Modellazione 3D di problemi diffusivi in mezzi anisotropi ed eterogenei

Aricò C.1, Tucciarelli T.1

¹ Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, Aerospaziale, dei Materiali (DICAM), Università di Palermo. Indirizzo – e-mail: costanza..arico@unipa.it, tullio.tucciarelli@unipa.it

SOMMARIO

La soluzione di problemi diffusivi anisotropi si presenta in molti ambiti ambientali, quali ad esempio trasporto di calore, problemi di flusso e di trasporto per acque sotterranee, simulazioni di giacimenti petroliferi. Questi problemi sono caratterizzati da un tensore diffusivo a rango pieno che diventa diagonale solo se il sistema di riferimento è allineato con la direzione principale di anisotropia.

Problemi stazionari diffusivi soddisfano il Maximum Principle (MP), secondo cui la soluzione non può avere un massimo o un minimo all'interno del dominio di calcolo, tranne in punti con presenza di termini sorgente. I solutori numerici mirano a soddisfare la versione discretizzata del MP (DMP), calcolando soluzioni numeriche prive di oscillazioni spurie. Una condizione sufficiente per il soddisfacimento del DMP è la proprietà detta M della matrice di rigidezza del sistema algebrico associato. Una M-matrice è una matrice irriducibile, con coefficienti diagonali positivi, coefficienti extra diagonali non positivi e con dominanza diagonale, stretta per almeno una riga. Solutori numerici che garantiscono il soddisfacimento del DMP sono stati proposti numerosi in letteratura, soprattutto per la soluzione di problemi diffusivi isotropi, ma molto meno per la soluzione di problemi diffusivi anisotropi ed eterogenei.

Il problema diffusivo anisotropo 3D viene risolto nel presente lavoro su un numero finito di nodi di calcolo, posizionati all'interno di un dominio o sulla superficie di contorno esterna del dominio stesso, ovvero su superfici di contorno fisse interne al dominio.

Inizialmente si assegnano soltanto le facce sui contorni interni/esterni del dominio e la posizione dei nodi in tutto il dominio. L'unico requisito relativo alla posizione dei nodi è che la distanza dal centro della circonferenza formata dai tre nodi di una faccia sulla generica superficie di contorno deve essere non inferiore al raggio della stessa circonferenza. Le proprietà fisiche del mezzo ed il conseguente tensore diffusivo vengono assegnate ai singoli nodi del dominio.

Si genera una mesh tetraedrica in generale non strutturata mediante la seguente procedura iterativa, che ha lo scopo di abbinare ad ogni triangolo interno al dominio di calcolo due tetraedri, uno per ogni faccia del triangolo. I triangoli delle superfici esterne saranno abbinati ad un solo tetraedro, con il quarto nodo posizionato nel semispazio definito dal piano del triangolo e dalla posizione del dominio di calcolo. Iniziando dalle facce dei contorni interni/esterni, si generano nuovi tetraedri che completino l'abbinamento dei triangoli esistenti con i propri tetraedri. Così facendo si generano nuovi triangoli interni, che sono abbinati solo al proprio tetraedro di origine e la procedura viene continuata fino a quando tutti i triangoli interni sono abbinati a due tetraedri e tutte le facce del contorno esterno sono collegate con un solo tetraedro.

La mesh viene generata in un dominio computazionale isotropo, ottenuto per trasformazione affine delle coordinate spaziali dei nodi nel dominio fisico anisotropo, seguendo la diagonalizzazione del tensore diffusivo anisotropo (Aricò e Tucciarelli, 2013). Il tensore diffusivo nella fase iniziale di input dei dati è assegnato ai nodi. Nella suddetta operazione di generazione della mesh, i coefficienti del tensore diffusivo di ogni elemento tetraedrico si ottengono mediando i valori dei coefficienti dei tre nodi della faccia a partire dalla quale si genera il dato tetraedro.

Dopo aver generato la mesh, si effettua un loop su tutti il lati dei tetraedri, in modo da verificare se la proprietà di Delaunay Generalizzata è soddisfatta per tutti i lati (Aricò e Tucciarelli, 2013). Se la suddetta condizione non è soddisfatta per un generico lato, questo viene rimosso, e con esso anche i tetraedri e le facce che lo condividono. In tal modo si formano delle cavità all'interno del dominio. La mesh viene rigenerata all'interno delle suddette cavità, partendo dalle facce che stanno sul contorno delle cavità stesse. Prima di effettuare quest'ultima operazione di creazione della mesh all'interno delle cavità, le componenti vettoriali dei tensori diffusivi degli elementi tetraedrici dentro le cavità, definite come nel caso 2D da Aricò e Tucciarelli (2013), vengono ricalcolate come media dei valori associati ai nodi che si trovano sulle facce delle cavità. Dopo la ricostruzione della mesh all'interno della cavità la verifica viene ripetuta per tutti i lati posti lungo la superficie della cavità e la procedura viene così reiterata sino a quando la proprietà di Delaunay è soddisfatta per tutti i lati.

Il volume di controllo di ogni nodo nello spazio computazionale è la regione di Voronoi delimitata dai piani ortogonali (nello spazio trasformato in modo affine) ad ogni lato che condivide il nodo stesso e passanti per i punti medi dei lati. Si dimostra che è così possibile ottenere una formulazione dei flussi diffusivi simile alla formulazione del metodo agli Elementi Finiti standard alla Galerkin ma che assicura però, al contrario di quest'ultima, la proprietà M per la matrice del sistema, e quindi la monotonicità della soluzione calcolata. I risultati ottenuti dalla procedura suddetta sono confrontati con soluzioni analitiche e con soluzioni numeriche di letteratura, in termine di ordine di convergenza e costi computazionali.

Riferimenti bibliografici

C. Aricò e T. Tucciarelli (2013), Monotonic solution of heterogeneous anisotropic diffusion problems, *Journal of Computational Physics*, 252, 219-249.