che la bonifica è molto veloce.

Nella fase liquida mobile, Figura (4.1), invece, la velocità di bonifica e la diminuzione del substrato è pressoché uguale, proprio perché il tempo è decisamente basso. Si evidenzia, però, una crescita di biomassa leggermente maggiore rispetto al caso precedente.

Riducendo ulteriormente, come nel caso 3, il coefficiente di partizione, Figura (4.5), si nota che il substrato ha una diminuzione maggiore, mentre la biomassa è in crescita.

Nel grafico in Figura (4.7) è rappresentato un caso intermedio, numero 4, tra il primo ed il terzo.

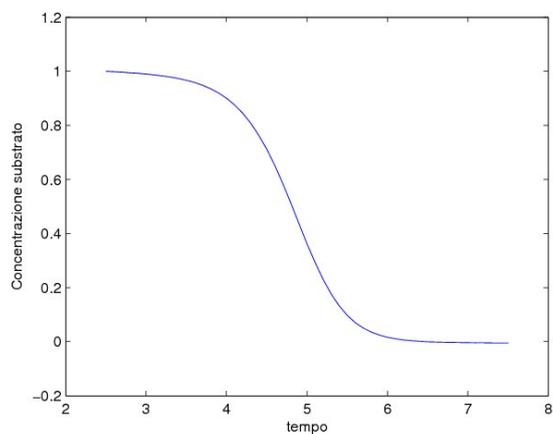


Figura 4.2: Evoluzione della concentrazione del substrato nella fase liquida mobile

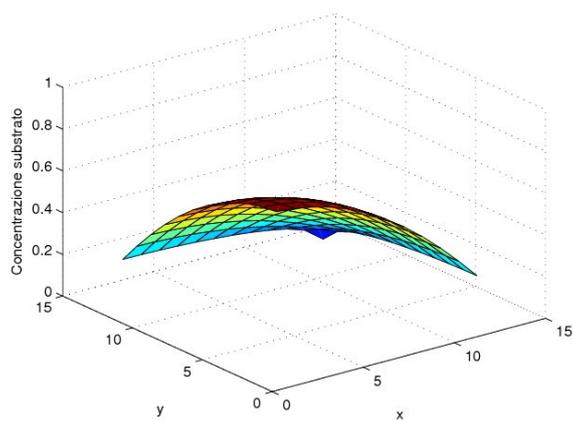


Figura 4.3: Concentrazione del substrato, nell'aggregato, al tempo $t=40$

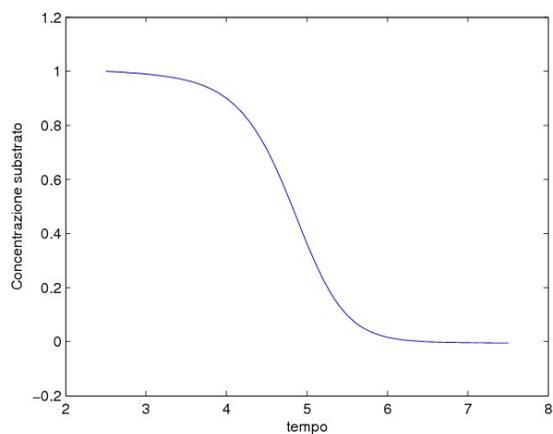


Figura 4.4: Evoluzione della concentrazione del substrato nella fase liquida mobile

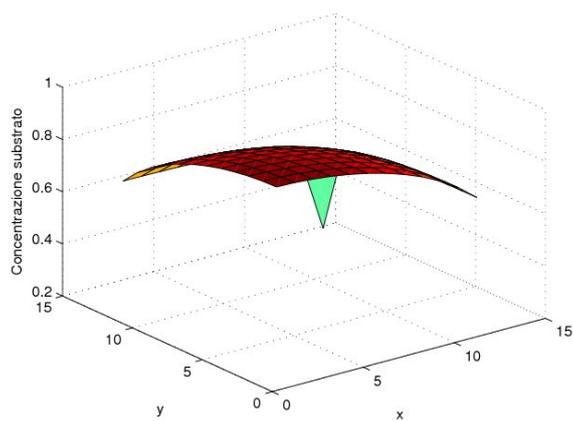


Figura 4.5: Concentrazione del substrato, nell'aggregato, al tempo $t=40$

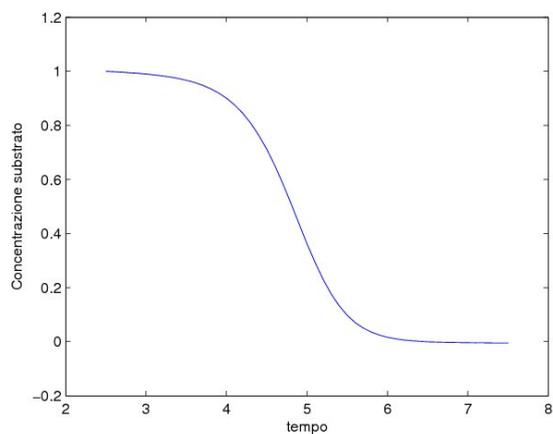


Figura 4.6: Evoluzione della concentrazione del substrato nella fase liquida mobile

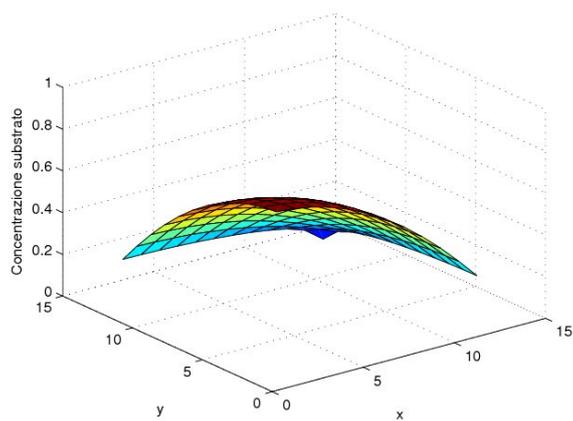


Figura 4.7: Concentrazione del substrato, nell'aggregato, al tempo $t=40$

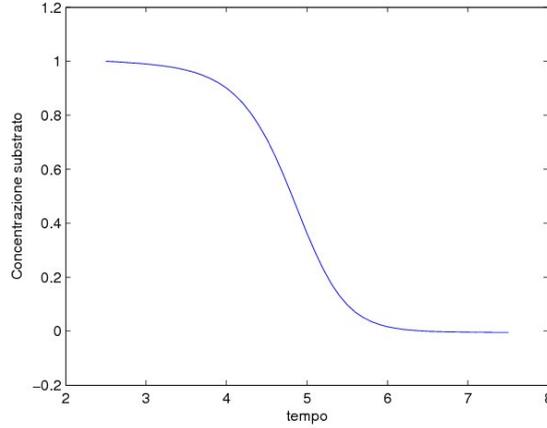


Figura 4.8: Evoluzione della concentrazione del substrato nella fase liquida mobile

4.2 Studio del comportamento delle soluzioni

Per determinare la soluzione di un problema, nel mio caso si tratta di un sistema di equazioni differenziali, che non hanno facile risoluzione analitica, è importante confrontare le valutazioni numerica con quelle effettive.

Ciò, purtroppo, nel mio contesto non è possibile, per cui ho analizzato i miei risultati pratici con quelli teorici, riferendomi a teoremi di analisi su questo argomento.

Il problema non lineare da me studiato è della forma

$$\begin{cases} (u_i)_t - L_i u_i = f_i(t, x, u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{u}]_{b_i}) & \text{in } D_T \\ B_i u_i = h_i(t, x) & \text{su } S_T \\ u_i(0, x) = u_{i,0}(x) & \text{in } \Omega \end{cases}$$

descritto nell'Appendice A, (A.24), dove L_i e B_i sono specificate nella Definizione 4 della stessa, e le funzioni f_i , h_i e $u_{i,0}$ soddisfano le medesime condizioni del problema (A.24).

Definisco \tilde{u} e \hat{u} come *soprasoluzioni* e *sottosoluzioni*, Definizione 4 dell'Appendice A, e delimito così le soluzioni numeriche da me trovate.

Ho considerato le funzioni

$$\begin{aligned} \tilde{u}_1 &= -x^2 - y^2 + 201 + 2t \\ \tilde{u}_2 &= \exp((x + y)^{1/2}) + 25t \\ \tilde{u}_3 &= x^2 + \exp(\log(y^2)) + 300t + 100 \end{aligned}$$

ed ho verificato che soddisfino le condizioni della Definizione 4, per cui le posso considerare come *sopra soluzioni* del mio sistema (A.21).

Le ho rappresentate nella Figura seguente

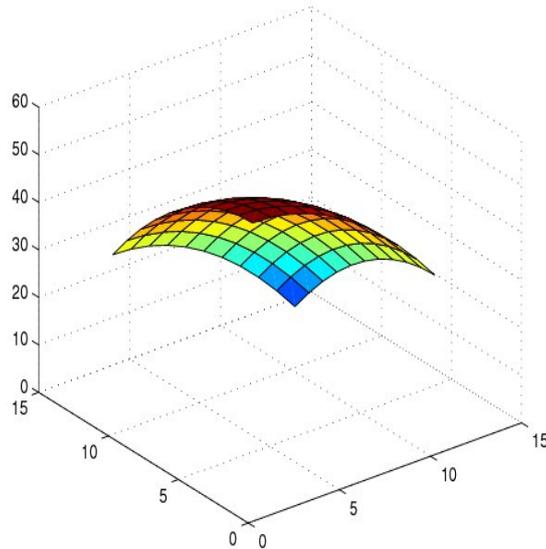


Figura 4.9: Grafico della sopra soluzione \tilde{u}_1

Come sotto soluzione ho considerato

$$\tilde{u}_1 = \tilde{u}_2 = \tilde{u}_3 = 0$$

essendo le tre soluzioni verificanti le condizioni della Definizione sopra citata.

Inoltre le f_i sono monotone e soddisfano la condizione del Lemma 17.

A questo punto ho delimitato le soluzioni numeriche con quelle analitiche in modo tale che sia sicura dell'andamento dei miei grafici. Nella prima parte dell'Appendice A ho descritto il comportamento delle sopra e sotto soluzioni e delle successioni di funzioni legate ad esse per quanto riguarda semplici sistemi non lineari.

Tali concetti si possono generalizzare passando a considerare sistemi in cui ogni equazione dipende da tutte le componenti del problema.

Potendo, perciò, costruire delle successioni, che verificano il Lemma 18, ho

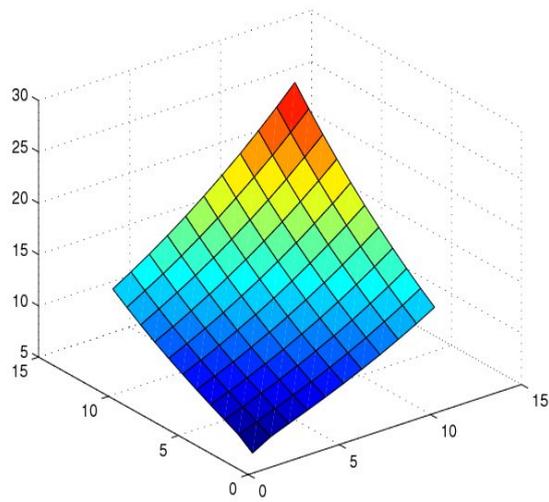


Figura 4.10: Grafico della sopra soluzione \tilde{u}_2

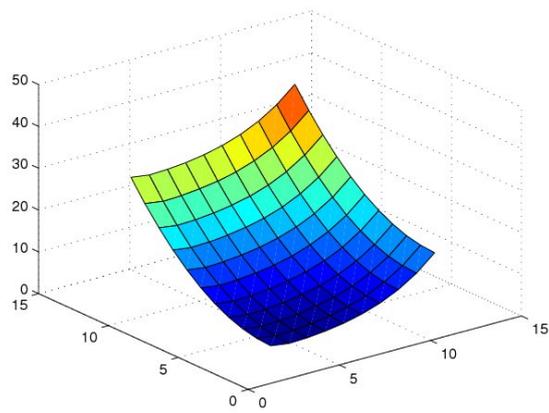


Figura 4.11: grafico della sopra soluzione \tilde{u}_3

potuto verificare le ipotesi del Teorema 19 e concludere che tali sopra e sotto soluzioni determinano un'unica soluzione del problema (A.21).
Facendo ciò ho così potuto 'delimitare' le soluzioni numeriche da me trovate e verificarne l'andamento.

Idee per sviluppi futuri

Si può pensare di utilizzare questi modelli di biorisanamento anche in un dominio molto più grande di quello studiato in [4] e [5]. Infatti in tali lavori si studia il fenomeno dell'interazione tra biomassa, inquinante ed ossigeno in una zolla sferica, dell'ordine di un centimetro, di terreno, mentre, in pratica, sarà importante risanare siti di dimensione ben maggiore ad esempio di centinaia di metri o più.

È ragionevole pensare che i parametri del sistema di reazione-diffusione trattato si possono ritenere costanti sulla scala della zolla, ma, variabili, sulla scala di un grande sito.

Allora si può pensare di risolvere inizialmente le stesse equazioni con coefficienti mediati su tutto il sito ed utilizzare i risultati di integrazione numerica su di una griglia grossolana ed utilizzare tali valori al solo scopo di ottenere valori approssimati su interfacce interne al dominio. Tali interfacce sono le superfici di sfere o cubi nei quali si può suddividere il dominio.

Questa procedura porta al disaccoppiamento completo del problema originale in un gran numero di problemi ciascuno relativo a sottodomini così individuati e pertanto si può assegnare la soluzione, in ciascun sottodominio, a processori indipendenti realizzando così una "Decomposizione di Dominio" con uno speed-up ideale.

Si ottiene così la soluzione del sistema originario giustapponendo le varie soluzioni dei vari sottodomini.

Sintetizza così un calcolo numerico *Massicciamente Parallelo*.

Alcune sperimentazioni di questo metodo sono già state fatte utilizzando l'ambientazione MPI.

Appendice A

Definizioni e concetti fondamentali

In questa Appendice discuto le nozioni fondamentali di analisi matematica legate al problema parabolico da me analizzato.

Definizione 1 Una funzione $u \in C(\Omega)$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, aperto, è detta funzione Hölderiana di ordine α , $\alpha \in (0, 1)$, se

$$H_\alpha \equiv \sup \left\{ \frac{\|u(x) - u(\xi)\|}{\|x - \xi\|^\alpha}; x, \xi \in \Omega \text{ e } x \neq \xi \right\} < \infty.$$

La norma Hölder di u è $\|u\|_\alpha = \|u\|_0 + H_\alpha$ e l'insieme di tutte le funzioni Hölderiane in Ω con norma finita è denotato con $C^\alpha(\Omega)$.

Date le derivate parziali in x_1, \dots, x_n di ordine m , denotate con D_x^m e definito

$$\|u\|_m = \|u\|_0 + \sum \|D_x u\|_0 + \dots + \sum \|D_x^m u\|_0$$

$$\|u\|_{1+\alpha} = \|u\|_0 + \sum \|D_x u\|_\alpha$$

$$\|u\|_{2+\alpha} = \|u\|_0 + \sum \|D_x u\|_\alpha + \sum \|D_x^2 u\|_0,$$

dove $\|u\|_0 = \sup \|u\|$.

Gli insiemi di tutte le funzioni u tali che $\|u\|_m < \infty$, $\|u\|_{1+\alpha} < \infty$, $\|u\|_{2+\alpha} < \infty$ sono denotati con $C^m(\Omega)$, $C^{1+\alpha}(\Omega)$, $C^{2+\alpha}(\Omega)$, rispettivamente, più in generale $C^m(\Omega)$, $C^{m+\alpha}(\Omega)$, $m = 1, 2$ sono spazi di Banach. Analogamente su $\partial\Omega$ sono denotate con $C^{m+\alpha}(\partial\Omega)$, $m = 0, 1, 2$.

In $D_T = (0, T] \times \Omega$. La costante di Hölder è

$$H_\alpha \equiv \left\{ \frac{\|u(t, x) - u(\tau, \xi)\|}{(\|t - \tau\|^2 + \|x - \xi\|^2)^{\alpha/2}}; (t, x), (\tau, \xi) \in D_T \right\}$$

e valgono conclusioni analoghe per $C^{m+\alpha}(D_T)$, $m = 0, 1, 2$.

Dato il problema di equazioni paraboliche lineari

$$\begin{cases} u_t - D\Delta u + c_0(x)u = q(t, x) & \text{in } D_T \\ Bu = \alpha_0 \frac{\partial u}{\partial \nu} + \beta_0 u = h(t, x) & \text{in } S_T \\ u(0, x) = u_0(x) & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

dove $D_T = (0, T] \times \Omega$, $S_T = (0, T] \times \partial\Omega$ e D è costante positiva, c_0 è funzione continua.

In accordo con il teorema d'esistenza per problemi parabolici lineari ai valori al bordo, se $\Omega \in C^{1+\alpha}$ per qualche $\alpha \in (0, 1)$ e se c_0, q, h, u_0 sono funzioni Hölderiane nei loro domini, allora la soluzione $u \in C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T)$ è unica. La soluzione u si può rappresentare in termini della funzione di Green

$$\begin{cases} G_t - D\Delta G + c_0(x)G = \delta(t - \tau)\delta(x - \xi), & \tau < t, x \in \Omega \\ G(t, x; \tau, \xi) = \Gamma(t, x; \tau, \xi) + W(t, x; \tau, \xi), & \tau > t, x \in \Omega \\ G(t, x; \tau, \xi) = 0, & \tau < t, x \in \partial\Omega \end{cases}$$

dove Γ è soluzione fondamentale dell'operatore $(\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta + c_0)$, e quando c_0 è costante, è dato da

$$\Gamma(t, x; \tau, \xi) = [4\pi D(t - \tau)]^{-n/2} \exp\left[-\left(c_0 t + \frac{|x - \xi|^2}{4D|t - \tau|}\right)\right].$$

La funzione W è soluzione del problema

$$\begin{cases} W_t - D\Delta W + c_0(x)W = 0, & \text{in } D_T \\ BW = -B\Gamma, & \text{in } S_T \\ W(0, x; \tau, \xi) = -\Gamma(0, x; \tau, \xi), & \text{in } \Omega \end{cases}$$

I risultati per la teoria dei problemi parabolici non lineare vengono tratti dai teoremi di quelli lineari. Il seguente Lemma, che deriva dal Principio del massimo, ha una funzione importante nel metodo delle iterazioni monotone.

Lemma 1 Sia $w \in C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T)$ tale che

$$\begin{cases} w_t - Lw + cw \geq 0, & \text{in } D_T \\ \alpha_0 \frac{\partial w}{\partial \nu} + \beta_0 w \geq 0, & \text{in } S_T \\ w(0, x) \geq 0, & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

dove $\alpha_0 \geq 0$, $\beta_0 \geq 0$, $\alpha_0 + \beta_0 > 0$ su S_T , e $c = c(t, x)$ è limitata in D_T . Allora $w(t, x) \geq 0$ in \bar{D}_T . Inoltre $w(t, x) > 0$ in D_T a meno che sia identicamente nulla.

Un teorema importante, dal quale derivano risultati importanti, è il famoso Principio del massimo.

Teorema 2 Data la funzione $w \in C^{1,2}(D_T)$ tale che

$$w_t - Lw \geq 0 \quad (t, x) \in D_T.$$

Se w ha un minimo m_0 , in qualche punto appartenente a D_T , allora $w(t, x) = m_0$ in tutto \bar{D}_T . Se w assume un minimo nel punto (t_0, x_0) su S_T , allora $\frac{\partial w}{\partial \nu} < 0$ in (t_0, x_0) ogni volta che w non è una costante.

Teorema 3 Data $w \in C^{1,2}(D_T)$ tale che

$$w_t - Lw + cw \geq 0 \quad (t, x) \in D_T$$

dove $c \equiv c(t, x)$ è una funzione limitata in D_T . allora la soluzione del problema (A.1) converge uniformemente a zero in $\bar{\Omega}$ quando $c \geq 0$ ed $m_0 \leq 0$.

Considero il problema

$$\begin{cases} u_t - Lu = f(t, x, u), & \text{in } D_T \\ Bu = h(t, x), & \text{in } S_T \\ u(0, x) = u_0(x), & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

dove B è l'operatore lineare dato da $(\alpha_0(x)\frac{\partial}{\partial \nu} + \beta_0(x)u)$ e le funzioni f , h e u_0 sono Hölderiane.

Definizione 2 Una funzione $\tilde{u} \in C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T)$ è chiamata sopra-soluzione del problema (A.3) se sono soddisfatte le seguenti disuguaglianze

$$\begin{cases} \tilde{u}_t - D\Delta\tilde{u} \geq f(x, \tilde{u}), & \text{in } D_T \\ B\tilde{u} \geq h(t, x), & \text{in } S_T \\ \tilde{u}(0, x) \geq u_0(x), & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

analogamente se $\hat{u} \in C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T)$ soddisfa le disuguaglianza inversa è detta sottosoluzione. Sono ordinate se $\tilde{u} \geq \hat{u}$.

In questa definizione le derivate parziali $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \nu}$ e $\frac{\partial \hat{u}}{\partial \nu}$ esistono su $\partial\Omega$ se α_0 . È chiaro che ogni soluzione del problema (A.3) è sia sopra che sotto soluzione. Per ogni sopra e sotto soluzione \tilde{u} e \hat{u} definiamo il settore $\langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$ come l'intervallo funzionale $\langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle \equiv \{u \in C(\bar{D}_T); \hat{u} \leq u \leq \tilde{u}\}$.

Un'assunzione base per la f è che soddisfi la seguente condizione di Lipschitz

$$f(x, u_1) - f(x, u_2) \geq -\underline{c}(u_1 - u_2) \quad \text{per } \hat{u} \leq u_2 \leq u_1 \leq \tilde{u} \quad (\text{A.5})$$

dove \underline{c} è una costante. Tale condizione è soddisfatta con $\underline{c} = 0$ quando f è monotona non decrescente in u . In virtù della (A.5) la funzione

$$F(x, u) \equiv \underline{c}u + f(x, u) \quad (\text{A.6})$$

è monotona non decrescente in u per $u \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$.

Aggiungendo $\underline{c}u$ ad entrambi i lati dell'equazione differenziale in (A.3) e scegliendo un'iterazione iniziale adeguata $u^{(0)}$ costruiamo una sequenza $\{u^{(k)}\}$ dal processo di iterazione dato da

$$\begin{cases} u_t^{(k)} - D\Delta u^{(k)} + \underline{c}u^{(k)} = \underline{c}u^{(k-1)} + f(x, u^{(k-1)}), & \text{in } D_T \\ Bu^{(k)} = h(t, x), & \text{in } S_T \\ u^{(k)}(0, x) = u_0(x), & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Quindi per ogni k il membro destro dell'equazione differenziale è noto, inoltre il teorema d'esistenza per problemi lineari parabolici a valori al bordo implica che la successione $\{u^{(k)}\}$ è ben definita.

Un interesse particolare ha il caso in cui la successione iniziale $\{u^{(0)}\}$ è data dalla soluzione superiore o inferiore, denotando $\{u^{(0)}\} = \tilde{u}$ con $\{\bar{u}^{(k)}\}$ e $\{u^{(0)}\} = \hat{u}$ con $\{\underline{u}^{(k)}\}$.

Quando $f \in C^1((A.3))$ la costante di Lipschitz è

$$\underline{c} = \max\{-f_u(x, u) : x \in \bar{\Omega}, \hat{u} \leq u \leq \tilde{u}\},$$

dove $f_u = \frac{\partial f}{\partial u}$.

Nel caso dove f soddisfa una condizione di Lipschitz della forma

$$|f(x, u_1) - f(x, u_2)| \leq k|u_1 - u_2|$$

per $u_1, u_2 \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$, dove $k = \underline{c}$.

Tale osservazione porta al seguente

Corollario 4 Date \tilde{u}, \hat{u} soluzioni superiore ed inferiore ordinate di (A.3) e data $f \in C^1(\langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle)$ allora il problema (A.3) ha un'unica soluzione $u \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$. Inoltre questa soluzione è limitata dalla successione $\{u^k\}$ con $u^0 = \tilde{u}$ o $u^0 = \hat{u}$, dove $\underline{c} = \max\{-f_u(x, u) : x \in \bar{\Omega}, \hat{u} \leq u \leq \tilde{u}\}$ oppure $k = \underline{c}$.

Se $f(x, u) \geq 0$ e le condizioni iniziali ed al bordo sono non negative la funzione banale $\hat{u} = 0$ è una soluzione inferiore. Quindi l'esistenza di una soluzione di (A.3) segue se c'è una soluzione superiore non negativa.

Una condizione sufficiente per l'esistenza di una soluzione non negativa è che per qualche costante $\rho > 0$ si ha

$$f(x, \rho) \leq 0, \quad \rho \geq \frac{h(t, x)}{\beta_0(x)} \text{ e } \rho \geq u_0(x).$$

Teorema 5 Data \tilde{u} una soluzione superiore non negativa ed $f \in C^1(\langle 0, \tilde{u} \rangle)$. Se

$$f(x, 0) \geq 0, \quad h(t, x) \geq 0, \quad u_0 \geq 0,$$

quando esiste, la soluzione è unica e $0 \leq u(t, x) \leq \tilde{u}$ in \bar{D}_T .

Se

$$f(x, \rho) \leq 0, \quad \rho \geq \frac{h(t, x)}{\beta_0(x)} \text{ e } \rho \geq u_0$$

è vera per qualche costante positiva ρ quando $\tilde{u} = 0$ è una soluzione superiore positiva e $0 \leq u(t, x) \leq \rho$ in \bar{D}_T .

Teorema 6 Date \tilde{u}, \hat{u} soluzione superiore ed inferiore del problema (A.3) ed f soddisfi la condizione di Lipschitz per $u_1, u_2 \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$ con $u_2 \leq u_1$. Allora $\hat{u} \leq \tilde{u}$ in \bar{D}_T . Inoltre $\forall k = 1, 2, \dots \bar{u}^k$ sono soluzioni superiori ed inferiori ordinate.

Le soluzioni superiori ed inferiori portano le due successioni monotone a convergere ad una soluzione unica dell'equazione integrale. Il limite delle successioni monotone è proprio la soluzione del problema parabolico per ognuna delle tre condizioni. Questa regolarità si può estendere al caso di un più generale problema parabolico a valori al bordo utilizzando la proprietà di una soluzione fondamentale. La maggior parte dei sistemi di equazioni di reazione e diffusione hanno la funzione di reazione appartenente a C^1 , cioè continua e differenziabile, ed i dati del sistema hanno proprietà di non negatività quali:

$$f(t, x, 0) \geq 0, \quad h(t, x) \geq 0, \quad u_0(x) \geq 0. \quad (\text{A.8})$$

In questo caso \hat{u} è una soluzione inferiore. Il seguente teorema dà l'esistenza per una soluzione positiva, del sistema parabolico di equazioni di reazione e diffusione.

Teorema 7 *Data $f \in C^1$, $u \in \mathbb{R}^+$, e data la condizione (A.8) considerando che le tre funzioni non siano identicamente nulle contemporaneamente. Allora il problema di equazioni semilineari di reazione e diffusione (A.3) ha un'unica soluzione positiva se e solo se esiste una soluzione positiva superiore. Una soluzione positiva globale esiste se per ogni T finito si ha una funzione limitata $M(t, x)$ tale che*

$$f_u(t, x, u) \leq M(t, x) \quad \text{per } u \geq 0 \quad ((t, x) \in D_T). \quad (\text{A.9})$$

La condizione (A.9) assicura l'esistenza dell'unicità globale della soluzione in D ma non l'essere uniformemente limitata. I seguenti due teoremi danno alcune condizioni sulla funzione f affinché il sistema (A.3) abbia un'unica soluzione positiva limitata.

Teorema 8 *Siano α_0 , β_0 , h ed il coefficiente di L indipendenti da t e sia $\beta_0 \neq 0$ e sia verificata la condizione (A.8). Se esiste una costante positiva K_0 tale che*

$$f(t, x, u) \leq K_0 \quad \text{per } u \leq 0 \quad ((t, x) \in D) \quad (\text{A.10})$$

allora per ogni $u_0 \geq 0$ esiste un'unica soluzione limitata non negativa del problema (A.3). Inoltre u è positiva in D a meno che è identicamente nulla.

Teorema 9 *Sia $f \in C^m$ in $u \in \mathbb{R}^+$, e siano verificate le condizioni (A.8). Se esistono due costanti positive ρ_0 e ϵ_0 tale che*

$$f(t, x, \rho_0) \geq 0, \quad \partial^m f / \partial u^m \leq -\epsilon_0 \quad \text{per } u \geq \rho_0 \quad (\text{A.11})$$

allora esiste un'unica soluzione globale non negativa u del problema (A.3). Inoltre u è uniformemente limitata in D quando $h(t, x)$ è limitata su S .

Teorema 10 *Date $\bar{u}^{(k)}$ e $\underline{u}^{(k)}$ soluzioni superiore ed inferiore ordinate dl problema (A.3) ed f tale che soddisfi la condizione di Lipchitz (A.5). Allora*

1. *la successione superiore $\{\bar{u}^{(k)}\}$ converge con monotonia da sopra alla soluzione \bar{u} e la successione inferiore $\{\underline{u}^{(k)}\}$ converge con monotonia da sotto alla soluzione \underline{u}*
2. *$\bar{u} \geq \underline{u}$ in \bar{D}_T e per ogni altra soluzione $u^* \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$ soddisfa la relazione $\hat{u} \leq u^* \leq \tilde{u}$*
3. *se è verificata la condizione di Lipschitz*

$$f(x, u_1) - f(x, u_2) \leq \bar{c}(u_1 - u_2) \quad \text{per } \hat{u} \leq u_2 \leq u_1 \leq \tilde{u} \quad (\text{A.12})$$

con $\bar{u} \geq -\underline{u}$, allora $\bar{u}^{(k)} = \underline{u}^{(k)}$ ed è l'unica soluzione in $\langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$.

In tale settore si assume per qualche funzione limitata $\underline{c} \equiv \underline{c}(t, x)$ e $\bar{c} \equiv \bar{c}(t, x)$, f soddisfa la condizione di Lipschitz

$$\begin{aligned} \underline{c}(u_1 - u_2) \leq f(t, x, u_1) - f(t, x, u_2) \leq -\bar{c}(u_1 - u_2) \\ \text{per } \hat{u} \leq u_1 \leq u_2 \leq \tilde{u}, (t, x) \in D_T \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Senza perdere di generalità si può assumere che $\underline{c}(t, x)$ é Hölderiana in \bar{D}_T . Ciò implica che la funzione La funzione

$$F(t, x, u) = \underline{c}(t, x)u + f(t, x, u) \quad (\text{A.14})$$

è Hölderiana in $\bar{D}_T \times \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$ ed é monotona non decrescente in $u \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$. In più, F soddisfa la condizione di Lipschitz

$$|F(t, x, u_1) - F(t, x, u_2)| \leq K|u_1 - u_2| \text{ per } u_1, u_2 \in \langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle \quad (\text{A.15})$$

dove K potrebbe essere preso come limite superiore di $|\underline{c}(t, x)| + |\bar{c}(t, x)|$ in \bar{D}_T . Inoltre la (A.13) si ha quando f è continua e Lipschitziana in u . In più nella costruzione delle successioni monotone si ha bisogno solo del lato sinistro della condizione di Lipschitz di (A.13), la parte destra è usata per garantire l'unicità della soluzione. Tale condizione è più debole ha perciò bisogno di un certo tipo di funzionale di funzioni di reazione che non soddisfano puntualmente una condizione di Lipschitz.

Considero l'equivalente equazione differenziale

$$\mathbb{L}_c[u] = F(t, x, u) \text{ in } D_T \quad (\text{A.16})$$

con le stesse condizioni iniziali ed al bordo del problema (A.3), dove F è data dalla (A.14) ed $\mathbb{L}_c \equiv (\partial/\partial t - L + c)$ con $c \equiv \underline{c}$. Partendo da un'adeguata soluzione iniziale $u^{(0)}$ si può costruire la successione $u^{(k)}$ tramite il sistema lineare

$$\begin{cases} \mathbb{L}_c[u^{(k)}] = F(t, x, u^{(k-1)}) & \text{in } D_T \\ Bu^{(k)} = h(t, x), & \text{in } S_T \\ u^{(k)}(0, x) = u_0(x), & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

dove $k = 1, 2, \dots$ denota la successione con $\{u^{(0)}\} = \tilde{u}$ e con $\{u^{(0)}\} = \hat{u}$ rispettivamente da $\{\bar{u}^{(k)}\}$ e da $\{\underline{u}^{(k)}\}$. Per dimostrare che la condizione di Lipschitz, (A.13), per ognuna delle due successioni, converge monotonicamente all'unica soluzione del problema (A.3), si ha bisogno del seguente

Lemma 11 *Sia sodisfatta la condizione di Lipschitz (A.13), allora le due successioni $\bar{u}^{(k)}$ e $\underline{u}^{(k)}$ sono ben definite, e $\bar{u}^{(k)}, \underline{u}^{(k)} \in C^\alpha(D_T) \forall k$.*

Lemma 12 *Le soprasuccessioni e sottosuccessioni $\{\bar{u}^{(k)}\}$ e $\{\underline{u}^{(k)}\}$ possiedono la proprietà di monotonia*

$$\hat{u} \leq \underline{u}^{(k)} \leq \underline{u}^{(k+1)} \leq \bar{u}^{(k+1)} \leq \bar{u}^{(k)} \leq \tilde{u} \text{ in } \bar{D}_T. \quad (\text{A.18})$$

Lemma 13 *Per le soprasuccessioni e sottosuccessioni esistono limiti puntuali*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{u}^{(k)}(t, x) = \bar{u}(t, x) \text{ e } \lim_{k \rightarrow \infty} \underline{u}^{(k)}(t, x) = \underline{u}(t, x) \quad (\text{A.19})$$

e soddisfano la relazione

$$\hat{u} \leq \underline{u}^{(k)} \leq \underline{u}^{(k+1)} \leq \underline{u} \leq \bar{u} \leq \bar{u}^{(k+1)} \leq \bar{u}^{(k)} \leq \tilde{u} \text{ in } \bar{D}_T \quad (\text{A.20})$$

dove $k = 1, 2, \dots$

Lemma 14 *Se i limiti \bar{u} e \underline{u} di (A.19) sono soluzioni di (A.3) allora $\bar{u} = \underline{u}$ e la soluzione è unica nel settore $\langle \hat{u}, \tilde{u} \rangle$.*

Il Lemma successivo mostra che $\bar{u}^{(k)}$ e $\underline{u}^{(k)}$ sono sopra e sotto soluzioni ordinate di (A.3).

Lemma 15 *Per ogni k , $\bar{u}^{(k)}$ \tilde{A} una sopra soluzione, $\underline{u}^{(k)}$ è una sotto soluzione ed inoltre $\underline{u}^{(k)} \leq \bar{u}^{(k)}$.*

Nel Lemma precedente si è assunto che le soprasoluzione e sottosoluzione \tilde{u} e \hat{u} sono ordinate. Il Lemma seguente dimostra che se $f \in C^1$, oppure è Lipschitziana, in u allora \tilde{u} e \hat{u} sono necessariamente ordinate.

Lemma 16 *Siano \tilde{u} e \hat{u} sopra e sotto soluzioni di (A.3), e sia $f \in C^1$ in u . Allora $\tilde{u} \geq \hat{u}$. In particolare, se \tilde{u} è una soluzione superiore (rispettivamente se \hat{u} è una inferiore) e u^* è soluzione di (A.3), allora $\tilde{u} \geq u^*$ (rispettivamente $\hat{u} \leq u^*$).*

Dopo aver discusso in maniera generale il problema, passo ad analizzare il sistema formato da N equazioni paraboliche.

Considero

$$\begin{cases} (u_i)_t - L_i u_i = f_i(t, x, u_1, u_2, \dots, u_N) & \text{in } D_T \\ B_i u_i = h_i(t, x) & \text{su } S_T \\ u_i(0, x) = u_{i,0}(x) & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

dove L_i e B_i sono operatori della forma

$$\begin{aligned} L_i &= \sum_{j,l=1}^n a_{j,l}^{(i)}(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} + \sum_{j=1}^n b_j^{(i)}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_j} \\ B_i &= \alpha_i(t, x) \frac{\partial}{\partial v} + \beta_i(t, x) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Si assume che, per ogni $i = 1, \dots, N$ i coefficienti di L_i , B_i e le funzioni iniziali ed al bordo h_i , $u_{i,0}$ soddisfino tutte le stesse condizioni delle corrispondenti funzioni del problema scalare (A.3). Le funzioni f_i sono assunte Hölderiane in $\bar{D}_T \times J^N$ dove J^N è un sottoinsieme di \mathbb{R}^N ed è determinato dalle corrispondenti soprasoluzioni e sottosoluzioni. Si può scrivere il vettore \mathbf{u} nella forma

$$\mathbf{u} = (u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{u}]_{b_i})$$

e le funzioni f_i come

$$f_i(t, x, \mathbf{u}) = (t, x, u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{u}]_{b_i}), \quad i = 1, \dots, N,$$

dove a_i e b_i sono due interi non negativi tale che $a_i + b_i = N - 1$ e $[\mathbf{u}]_{a_i}$, $[\mathbf{u}]_{b_i}$ denotano i componenti a_i e b_i del vettore \mathbf{u} . La forma del vettore \mathbf{u} varia rispetto ad i ed dalla proprietà di quasi monotocità di f_i che è definita dalla seguente

Definizione 3 *Una funzione vettoriale $\mathbf{f} = f(f_1, \dots, f_N)$ possiede la quasi monotocità se per ogni i esistono a_i e b_i interi non negativi, con $a_i + b_i = N - 1$, tali che $f_i(\cdot, u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{u}]_{b_i})$ è monotona non decrescente in $[\mathbf{u}]_{a_i}$ ed è monotona non crescente in $[\mathbf{u}]_{b_i}$.*

Quando $a_i = 0$ e $b_i = 0$ allora la \mathbf{f} è detta, rispettivamente, quasi monotona non crescente e quasi monotona non decrescente. Il sistema (A.21) si può riscrivere come

$$\begin{cases} (u_i)_t - L_i u_i = f_i(t, x, u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{u}]_{b_i}) & \text{in } D_T \\ B_i u_i = h_i(t, x) & \text{su } S_T \\ u_i(0, x) = u_{i,0}(x) & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

con $i = 1, \dots, N$.

Definizione 4 *Una coppia di funzioni $\tilde{\mathbf{u}} \equiv (\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N)$, $\hat{\mathbf{u}} \equiv (\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_N)$ in $C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T)$ sono chiamate coppia di soprasoluzioni e sottosoluzioni di (A.23) se $\tilde{\mathbf{u}} \geq \hat{\mathbf{u}}$ in \bar{D}_T e se*

$$\begin{cases} (\tilde{u}_i)_t - L_i \tilde{u}_i \geq f_i(t, x, \tilde{u}_i, [\tilde{\mathbf{u}}]_{a_i}, [\hat{\mathbf{u}}]_{b_i}) \\ (\hat{u}_i)_t - L_i \hat{u}_i \leq f_i(t, x, \hat{u}_i, [\hat{\mathbf{u}}]_{a_i}, [\tilde{\mathbf{u}}]_{b_i}) \\ B_i \tilde{u}_i \geq h_i(t, x) \geq B_i \hat{u}_i \\ \tilde{u}_i(0, x) \geq u_{i,0}(x) \geq \hat{u}_i(0, x) \end{cases} \Omega$$

dove le componenti \tilde{u}_i e \hat{u}_i sono in $C(\bar{D}_T) \cap C^{1,2}(D_T) \forall i = 1, \dots, N$.

Da questa definizione si evince che le sopra e sotto soluzioni sono accoppiate a meno che \mathbf{f} sia quasi monotona non decrescente. Per un paio di sopra e sotto soluzioni accoppiate $\tilde{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}$ si definisce il settore

$$\langle \tilde{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}} \rangle \equiv \{ \mathbf{u} \in C(\bar{D}_T); \hat{\mathbf{u}} \leq \mathbf{u} \leq \tilde{\mathbf{u}} \} \quad (\text{A.24})$$

Si assume che per ogni $i = 1, \dots, N$ esistono funzioni $\underline{c}_i \in C(\bar{D}_T)$ tali che

$$\mathbf{f}_i(t, x, u_i, [\tilde{\mathbf{u}}_{a_i}], [\hat{\mathbf{u}}_{b_i}]) - \mathbf{f}_i(t, x, v_i, [\tilde{\mathbf{u}}_{a_i}], [\hat{\mathbf{u}}_{b_i}]) \geq -\underline{c}_i(u_i - v_i) \quad (\text{A.25})$$

per $\hat{u}_i \leq v_i \leq u_i \leq \tilde{u}_i$. Allora, definendo

$$F_i(t, x, u_i, [\tilde{\mathbf{u}}_{a_i}], [\hat{\mathbf{u}}_{b_i}]) = \underline{c}_i u_i + \mathbf{f}_i(t, x, u_i, [\tilde{\mathbf{u}}_{a_i}], [\hat{\mathbf{u}}_{b_i}]) \quad (\text{A.26})$$

il sistema (A.23) diventa

$$(u_i)_t - L_i u_i + \underline{c}_i u_i = F_i(t, x, u_i, [\tilde{\mathbf{u}}]_{a_i}, [\hat{\mathbf{u}}]_{b_i}) \quad (\text{A.27})$$

con le stesse condizioni iniziali ed al bordo. Il seguente Lemma da alcune proprietà per la funzione

$$(F_i(\mathbf{u}))(t, x) \equiv F_i(t, x, \mathbf{u}(t, x)).$$

Lemma 17 *Sia $f_i(t, x, \mathbf{u})$ Hölderiana in (t, x) e Lipschitziana in $\mathbf{u} \in \langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle$. Allora per ogni $\mathbf{u} \in C^\alpha(D_T)$ la funzione $F(\mathbf{u})$ è Hölderiana in D_T . In più, se $\mathbf{f} \equiv (f_1, \dots, f_N)$ è quasimonotona in $\langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle$ e soddisfa (A.25) allora per ogni $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle$ con $\mathbf{u} \geq \mathbf{v}$.*

$$F_i(t, x, u_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{v}]_{b_i}) - F_i(t, x, v_i, [\mathbf{u}]_{a_i}, [\mathbf{v}]_{b_i}) \geq 0 \quad (\text{A.28})$$

Considero $\bar{\mathbf{u}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{u}}$ ed $\underline{\mathbf{u}}^{(0)} = \hat{\mathbf{u}}$ come due iterazioni iniziali e costruisco due successioni $\bar{\mathbf{u}}^{(k)} = \bar{\mathbf{u}}_1^{(k)}, \dots, \bar{\mathbf{u}}_N^{(k)}$, $\underline{\mathbf{u}}^{(k)} = \underline{\mathbf{u}}_1^{(k)}, \dots, \underline{\mathbf{u}}_N^{(k)}$ tramite il seguente processo d'iterazione

$$\mathbb{L}_i \bar{u}_i^{(k)} = F_i(t, x, u_i, [\bar{\mathbf{u}}^{(k-1)}]_{a_i}, [\underline{\mathbf{u}}^{(k-1)}]_{b_i}) \quad \mathbb{L}_i \underline{u}_i^{(k)} = F_i(t, x, u_i, [\underline{\mathbf{u}}^{(k-1)}]_{a_i}, [\bar{\mathbf{u}}^{(k-1)}]_{b_i})$$

con $i = 1, \dots, N$, dove $\mathbb{L}_i u_i = (u_i)_t - L_i u_i + \underline{c}_i u_i$. Le condizioni al bordo e quelle iniziali sono date da

$$B_i \bar{u}_i^{(k)} = B_i \underline{u}_i^{(k)} = h_i(t, x) \bar{u}_i^{(k)}(0, x) = \underline{u}_i^{(k)} = u_{i,0}(x)$$

Quindi per ogni k i due sistemi per le $\bar{u}_i^{(k)}$ e le $\underline{u}_i^{(k)}$ in (A.29) ed in (A.29) sono problemi scalari lineari disaccoppiati. I Teoremi 2.1.1 e 2.1.2 (pag 52) assicurano che le successioni $\bar{u}_i^{(k)}$ e $\underline{u}_i^{(k)}$ sono ben definite inoltre sono, qualche volta, riferite alle soprasuccessioni e sottosuccessioni, rispettivamente. Il seguente Lemma da la monotonicità delle due successioni.

Lemma 18 *Le soprassuccessioni e sottosuccessioni $\bar{u}_i^{(k)}$, $\underline{u}_i^{(k)}$ possiedono la proprietà di monotonicità*

$$\hat{\mathbf{u}} \leq \underline{\mathbf{u}}^{(k)} \leq \underline{\mathbf{u}}^{(k+1)} \leq \bar{\mathbf{u}}^{(k+1)} \leq \bar{\mathbf{u}}^{(k)} \leq \tilde{\mathbf{u}} \quad \text{in } \bar{D}_t \quad (\text{A.29})$$

per ogni k . In più, sempre per ogni k , $\bar{\mathbf{u}}^{(k)}$ e $\underline{\mathbf{u}}^{(k)}$ sono soprassoluzioni e sottosoluzioni accoppiate di (A.23).

In vista della proprietà di monotonia (A.29) esistono i limiti puntuali

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{\mathbf{u}}^{(k)}(t, x) = \bar{\mathbf{u}}(t, x), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \underline{\mathbf{u}}^{(k)}(t, x) = \underline{\mathbf{u}}(t, x) \quad (\text{A.30})$$

e soddisfa la relazione $\hat{\mathbf{u}} \leq \underline{\mathbf{u}} \leq \bar{\mathbf{u}} \leq \tilde{\mathbf{u}}$ in \bar{D}_T . Per mostrare che $\underline{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}$ e che è l'unica soluzione di (A.23) si assume che f_i soddisfi la condizione di Lipschitz

$$|f_i(t, x, \mathbf{u}) - f_i(t, x, \mathbf{v})| \leq K_i |\mathbf{u} - \mathbf{v}| \quad \text{per } \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle \quad (\text{A.31})$$

dove $K_i \equiv K_i(t, x)$ sono funzioni limitate in D_T .

Il seguente Teorema dà un risultato per l'esistenza della soluzione dei sistemi accoppiati (A.23).

Teorema 19 *Siano $\tilde{\mathbf{u}}$, $\hat{\mathbf{u}}$ soprassoluzioni e sottosoluzioni accoppiate di (A.23), e sia $\mathbf{f} \equiv (f_1, \dots, f_N)$ quasimonotona in $\langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle$ e soddisfi le condizioni (A.25) e (A.31). Allora esiste un'unica soluzione u^* di (A.23), con $u^* \in \langle \hat{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle$. In più le successioni $\bar{\mathbf{u}}^{(k)}$, $\underline{\mathbf{u}}^{(k)}$ date dalla (A.29) e dalla (A.29) con $\bar{\mathbf{u}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{u}}$ e $\underline{\mathbf{u}}^{(0)} = \hat{\mathbf{u}}$ entrambe convergono monotonicamente ad u^* .*

Appendice B

Programmi usati per calcolare la soluzione del problema

In questa sezione focalizzo l'attenzione sui programmi da me creati per calcolarmi le soluzioni delle concentrazioni di substrato, ossigeno e biomassa trovate risolvendo numericamente il sistema di equazioni di reazione e diffusione.

B.0.1 Programma unidimensionale

Ho cominciato con il caso unidimensionale, perché in matlab esisteva già un programma che risolveva l'equazione di reazione e diffusione da me analizzata. La routine non risolveva solo un'equazione ma un sistema di equazioni, proprio come nel mio caso, della forma

$$f_1 \left(x, t, u, \frac{du}{dx} \right) \cdot \frac{du}{dt} = x^{-m} \cdot \frac{d}{dx} \left(x^m * f_2 \left(x, t, u, \frac{du}{dx} \right) \right) + f_3 \left(x, t, u, \frac{du}{dx} \right)$$

dove $m = 0, 1, 2$ corrisponde ad avere simmetria lineare, cilindrica o sferica, rispettivamente. La matrice $c \left(x, t, u, \frac{du}{dx} \right)$ è diagonale i cui elementi sono positivi, questo perché l'equazione è parabolica. L'intervallo di tempo è dato da $t \in [t_0, t_f]$, mentre quello spaziale è $x \in [x_0, x_f]$.

Le condizioni iniziali ed al bordo sono determinate dall'equazione

$$g_1(x, t, u) + g_2(x, t) * f \left(x, t, u, \frac{du}{dx} \right) = 0$$

dove g_2 è una matrice diagonale.

La prima parte del programma è quella determinante il problema.

function bonifica

Con m specifico che sto trattando il problema con simmetria sferica.

$m = 2$;

Determino la griglia temporale e quella spaziale.

$x = 0 : 0.25 : 1$;

$t = 0 : 0.1 : 0.5$;

Richiamo la soluzione, calcolata tramite la funzione *pdepe* a sua volta determinata dagli elementi generati dalle funzioni che stimano i dati iniziali, quelli al bordo e le funzioni di reazione.

$sol = pdepe(m, @pdex4pde, @pdex4ic, @pdex4bc, x, t)$;

Metto nelle matrici $u1$, $u2$ e $u3$ le soluzioni trovate.

$u1 = sol(:, :, 1)$;

$u2 = sol(:, :, 2)$;

$u3 = sol(:, :, 3)$;

Grafico le soluzioni su tre sottofinestre differenti, facenti parte di un'unica finestra più grande, in modo da vederle contemporaneamente.

```
figure
for i = 1 : 3
subplot(1, 3, i)
plot(t, sol(:, 3, i))
title(['u', int2str(i)])
end
```

La funzione *pdexpde* calcola le tre quantità definite da f_1 , f_2 ed f_3 dell'equazione differenziale.

function $[f_1, f_2, f_3] = pdexpde(x, t, u, dudx)$

Nel mio caso la matrice f_1 ha tutti elementi 1 sulla diagonale, che rappresentano il coefficiente della concentrazione derivata nel tempo.

$$f_1 = [1; 1; 1];$$

Fisso le costanti che determineranno i coefficienti della mia equazione.

–Costanti –

$$qs = 600;$$

$$kds = 150;$$

$$r = 0.5;$$

$$csi = qs/kds;$$

$$cof = 8.e - 6;$$

$$db = 1.e - 6;$$

$$do = 2.e - 5;$$

$$dsl = 4.e - 6;$$

$$dss = 0.;$$

$$kd = 2.78e - 7;$$

$$ko = 1.e - 8;$$

$$ks = 1.e - 6;$$

$$kdb = 30.;$$

$$yo = 1.;$$

$$ys = 0.5;$$

$$\epsilon_a = 0.37;$$

$$min = 2.78e - 5;$$

$$\rho = 1.72;$$

$$\tau = 1.4;$$

$$\beta_o = cof/ko;$$

$$\beta_s = 4;$$

$$rb = 1. + (\rho * kdb)/\epsilon_a;$$

$$rs = 698;$$

$$w = 175;$$

$$dsa = ((dsl/\tau) + dss * (rs - 1)) * (\tau/dsl);$$

$$doa = do/dsl;$$

$$dba = db/dsl;$$

$$\phi_1 = 59;$$

$$\phi_2 = (r/3.) * \sqrt{\frac{kd*\tau}{dsl}};$$

Definisco f_2 che rappresenta il flusso.

$$f_2 = [dsa/rs; doa; dba/rb]. * DuDx;$$

Scrivo le tre funzioni di reazione per ognuna delle tre equazioni.

$$\begin{aligned}Q &= 9 * (\phi_1^2) * u(3) * (u(1)/(1. + \beta_s * u(1))) * (u(2)/(1. + \beta_o * u(2))); \\R &= 9 * (\phi_1^2) * w * u(3) * (u(1)/(1. + \beta_s * u(1))) * (u(2)/(1. + \beta_o * u(2))); \\V &= -9 * (\phi_1^2) * u(3) * (u(1)/(1. + \beta_s * u(1))) * (u(2)/(1. + \beta_o * u(2))) + 9 * (\phi_2^2) * u(3);\end{aligned}$$

– Definisco il vettore f_3 –

$$f_3 = [-Q; -R; -V];$$

Definisco il vettore con i dati iniziali u_0 .

$$\begin{aligned}\text{function } u_0 &= \text{pdexic}(x) \\u_0 &= [1; 0.05; 10^6 - 4];\end{aligned}$$

Determino le condizioni al bordo.

$$\begin{aligned}\text{function } [p_i, q_i, p_f, q_f] &= \text{pdexbc}(x_i, u_i, x_f, u_f, t) \\p_i &= [0; 0; 0]; \\q_i &= [1; 1; 1]; \\p_f &= [u_f(1) - 0.0009; u_f(2) - 1; u_f(3) - (7.1153e - 004)]; \\q_f &= [0; 0; 0];\end{aligned}$$

B.0.2 Programma bidimensionale esplicito

Definisco il passo temporale, ΔT , e spaziale, ΔX , per determinare i rispettivi intervallo.

```
 $\Delta T = 0.01;$   
 $\Delta X = 0.5;$   
 $t = 0 : \Delta T : 1;$   
 $y = 0 : \Delta X : 10;$   
 $x = 0 : \Delta X : 10;$ 
```

Costruisco le matrici tridimensionali delle soluzioni.

```
 $nt = \text{length}(t);$   
 $nx = \text{length}(x);$   
 $ny = \text{length}(y);$   
 $u = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$   
 $v = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$   
 $w = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$ 
```

Fisso le costanti che fanno parte del sistema di equazioni.

```
 $qs = 600;$   
 $kds = 1.5;$   
 $R = 1;$   
 $csi = qs/kds;$   
 $cof = 8.e - 6;$   
 $db = 1.e - 6;$   
 $do = 2.e - 5;$   
 $dsl = 4.e - 6;$   
 $dss = 0.;$   
 $kd = 2.78e - 7;$   
 $ko = 1.e - 8;$   
 $ks = 1.e - 6;$   
 $kdb = 30.;$   
 $yo = 1.;$   
 $ys = 0.5;$   
 $\epsilon_a = 0.37;$   
 $\epsilon_l = 0.37;$   
 $\epsilon_m = 3 * (1 - \epsilon_l) * \epsilon_a / \epsilon_l;$   
 $min = 2.78e - 5;$ 
```

```

ρ = 1.72;
τ = 1.4;
βo = cof/ko;
βs = 400;
rb = 1. + (ρ * kdb)/εa;
rs = 8;
W1 = (csi * rs * ys)/8. * yo;
dsa = ((dsl/τ) + dss * (rs - 1)) * (τ/dsl);
doa = do/dsl;
dba = db/dsl;
φ1 = 588;
φ2 = (R/3.) * √(kd*τ/dsl);

```

Definisco i coefficienti delle equazioni.

```

A = (9 * dsa/rs)2/3;
B = (9 * φ12)2/3;
C = (doa)2/3;
D = (9 * (φ12) * W1)2/3;
E = (dba/rb)2/3;
F = (9 * φ12)2/3;
G = (9 * φ22)2/3;
V1 = 30.48;
q = 2.16 * 10-3;
θl = εl * v/q;
θr = R * R * τ/dsl;

```

Al tempo $t = 1$ inserisco nelle matrici i dati iniziali dati dal problema.

```

for l = 1 : length(x)
for i = 1 : length(y)
u(i, l, 1) = 1;
v(i, l, 1) = 0.05;
w(i, l, 1) = 0.088;
end
end

```

Per tutti gli altri tempi costruisco un ciclo che mi permette di disporre, di volta in volta, le soluzioni calcolate dalle funzioni. Il primo elemento di ogni matrice è determinato da quello al tempo prece-

dente.

for j = 1 : length(t) - 1

$$u(1, 1, j+1) = (1-2*A*\Delta T/(\Delta X^2))*u(1, 1, j)+A*\Delta T/(\Delta X^2)*(u(1, 2, j)+u(2, 1, j)) - B * \Delta T * w(1, 1, j) * u(1, 1, j) * v(1, 1, j)/((1 + \beta_s * u(1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(1, 1, j)));$$

$$v(1, 1, j+1) = (1-2*C*\Delta T/(\Delta X^2))*v(1, 1, j)+C*\Delta T/(\Delta X^2)*(v(1, 2, j)+v(2, 1, j)) - D * \Delta T * w(1, 1, j) * u(1, 1, j) * v(1, 1, j)/((1 + \beta_s * u(1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(1, 1, j)));$$

$$w(1, 1, j + 1) = (1 - 2 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(1, 1, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * (w(1, 2, j) - w(2, 1, j)) + F * \Delta T * w(1, 1, j) * u(1, 1, j) * v(1, 1, j) / ((1 + \beta_s * u(1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(1, 1, j))) - G * \Delta T * w(i, l, j);$$

L'ultimo elemento della griglia x , come quello della griglia y , é noto per le condizioni al bordo. Cosí come il primo della griglia delle y dipende dagli elementi precedenti.

for i = 1 : length(x) - 1

$$u(nx + 1, 1, j) = 0.0009;$$

$$v(nx + 1, 1, j) = 1;$$

$$w(nx + 1, 1, j) = 7.1153e - 004;$$

$$u(i + 1, 1, j + 1) = A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(i, 1, j) + (1 - 3 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(i + 1, 1, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * (u(i + 1, 2, j) + u(i + 2, 1, j)) - B * \Delta T * w(i + 1, 1, j) * u(i + 1, 1, j) * v(i + 1, 1, j) / ((1 + \beta_s * u(i + 1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(i + 1, 1, j)));$$

$$v(i + 1, 1, j + 1) = C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(i, 1, j) + (1 - 3 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(i + 1, 1, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * (v(i + 1, 2, j) + v(i + 2, 1, j)) - D * \Delta T * w(i + 1, 1, j) * u(i + 1, 1, j) * v(i + 1, 1, j) / ((1 + \beta_s * u(i + 1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(i + 1, 1, j)));$$

$$w(i + 1, 1, j + 1) = E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(i, 1, j) + (1 - 3 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(i + 1, 1, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * (w(i + 1, 2, j) + w(i + 2, 1, j)) + F * \Delta T * w(i + 1, 1, j) * u(i + 1, 1, j) * v(i + 1, 1, j) / ((1 + \beta_s * u(i + 1, 1, j)) * (1 + \beta_o * v(i + 1, 1, j))) - G * \Delta T * w(i, l, j);$$

for l = 2 : length(y) - 1

if(j == 2)

$$u(i, l, j + 1) = A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(i, l - 1, j) + (1 - 3 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(i, l, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * (u(i, l + 1, j) + u(i + 1, l, j)) - B * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j)));$$

$$v(i, l, j + 1) = C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(i, l - 1, j) + (1 - 3 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(i, l, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * (v(i, l + 1, j) + v(i + 1, l, j)) - D * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j)));$$

$$w(i, l, j + 1) = E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(i, l - 1, j) + (1 - 3 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(i, l, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * (w(i, l + 1, j) - w(i + 1, l, j)) + F * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j))) - G * \Delta T * w(i, l, j);$$

else

$$u(i, l, j + 1) = A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(i, l - 1, j) + (1 - 4 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(i, l, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * (u(i, l + 1, j) + u(i + 1, l, j)) - B * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j)));$$

$$v(i, l, j + 1) = C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(i, l - 1, j) + (1 - 4 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(i, l, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * (v(i, l + 1, j) + v(i + 1, l, j)) - D * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j)));$$

$$w(i, l, j + 1) = E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(i, l - 1, j) + (1 - 4 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(i, l, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * (w(i, l + 1, j) - w(i + 1, l, j)) + F * \Delta T * w(i, l, j) * u(i, l, j) * v(i, l, j) / ((1 + \beta_s * u(i, l, j)) * (1 + \beta_o * v(i, l, j))) - G * \Delta T * w(i, l, j);$$

end

$$u(\text{length}(x), l, j + 1) = A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(\text{length}(x) - 1, l, j) + (1 - 4 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(\text{length}(x), l, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * 0.0009 + A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(\text{length}(x), l + 1, j) - B * \Delta T * w(i, l, j) * u(nx, l, j) * v(nx, l, j) / ((1 + \beta_s * u(nx, l, j)) * (1 + \beta_o * v(nx, l, j)));$$

$$v(\text{length}(x), l, j + 1) = C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(\text{length}(x) - 1, l, j) + (1 - 4 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(\text{length}(x), l, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(\text{length}(x), l + 1, j) - D * \Delta T * w(nx, l, j) * u(nx, l, j) * v(nx, l, j) / ((1 + \beta_s * u(nx, l, j)) * (1 + \beta_o * v(nx, l, j)));$$

$$w(\text{length}(x), l, j + 1) = E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(\text{length}(x) - 1, l, j) + (1 - 4 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(\text{length}(x), l, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * 7.1153e - 004 + E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(\text{length}(x), l + 1, j) + F * \Delta T * w(nx, l, j) * u(nx, l, j) * v(nx, l, j) / ((1 + \beta_s * u(nx, l, j)) * (1 + \beta_o * v(nx, l, j))) - G * \Delta T * w(nx, l, j);$$

end

end

$$u(1, ny, j + 1) = A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(1, ny - 1, j) + (1 - 3 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(1, ny, j);$$

$$u(1, ny, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(2, ny, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * 0.0009 - B * \Delta T * w(1, ny, j) * u(1, ny, j) * v(1, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(1, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(1, ny, j)));$$

$$v(1, ny, j + 1) = C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(1, ny - 1, j) + (1 - 3 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(1, ny, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(2, ny, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) - D * \Delta T * w(1, ny, j) * u(1, ny, j) * v(1, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(1, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(1, ny, j)));$$

$$w(1, ny, j + 1) = E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(1, ny - 1, j) + (1 - 3 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(1, ny, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(2, ny, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * 7.1153e - 004 + F * \Delta T * w(1, ny, j) * u(1, ny, j) * v(1, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(1, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(1, ny, j))) - G * \Delta T * w(1, ny, j);$$

for i = 2 : nx - 1

$$u(i, ny, j + 1) = (1 - 4 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(i, ny, j) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * 0.0009 / (\Delta X^2) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * (u(i + 1, ny, j) + u(i - 1, ny, j)) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * u(i, ny - 1, j) - B * \Delta T * w(i, ny, j) * u(i, ny, j) * v(i, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(i, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(i, ny, j)));$$

$$v(i, ny, j + 1) = (1 - 4 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(i, ny, j) + C * \Delta T / (\Delta X^2) + 1 / (\Delta X^2) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * (v(i + 1, ny, j) + v(i - 1, ny, j)) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * v(i, ny - 1, j) - D * \Delta T * w(i, ny, j) * u(i, ny, j) * v(i, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(i, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(i, ny, j)));$$

$$w(i, ny, j + 1) = (1 - 4 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(i, ny, j) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * 7.1153e - 004 / (\Delta X^2) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * (w(i + 1, ny, j) + w(i - 1, ny, j)) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(i, ny - 1, j) + F * \Delta T * w(i, ny, j) * u(i, ny, j) * v(i, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(i, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(i, ny, j))) - G * \Delta T * w(i, ny, j);$$

end

$$u(nx, ny, j + 1) = (1 - 4 * A * \Delta T / (\Delta X^2)) * u(nx, ny, j) + 2 * A * \Delta T / (\Delta X^2) * 0.0009 / (\Delta X^2) + A * \Delta T / (\Delta X^2) * (u(nx - 1, ny, j) + u(nx, ny - 1, j)) - B * \Delta T * w(nx, ny, j) * u(nx, ny, j) * v(nx, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(nx, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(nx, ny, j)));$$

$$v(nx, ny, j + 1) = (1 - 4 * C * \Delta T / (\Delta X^2)) * v(nx, ny, j) + 2 * C * \Delta T / (\Delta X^2) + 1 / (\Delta X^2) + C * \Delta T / (\Delta X^2) * (v(nx - 1, ny, j) + v(nx, ny - 1, j)) - D * \Delta T * w(nx, ny, j) * u(nx, ny, j) * v(nx, ny, j) / ((1 + \beta_s * u(nx, ny, j)) * (1 + \beta_o * v(nx, ny, j)));$$

$$w(nx, ny, j + 1) = (1 - 4 * E * \Delta T / (\Delta X^2)) * w(nx, ny, j) + 2 * E * \Delta T / (\Delta X^2) * 7.1153e - 004 / (\Delta X^2) + E * \Delta T / (\Delta X^2) * w(nx, ny, j);$$

```

(w(nx - 1, ny, j) + w(nx, ny - 1, j)) + F * ΔT * w(nx, ny, j) * u(nx, ny, j) *
v(nx, ny, j) / ((1 + βs * u(nx, ny, j)) * (1 + βo * v(nx, ny, j))) - G * ΔT *
w(nx, ny, j);
end

```

Costruisco un ciclo che mi permette di passare dalla matrice tridimensionale ad un vettore con delle determinate soluzioni che vorrò poi graficare.

```

for j = 1 : nt
U(j) = u(3, 4, j);
end
for j = 1 : nt
V(m, j) = v(3, 4, j);
end
for j = 1 : nt
W(m, j) = w(3, 4, j);
end

```

Apri una finestra dove rappresento i tre grafici per le soluzioni trovate.

```

figure
subplot(1, 3, 1)
plot(t, U)
subplot(1, 3, 2)
plot(t, V)
subplot(1, 3, 3)
plot(t, W)

```

B.0.3 Programma bidimensionale implicito

```
 $\Delta T = 0.1;$   
 $\Delta X = 0.5;$   
 $t = 0 : \Delta T : 5; 10;$   
 $y = 0 : \Delta X : 5;$   
 $x = 0 : \Delta X : 5;$   
 $nt = \text{length}(t);$   
 $nx = \text{length}(x) + 1;$   
 $ny = \text{length}(y) + 1;$   
Inizializzo le matrici che conterranno le soluzioni.
```

```
 $U = \text{zeros}(nx^2, nt);$   
 $V = \text{zeros}(nx^2, nt);$   
 $W = \text{zeros}(nx^2, nt);$   
 $u = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$   
 $v = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$   
 $w = \text{zeros}(\text{length}(x), \text{length}(y), \text{length}(t));$ 
```

Fisso le costanti per definire i coefficienti dell'equazioni.

```
 $qs = 600;$   
 $kds = 1500;$   
 $R = 1;$   
 $csi = qs/kds;$   
 $cof = 8.e - 6;$   
 $db = 1.e - 6;$   
 $do = 2.e - 5;$   
 $dsl = 4.e - 6;$   
 $dss = 0.;$   
 $kd = 2.78e - 7;$   
 $ko = 1.e - 8;$   
 $ks = 1.e - 6;$   
 $kdb = 30.;$   
 $yo = 1.;$   
 $ys = 0.5;$   
 $\epsilon_a = 0.37;$   
 $\epsilon_l = 0.37;$   
 $\epsilon_m = 3 * (1 - \epsilon_l) * \epsilon_a / \epsilon_l;$   
 $min = 2.78e - 5;$   
 $\rho = 1.72;$ 
```

$\tau = 1.4;$
 $\beta_o = cof/ko;$
 $\beta_s = 0.40;$
 $rb = 1. + (\rho * kdb)/\epsilon_a;$
 $rs = 6974;$
 $W1 = 174;$
 $dsa = ((dsl/\tau) + dss * (rs - 1)) * (\tau/dsl);$
 $doa = do/dsl;$
 $dba = db/dsl;$
 $\phi_1 = 18.6;$
 $\phi_2 = (R/3.) * \sqrt{\frac{kd*\tau}{dsl}};$
 Definisco i coefficienti delle equazioni.

$A = (dsa/rs)^{2/3};$
 $B = (9 * \phi_1^2)^{2/3};$
 $C = (doa)^{2/3};$
 $D = (9 * (\phi_1^2) * W1)^{2/3};$
 $E = (dba/rb)^{2/3};$
 $F = (9 * \phi_1^2)^{2/3};$
 $G = (9 * \phi_2^2)^{2/3};$
 $cba = 10^{-7} * rb/(rs * ys * betas * ks);$
 $V1 = 30.48;$
 $q = 2.16 * 10^{-3};$
 $\theta_l = \epsilon_l * v/q;$
 $\theta_r = R * R * \tau/dsl;$
 – Coefficienti della matrice B –
 $\mu1 = A * \Delta T/(\Delta X^2);$
 $\mu2 = C * \Delta T/(\Delta X^2);$
 $\mu3 = E * \Delta T/(\Delta X^2);$

$M1 = mat - cd2d - fd(nx, \mu1);$
 $M2 = mat - cd2d - fd(nx, \mu2);$
 $M3 = mat - cd2d - fd(nx, \mu3);$

Determino i parametri che utilizzerò per calcolare le soluzioni.

$\alpha = A * \Delta T/(\Delta X^2);$
 $\beta = C * \Delta T/(\Delta X^2);$
 $\gamma = E * \Delta T/(\Delta X^2);$

for n1 = 1 : nx²

```

U(n1, 1) = 1;
V(n1, 1) = (0.05)^(2/3);
W(n1, 1) = 10l - 7 * 2/3;
end
for j = 1 : nt
for i = 1 : nx2
ZZ1(i) = U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) *
(1 + βo * V(i, j)));
ZZ2(i) = V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) *
(1 + βo * V(i, j)));
ZZ3(i) = W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) *
(1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j);
end
for i = nx : nx : nx2 - nx
ZZ1(i) = α * 9 * 10l - 4 * 2/3 + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ2(i) = β + V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ3(i) = γ * 10l - 7 * 2/3 + W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j);
end
for i = (nx - 1) * nx + 1 : nx2 - 1
ZZ1(i) = α * 9 * 10l - 4 * 2/3 + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ2(i) = β + V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ3(i) = γ * 10l - 7 * 2/3 + W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j); 10l - 4);
end
for i = nx2
ZZ1(i) = 2 * α * 9 * 10l - 4 * 2/3 + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ2(i) = 2 * β + V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)));
ZZ3(i) = 2 * γ * 10l - 7 * 2/3 + W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) *
V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j); 10l - 4);

U(:, j + 1) = M1 ZZ1;
V(:, j + 1) = M2 ZZ2;
W(:, j + 1) = M3 ZZ3;
end

```

```

for j = 1 : nt
for l = 1 : nx
i = 1;
for k = 1 + (l - 1) * nx : l * nx
u(i, l, j) = U(k, j);
v(i, l, j) = V(k, j);
w(i, l, j) = W(k, j);
i = i + 1;
end
end
end
figure
surf (u(:, :, nt - 10))

```

Per costruirmi le matrici tridiagonali a blocchi ho usato il seguente programma

```
function a = mat - cd2d - fd(nx, alpha)
```

Calcola la matrice alle differenze finite di convezione-diffusione sul quadrato, con N nodi interni su ogni lato. nx è la diffusione β è il vettore velocità \tilde{A} .

```

 $\beta_x = \beta(1);$ 
 $\beta_y = \beta(2);$ 

```

L'ampiezza della griglia è data da

```

h = 1/(nx + 1);
b1 = - $\alpha$  * ones(nx - 1, 1);
b2 = - $\alpha$  * ones(nx - 1, 1);

```

Costruisco la diagonale principale di \mathcal{G}_1

```

dp1 = zeros(nx, 1);
dp1(1, 1) = 1 + 2 *  $\alpha$ ;
for i = 2 : nx
dp1(i, 1) = 1 + 3 *  $\alpha$ ;
end
g1 = diag(dp1) + diag(b2, -1) + diag(b1, 1);

```

Costruisco la diagonale principale di \mathcal{G}

```

dp = zeros(nx, 1);
dp(1, 1) = 1 + 3 * α;
for i = 2 : nx
dp(i, 1) = 1 + 4 * α;
end
g = diag(dp) + diag(b2, -1) + diag(b1, 1);

```

La matrice g contiene i blocchi sulla diagonale

```

a(1 : nx, 1 : nx) = g1;
for i = 2 : nx
inizio = (i - 1) * nx + 1;
fine = i * nx;
a(inizio : fine, inizio : fine) = g;
end

```

Infine costruisco le ultime due diagonali, che rendono la mia matrice 'pentagonale', (anche se, più precisamente, è tridiagonale a blocchi).

```

B1 = -α * ones(nx2 - nx, 1);
B2 = -α * ones(nx2 - nx, 1);
a = a + diag(B1, nx) + diag(B2, -nx);

```

Ho elaborato un programma anche in linguaggio Fortran 90.

```

program Bonifica-3D-8-9

```

Dichiarazione dei dati e definizione dei parametri.

```

integer i, j, l, n, m, nt, nx, ny, k
real*8 ΔT, ΔX, qs, kds, R, cof, db, d0, βs, rs, W1, phi1, dsl, dss, kd, ko, ks, kdb,
yo, ys, εa, εl, min, ρ, τ, csi, εm, βo, βs, rb, dsa, doa, dba, φ2, α, β, γ
parameter (nt = 651, nx = 12, ny = 12, ΔT = 1.0e0, ΔX = 5.0e0,
qs = 600.0e0, kds = 15.0e0, R = 1.0e0, cof = 8.e - 6, db = 1.e - 6,
d0 = 2.e - 5, βs = 40e0, rs = 71.0e0, W1 = 177.0e0, φ1 = 0e0, dsl = 4.e - 6,
dss = 0.0e0, kd = 2.78e - 7, ko = 1.e - 8, ks = 1.e - 6, kdb = 30.0e0,
yo = 1.0e0, ys = 0.5e0, εa = 0.37e0, εl = 0.37e0, min = 2.78e - 5,
ρ = 1.72e0, τ = 1.4e0)

```

Dichiaro, inoltre, i vettori e le matrici che utilizzerò nel programma.

$real * 8 t(nt + 1), x(nx), y(ny), uu(nx, ny, nt), vv(nx, ny, nt), ww(nx, ny, nt),$
 $M1(nx ** 2, nx ** 2), M2(nx ** 2, nx ** 2), M3(nx ** 2, nx ** 2),$
 $U(nx ** 2, nt + 1), V(nx ** 2, nt + 1), W(nx ** 2, nt + 1),$
 $ZZ1(nx ** 2, 1), ZZ2(nx ** 2, 1), ZZ3(nx ** 2, 1),$
 $invM1(nx * nx, nx * nx), invM2(nx * nx, nx * nx), invM3(nx * nx, nx * nx)$

Richiamo le subroutine esterne al programma.

external subM1, subM2, subM3, FINDInv

Apro i file dove inserirò i miei dati, cioè le soluzioni trovate dal sistema.

$open(1, file = " bon3D'_U, status = ' old')$
 $open(2, file = " bon3D'_V, status = ' old')$

Inserisco i parametri che poi mi serviranno per esprimere i coefficienti delle equazioni.

$csi = qs/kds$
 $\epsilon_m = 3.0e0 * (1 - \epsilon_l) * \epsilon_a / \epsilon_l$
 $\beta_o = cof/ko$
 $rb = 1.0e0 + (\rho * kdb) / \epsilon_a$
 $dsa = ((dsl/\tau) + dss * (rs - 1)) * (\tau/dsl)$
 $doa = d0/dsl$
 $dba = db/dsl$
 $\phi_2 = (R/3.0e0) * ((kd * \tau/dsl) ** (1.0e0/2.0e0))$

Definisco, ora, i coefficienti.

$A = (dsa/rs) ** (2.0e0/3.0e0)$
 $B = (9.0e0 * phi1 ** 2) ** (2.0e0/3.0e0)$
 $C = (doa) ** (2.0e0/3.0e0) !ok! 10^{(-4)} * doa; 10^{(-4)} * doa$
 $D = (9.0e0 * (phi1 ** 2) * W1) ** (2.0e0/3.0e0)$
 $E = (dba/rb) ** (2.0e0/3.0e0)$
 $F = (9.0e0 * phi1 ** 2) ** (2.0e0/3.0e0)$
 $G = (9.0e0 * phi2 ** 2) ** (2.0e0/3.0e0)$

Parametri che mi serviranno per costruire le matrici del sistema.

$\alpha = A * \Delta T / (\Delta X ** 2)$
 $\beta = C * \Delta T / (\Delta X ** 2)$

$$\gamma = E * \Delta T / (\Delta X ** 2)$$

Immetto nei vettori soluzione i dati iniziali, in $t = 1$.

```
do i = 1, nx ** 2
U(i, 1) = 1
V(i, 1) = (0.05) ** (2.0e0/3.0e0)
W(i, 1) = 0.088 ** (2.0e0/3.0e0)
end do
```

Inizializzo il ciclo per determinarmi i vettori ZZi , con $i = 1, 2, 3$, tramite i quali, moltiplicati per la matrice inversa del sistema, determino le soluzioni delle equazioni.

```
do j = 1, nt
do i = 1, nx ** 2
ZZ1(i, 1) = U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ2(i, 1) = V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ3(i, 1) = W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j)
end do
do i = nx, nx ** 2 - nx, nx
ZZ1(i, 1) = α * 9 * 10 ** (-4 * 2/3) + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ2(i, 1) = β + V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ3(i, 1) = γ * 4.5 * 10 ** (-4 * 2/3) + W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j)
end do
do i = (nx - 1) * nx + 1, nx ** 2 - 1, 1
ZZ1(i, 1) = α * 9 * 10 ** (-4 * 2/3) + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ2(i, 1) = β + V(i, j) - D * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
ZZ3(i, 1) = γ * 4.5 * 10 ** (-4 * 2/3) + W(i, j) + F * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j))) - G * ΔT * W(i, j)
enddo
ZZ1(nx ** 2, 1) = 2 * α * 9 * 10 ** (-4 * 2/3) + U(i, j) - B * ΔT * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + βs * U(i, j)) * (1 + βo * V(i, j)))
```

$$ZZ2(nx ** 2, 1) = 2 * \beta + V(i, j) - D * \Delta T * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + \beta_s * U(i, j)) * (1 + \beta_o * V(i, j)))$$

$$ZZ3(nx ** 2, 1) = 2 * \gamma * 4.5 * 10 ** (-4 * 2/3) + W(i, j) + F * \Delta T * W(i, j) * U(i, j) * V(i, j) / ((1 + \beta_s * U(i, j)) * (1 + \beta_o * V(i, j))) - G * \Delta T * W(i, j)$$

Richiamo le subroutine che ho usato per costruirmi le matrici dl sistema.

```
call subM1(nx, alpha, M1)
errorflag = 0
```

Richiamo la subroutine che ho utilizzato per trovare la matrice inversa del sistema.

```
call FINDInv(M1, invM1, nx * nx, errorflag)
```

Costruisco il vettore soluzione, al tempo successivo, attraverso la moltiplicazione della matrice inversa di M1 con il vettore ZZ1 al tempo attuale.

```
U(:, j + 1) = matmul(invM1, ZZ1(:, 1))
```

Faccio gli stessi passaggi per le soluzioni V e W.

```
call subM2(nx, beta, M2)
errorflag = 0
call FINDInv(M2, invM2, nx * nx, errorflag)
V(:, j + 1) = matmul(invM2, ZZ2(:, 1))
call subM2(nx, gamma, M3)
errorflag = 0
call FINDInv(M3, invM3, nx * nx, errorflag)
W(:, j + 1) = matmul(invM3, ZZ3(:, 1))
end do
```

Trascrivo nei file le soluzioni, in questo modo posso graficarle.

```
write(1, *)U
write(2, *)V
end program
```

Costruisco le matrici del sistema.

M1 è la matrice che descrive l'equazione della concentrazione del substrato.

subroutine subM1(nx, α , M1)

Dichiaro gli indici, le variabili, i vettori e le matrici che mi serviranno nel programma.

integer i, j, k, nx
*real * 8 $\alpha, \beta, \gamma, M1(nx ** 2, nx ** 2)$*

Costruisco la matrice nulla $M1$.

*do j = 1, nx ** 2*
*do i = 1, nx ** 2*
M1(i, j) = 0
end do
end do

Costruisco le diagonali g della prima matrice, che costituirà la matrice tridiagonale a blocchi $M1$.

do j = 1, nx
do i = 1, nx
if(i == j) then
*M1(i, j) = 1 + 3 * α*
else if(i == j + 1) then
M1(i, j) = - α
else if(i == j - 1) then
M1(i, j) = - α
end if
end do
end do
*M1(1, 1) = 1 + 2 * α*

Costruisco la matrice diagonale della seconda matrice, $g2$.

do k = 1, nx - 1
*do 80 j = (k * nx) + 1, (k + 1) * nx, 1*
*do 90 i = (k * nx) + 1, (k + 1) * nx, 1*
if(i == j) then
*M1(i, j) = 1 + 4 * α*
else if(i == j + 1) then
M1(i, j) = - α

```

else if(i == j - 1) then
M1(i, j) = -α
end if
90 continue
80 continue
M1(k * nx + 1, k * nx + 1) = 1 + 3 * α
enddo
return
end subroutine

```

Costruisco in maniera analoga le matrici $M2$ e $M3$.

```

subroutine subM2(nx, β, M2)
integer i, nx, k
real * 8 β, M2(nx ** 2, nx ** 2)
do j = 1, nx ** 2
do i = 1, nx ** 2
M2(i, j) = 0
end do
end do

do j = 1, nx
do i = 1, nx
if(i == j) then
M2(i, j) = 1 + 3 * β
endif
if(i - 1 == j) then
M2(i, j) = -β
end if
if(i == j - 1) then
M2(i, j) = -β
end if
end do
end do
M2(1, 1) = 1 + 2 * β

do k = 1, nx - 1
do j = k * nx + 1, (k + 1) * nx, 1
do i = k * nx + 1, (k + 1) * nx, 1
if(i == j) then
M2(i, j) = 1 + 4 * β

```

```

end if
if(i - 1 == j) then
M2(i, j) = -β
end if
if(i == j - 1) then
M2(i, j) = -β
end if
enddo
enddo
M2(k * nx + 1, k * nx + 1) = 1 + 3 * β
enddo
return
end subroutine

```

```

subroutine subM3(nx, γ, M3)
integer i, nx, k
real * 8 γ, M3(nx * *2, nx * *2)
do j = 1, nx * *2
do i = 1, nx * *2
M3(i, j) = 0
end do
end do

```

```

do j = 1, nx
do i = 1, nx
if(i == j) then
M3(i, j) = 1 + 3 * γ
endif
if(i - 1 == j) then
M3(i, j) = -γ
end if
if(i == j - 1) then
M3(i, j) = -γ
end if
end do
end do
M3(1, 1) = 1 + 2 * γ

```

```

do k = 1, nx - 1
do j = k * nx + 1, (k + 1) * nx, 1
do i = k * nx + 1, (k + 1) * nx, 1

```

```

if(i == j) then
M3(i, j) = 1 + 4 * γ
end if
if(i - 1 == j) then
M3(i, j) = -γ
end if
if(i == j - 1) then
M3(i, j) = -γ
end if
enddo
enddo
M3(k * nx + 1, k * nx + 1) = 1 + 3 * γ
enddo
return
end subroutine

```

Costruisco la matrice che serve per invertire le matrici del sistema.

```
subroutine FINDInv(matrix, inverse, n, errorflag)
```

Implicitamente non ho bisogno di dichiarare nulla.

```
implicitnone
```

Dichiaro gli indici, le variabili, le matrici e le variabili logiche che mi serviranno nella subroutine.

```

integer n, errorflag
real * 8 intent(in), dimension(n, n) :: matrix
real * 8 intent(out), dimension(n, n) :: invers !Matriceinversa
logical FLAG = .TRUE.
integer i, j, k, l
real * 8 m
real*8 dimension(n, 2*n) augmatrix !Matricedidimensioniaumentate(perpermetteredi farel'in

```

Aumento la matrice con una matrice identità.

```

DO i = 1, n
DO j = 1, 2.0e0 * n
IF(j <= n) THEN
augmatrix(i, j) = matrix(i, j)

```

```

ELSE IF((i + n) == j) THEN
augmatrix(i, j) = 1
ELSE
augmatrix(i, j) = 0
ENDIF
ENDDO
ENDDO

```

Riduco la matrice ad una forma tringolare superiore.

```

DO k = 1, n - 1
IF(augmatrix(k, k) == 0) THEN
FLAG = .FALSE.
DO i = k + 1, n
IF(augmatrix(i, k) /= 0) THEN
DO j = 1, 2 * n
augmatrix(k, j) = augmatrix(k, j) + augmatrix(i, j)
END DO
FLAG = .TRUE.
EXIT
ENDIF
IF(FLAG .EQV. .FALSE.) THEN
PRINT * "Matrice non invertibile"
inverse = 0
error flag = -1
return
ENDIF
END DO
ENDIF
DO j = k + 1, n
m = augmatrix(j, k) / augmatrix(k, k)
DO i = k, 2 * n
augmatrix(j, i) = augmatrix(j, i) - m * augmatrix(k, i)
END DO
END DO
END DO

```

Test di invertibilità della matrice.

```

DO i = 1, n
IF(augmatrix(i, i) == 0) THEN

```

```

PRINT * "Matrice non invertibile"
inverse = 0
errorflag = -1
return
ENDIF
END DO

```

Metto nella diagonale elementi 1.

```

DO i = 1, n
m = augmatrix(i, i)
DO j = i, (2.0e0 * n)
augmatrix(i, j) = (augmatrix(i, j)/m)
END DO
END DO

```

Riduco mezzo lato destro della matrice aumentata come matrice identità.

```

DO k = n - 1, 1, -1
DO i = 1, k
m = augmatrix(i, k + 1)
DO j = k, (2.0e0 * n)
augmatrix(i, j) = augmatrix(i, j) - augmatrix(k + 1, j) * m
END DO
END DO
END DO

```

```

DO i = 1, n
DO j = 1, n
inverse(i, j) = augmatrix(i, j + n)
END DO
END DO
errorflag = 0
END subroutine FINDinv

```

Bibliografia

- [1] Ascher, U.M., *Numerical Method for Evolutionary Differential Equations*. SIAM, 2008.
- [2] Bianucci, G., *L'analisi chimica delle acque naturali ed inquinate*. Hoepli, 1974.
- [3] Chiesa, G., *Inquinamento delle acque sotterranee*. Hoepli, 1994.
- [4] Dhawan, S., L.E. Erickson and L.T. Fan. 1993. *Model Development and Simulation of Bioremediation of Soil Beds with Aggregates*. GROUND WATER, vol. 31, No 2, pp 271-284.
- [5] Dhawan, S., L.E. Erickson and L.T. Fan. 1991. *Modeling, Analysis, and Simulation of Bioremediation of Soil Aggregates*. Environmental Progress, vol. 10, No 4, pp 251-260.
- [6] Friedman, A. and Littman, W., *Industrial Mathematics. A Course in Solving Real-World Problems*. SIAM, Philadelphia 1994.
- [7] HUGHAM, D.J., *Matlab guide*. Society for industrial and applied Mathematics, 2005.
- [8] LeVeque, R.J., *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations : steady-state and time-dependent problems*. Society for industrial and applied Mathematics, 2007.
- [9] Murray, J.D., *Mathematical biology*. Springer, 2000.
- [10] Pao, C.V., *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*. Plenum, 1992.
- [11] Press, W.H., *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge, 1999.
- [12] Quarteroni, A., *Modellistica numerica per problemi differenziali*. Springer, 2008.