

UN'EFFICIENTE METODOLOGIA PER LA SOLUZIONE DEI PROBLEMI DI TRASPORTO ANISOTROPI ETEROGENEI

C. Aricò, M. Sinagra & T. Tucciarelli

Dipartimento di Ingegneria Civile, Ambientale, Aerospaziale, dei Materiali, Università di Palermo, Italia, e-mail: arico@idra.unipa.it, sinagra@idra.unipa.it, tucciar@idra.unipa.it

SOMMARIO

Si propone un metodo numerico per la soluzione di problemi di trasporto anisotropi eterogenei, convettivi, dispersivi/diffusivi e di reazione, con densità costante ma campo di moto variabile nel tempo. Il metodo, inquadrabile fra le procedure di predizione/correzione, risolve le componenti convettiva e di reazione nella fase di predizione, la componente dispersiva/diffusiva nella fase di correzione. Nel problema di predizione si applica un metodo ai Volumi Finiti di tipo MAST e la soluzione di ogni cella è calcolata analiticamente. Nel problema di correzione si applica una tecnica che porta ad una formulazione dei flussi simile a quella di Galerkin agli Elementi Finiti standard, ma tale da avere sempre una M-matrice di rigidità, in cui sono totalmente assenti oscillazioni spurie nella soluzione.

1 INTRODUZIONE

Si presenta una metodologia numerica per la soluzione di problemi di trasporto anisotropi eterogenei convettivi, dispersivi/diffusivi e di reazione. Esistono difficoltà numeriche nel risolvere questo tipo di problematiche, soprattutto quando l'anisotropia, la tendenza di un fenomeno ad allinearsi progressivamente secondo una direzione preferenziale, diventa accentuata. Il tensore di diffusione è caratterizzato da una direzione principale uguale a quella del campo di moto e variazioni spazio/temporali del campo di moto provocano variazioni nella direzione dell'anisotropia. Altre problematiche numeriche sono legate alla simulazione di fronti ripidi e, per il trasporto reattivo, a problemi di scala temporale. Molti solutori numerici proposti per la soluzione dei suddetti problemi di trasporto, soprattutto alle Differenze (FD) e agli Elementi Finiti (FE), calcolano oscillazioni spurie nel riprodurre fronti ripidi (Dawson, 1991), e per forte anisotropia mostrano effetti di *mesh locking* (l'errore del modello non decresce al livello stimato raffinando la mesh) (Mazzia et al. 2011). Dawson (1991) ha studiato la combinazione di tecniche numeriche ai Volumi Finiti (FV) alla Godunov, con alto ordine di approssimazione spaziale, per la soluzione di problemi convettivi, nonché con metodi agli Elementi Finiti Misti Ibridi (MHFE), per i problemi dispersivi/diffusivi. La combinazione di queste due metodologie è naturale, dal momento che entrambe usano spazi discontinui per l'approssimazione della formulazione debole del problema di governo alle derivate parziali. Mazzia et al. (2011) hanno evidenziato per problemi anisotropi un comportamento di siffatte tecniche peggiore di metodi nati dalla combinazione di tecniche FV per la soluzione del problema convettivo e di metodi

standard alla Galerkin FE per la soluzione del problema dispersivo/diffusivo.

Nel modello proposto, si calcola ad ogni passo temporale il campo di moto. Una volta noto questo, si risolve il problema di trasporto con una procedura di predizione/correzione, risolvendo consecutivamente un problema di predizione ed uno di correzione. Le componenti di trasporto convettivo e di reazione sono risolte nel problema di predizione, applicando un metodo FV di tipo MAST la cui soluzione è calcolata analiticamente in ogni cella. Il problema di correzione risolve la componente dispersiva/diffusiva. Si applica una tecnica che porta ad una formulazione dei flussi simile a quella di Galerkin FE, ma tale da avere sempre una M -matrice di rigidità (coefficienti diagonali positivi, extra diagonali negativi e dominanza diagonale stretta per almeno una riga), per evitare oscillazioni spurie nella soluzione (Aricò & Tucciarelli, 2012,a,b e bibliografia citata).

2 IPOTESI FISICHE ED EQUAZIONI DI GOVERNO

Il mezzo si assume saturo di una singola fase liquida, composta da una sola specie chimica miscibile con concentrazione C . Le equazioni di governo alle derivate parziali (PDEs) sono l'equazione di continuità della fase liquida e l'equazione di trasporto della fase contaminante. Ω è un dominio 2D, Γ il suo contorno e $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ il vettore delle coordinate spaziali. $H_1(\Omega)$ è lo spazio di Sobolev delle funzioni a quadrato integrabile con derivate prime a quadrato integrabile su Ω . Le PDEs di governo si scrivono:

$$s_0 \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f_H \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad \text{con } \mathbf{q} = -K \nabla H \quad (1),$$

$$R\epsilon \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q}C) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) = f_C \quad (2),$$

dove t è il tempo, T la durata totale del processo, $H \in H_1(\Omega)$ il carico piezometrico (potenziale), s_0 un coefficiente di immagazzinamento, \mathbf{q} la velocità di Darcy, K il coefficiente di permeabilità (ipotesi di problema di flusso isotropo), $C \in H_1(\Omega)$ la concentrazione del soluto, ϵ la porosità del mezzo, R il *latency retardation factor* ($R\epsilon$ costante nel tempo), λ il coefficiente di decadimento chimico ($\lambda = \log 2/T_1$, T_1 tempo medio di vita dell'elemento), $f_H = f_H(\mathbf{x}, t) \in L_2(\Omega)$ e $f_C = f_C(\mathbf{x}, t) \in L_2(\Omega)$ termini sorgenti e \mathbf{D} il tensore (2×2) di dispersione/diffusione idrodinamica:

$$\mathbf{D} = (\epsilon D_d + \alpha_T |\mathbf{q}|) \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{q} \otimes \mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \quad (3),$$

con D_d coefficiente di diffusione molecolare del fluido, α_L e α_T coefficienti di dispersione longitudinale e trasversale del soluto. Le incognite del problema sono H e C . Le condizioni iniziali e al contorno per le Eqq. (1)-(2) sono:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{x}, 0) = H_0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega \text{ at } t=0, \quad H = H_D(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{HD}, \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = g_N(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{HN} \\ C(\mathbf{x}, 0) = C_0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega \text{ at } t=0, \quad C = C_D(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{CD}, \quad C\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = g_{CN}(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{CN} \end{aligned} \quad (4),$$

dove $\Gamma_{H(C)D}$ e $\Gamma_{H(C)N}$ sono porzioni di Γ dove sono imposte le condizioni di Dirichlet e Neumann rispettivamente per $H(C)$, l'indice "0" indica lo stato iniziale per H e C , H_D e C_D sono i valori di Dirichlet per H e C su Γ_{HD} e Γ_{CD} rispettivamente, g_N è il flusso di

Neumann assegnato su Γ_{HN} (\mathbf{n} vettore unitario ortogonale uscente dal contorno) e g_{CN} è il flusso massico di inquinante di Neumann assegnato su Γ_{CN} .

Ω_h è un'approssimazione poligonale di Ω , T_h una triangolazione non strutturata di Ω_h (mesh di base) N_T è il numero di triangoli T di T_h . L'area di T è $|T|$. P_i , $i = 1, \dots, N$ è l'insieme dei vertici (nodi) di tutti i triangoli $T \in T_h$, N il numero dei nodi. Una mesh duale è costruita sulla mesh di base e il volume di controllo duale associato al nodo P_i è il poligono chiuso dato dall'unione dei punti medi di ogni lato dei triangoli con il circocentro anisotropo di ogni triangolo T che condivide P_i , come in seguito specificato. Nella fase di predizione del problema di trasporto la cella di calcolo è il triangolo stesso della mesh, mentre nella fase di correzione è il volume duale.

3 CALCOLO DEL CAMPO DI MOTO E PROPRIETÀ DI DELAUNAY GENERALIZZATA PER LA MESH

Il campo di moto è calcolato con un metodo MHFE *Lumped* nei circocentri dei triangoli (Younes et al., 2006). i , ip e im sono i nodi del triangolo T_m (verso antiorario) e il vettore lato $\mathbf{r}_{i,ip}$ ($\mathbf{r}_{i,im}$) collega i e ip (im), orientato da i a ip (im). Imponendo la continuità dei flussi tra due triangoli contigui T_m e T_e che condividono il lato $\mathbf{r}_{i,im}$, si dimostra (Younes et al., 2006) che l'equazione di conservazione di massa per T_m è:

$$|T_m| \widehat{s}_{0m} \frac{\partial H^m}{\partial t} + \sum_j \chi_{j,ip}^{m,e} (H^m - H^e) = |T_m| \widehat{f}_H^m, \quad j=im,i,ip \Rightarrow jp=i,ip,im \quad (5),$$

il simbolo $(\widehat{\cdot})$ indica il valore medio su T_m , H^m è il valore di H nel circocentro di T_m , l'indice e riguarda le grandezze del triangolo T_e e il coefficiente $\chi_{j,ip}^{m,e}$ è dato da:

$$\chi_{j,ip}^{m,e} = \frac{\chi_{j,ip}^m \chi_{jp,j}^e}{\chi_{j,ip}^m + \chi_{jp,j}^e} = \frac{|\mathbf{r}_{j,ip}|}{\left(c_{j,ip}^T / \widehat{K}_m + c_{jp,j}^T / \widehat{K}_e \right)} \quad (6),$$

con $c_{jp,j}^T$ ($q = m, e$) distanza tra il circocentro c_q di T_q e il punto medio di $\mathbf{r}_{jp,j}$. Discretizzando nel tempo, le Eqq. (5)-(6) formano un sistema lineare di ordine N_T .

Una triangolazione di Delaunay in \mathbb{R}^2 è definita dalla condizione che tutti i nodi non ricadano dentro il cerchio passante per i tre nodi di ogni triangolo (Putti & Cordes, 1988). Si dimostra (Putti & Cordes, 1988) che in una triangolazione di Delaunay vale:

$$c_{j,ip}^T + c_{jp,j}^T \geq 0 \quad (7),$$

per ogni lato interno che connette i nodi i e im . Se la condizione di Delaunay non è soddisfatta, è sempre possibile ottenere una nuova mesh che soddisfa l'Eq. (7) per tutti i lati interni, partendo dalla triangolazione di partenza e senza cambiare la posizione originaria dei nodi, mediante rotazioni dei lati (*edge swap*) (Forsyth, 1991). In base alla formulazione del coefficiente $\chi_{j,ip}^{m,e}$, è tuttavia importante osservare che la condizione di uguaglianza nell'Eq. (7) porta a matrici di rigidità singolari. Se T_m è un elemento di contorno con $\mathbf{r}_{j,ip}$ lato di contorno opposto ad un angolo ottuso, il coefficiente $\chi_{j,ip}^m$, che

è proporzionale a $c_{j,jp}^T$, risulta negativo, anche se la mesh è di Delaunay, il relativo termine extra diagonale risulta positivo e la matrice di rigidezza perde la proprietà M . Definiamo una mesh che soddisfa la proprietà di Delaunay Generalizzata (GD) una mesh di Delaunay per cui si ha la seguente condizione:

$$c_{j,jp}^T \geq 0 \quad (8),$$

per tutti i lati sul contorno. In base alla definizione del coefficiente $\xi_{j,jp}^{m,e}$ nell'Eq. (6), se la mesh soddisfa la proprietà GD, il sistema finale ha una matrice M se il mezzo è omogeneo e se le condizioni nelle Eqq. (7)-(8) valgono con il maggiore stretto. In mezzi eterogenei, il criterio che consente di ottenere una matrice di rigidezza con proprietà M dipende non soltanto dalle caratteristiche geometriche della triangolazione, ma anche dalla distribuzione della permeabilità K nel dominio. Data una mesh GD, si propone la seguente formulazione per il coefficiente $\chi_{j,jp}^{m,e}$ in modo da preservare la proprietà M della matrice di rigidezza:

$$\chi_{j,jp}^{m,e} = \frac{|\mathbf{r}_{j,jp}|}{\left(c_e/\widehat{K}_e + c_m/\widehat{K}_m\right)}, \quad \begin{array}{l} c_m = c_{j,jp}^T \quad c_e = c_{jp,j}^T \quad \text{se } c_{j,jp}^T > 0 \text{ e } c_{jp,j}^T > 0 \\ c_m = c_{j,jp}^T + c_{jp,j}^T \quad c_e = 0 \quad \text{se } c_{j,jp}^T > 0, c_{jp,j}^T \leq 0 \text{ e } \left|c_{jp,j}^T\right| < c_{j,jp}^T \\ c_m = 0 \quad c_e = c_{j,jp}^T + c_{jp,j}^T \quad \text{se } c_{jp,j}^T > 0, c_{j,jp}^T \leq 0 \text{ e } \left|c_{j,jp}^T\right| < c_{jp,j}^T \end{array} \quad (9),$$

In base alla formulazione nell'Eq. (9), la matrice di rigidezza è sempre una matrice M , simmetrica e definita positiva.

4 SOLUZIONE DEL PROBLEMA DI TRASPORTO

Se $L_c(C)$ e $L_d(C)$ sono due operatori differenziali relativi rispettivamente al termine convettivo-reattivo e al termine diffusivo, il problema di trasporto in Eq. (2) si scrive:

$$R\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + L_c(C) + L_d(C) = f_C \quad (10).$$

I problemi di predizione e correzione diventano rispettivamente:

$$R\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + L_c(C) = f_C \quad \text{e} \quad R\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + L_d(C) = 0 \quad (11).$$

4.1 Il problema di predizione

Il problema di predizione:

$$R\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + L_c(C) = f_C \quad \text{con} \quad L_c(C) = \nabla \cdot (\mathbf{q}C) + R\varepsilon \lambda C \quad (12),$$

viene risolto applicando lo schema numerico MAST, precedentemente proposto per il solo problema convettivo (Bascià & Tucciarelli, 2004, Aricò & Tucciarelli, 2007). Una volta noto il campo di moto, all'inizio di ogni passo temporale le celle di calcolo vengono ordinate in base al valore decrescente del potenziale nel circocentro e risolte in sequenza, da quelle a potenziale maggiore a quelle a potenziale minore. Si assume una

variazione lineare a tratti di C in ogni triangolo T_m , in base ai tre valori nodali, e un'approssimazione nel tempo lineare delle C ai nodi dello stesso triangolo, dall'inizio alla fine di ogni passo temporale. L'idea di base dell'algoritmo è quella di eguagliare al tempo $t + dt$ i momenti spaziali di ordine 0 ed 1 della variazione lineare di C all'interno di T_m ai rispettivi momenti della soluzione analitica ottenuta allo stesso livello temporale partendo dalla distribuzione lineare iniziale al tempo t . Si dimostra (Bascià & Tucciarelli, 2004, Aricò & Tucciarelli, 2007, Aricò et al., 2012) che si ottiene un sistema di tre equazioni differenziali ordinarie per ogni cella di calcolo, di cui si calcola la soluzione analitica che fornisce le C ai tre nodi del triangolo.

4.2 Il problema di correzione

Alla fine di ogni passo temporale, si trovano per ogni nodo tanti valori di C quanti sono i triangoli che condividono il nodo. Nel problema di correzione si assume viceversa una variazione lineare di C in ogni triangolo in base ai tre valori nodali. Pertanto, prima di procedere con la soluzione del problema di correzione, è necessaria una preventiva operazione di media dei valori C per ogni nodo i . Tale operazione non pregiudica il bilancio di massa globale nel dominio.

Si assuma un mezzo omogeneo. c_T è il circocentro anisotropo del triangolo T (\mathbf{x}_c^T vettore delle coordinate). $P_{i,ip}$ e $P_{i,im}$ sono i punti medi di $\mathbf{r}_{i,ip}$ e $\mathbf{r}_{i,im}$ ($\mathbf{x}_{i,ip}$ e $\mathbf{x}_{i,im}$ i rispettivi vettori delle coordinate). c_T si calcola in modo da eguagliare a zero il flusso attraverso i segmenti $|P_{i,ip}c_T|$ e $|P_{i,im}c_T|$ dovuti alle componenti del gradiente di C ortogonali a $\mathbf{r}_{i,ip}$ e $\mathbf{r}_{i,im}$. Questo equivale a porre i flussi nel triangolo T pari a:

$$Fn_{i,ip}^T = -\mathbf{D}\mathbf{n}_{i,ip} \wedge (\mathbf{x}_c^T - \mathbf{x}_{i,ip}) = 0 \quad \text{e} \quad Fn_{i,im}^T = -\mathbf{D}\mathbf{n}_{i,im} \wedge (\mathbf{x}_c^T - \mathbf{x}_{i,im}) = 0 \quad (13),$$

con $\mathbf{n}_{i,ip}$ e $\mathbf{n}_{i,im}$ vettori unitari entranti ortogonali ai lati $\mathbf{r}_{i,ip}$ e $\mathbf{r}_{i,im}$ rispettivamente.

In base a come è stato calcolato c_T , i flussi attraverso $|P_{i,ip}c_T|$ e $|P_{i,im}c_T|$ sono interamente generati dalla componente del gradiente di C parallela a $\mathbf{r}_{i,ip}$ e $\mathbf{r}_{i,im}$. Si perviene ad una struttura computazionale del flusso attraverso il segmento che collega il circocentro anisotropo del triangolo con il punto medio del lato simile a quella del metodo standard lineare (P1) alla Galerkin FE (Putti & Cordes, 1998). Si propone di calcolare i flussi attraverso $|P_{i,ip}c_T|$ e $|P_{i,im}c_T|$ dovuti ad una differenza unitaria tra i valori di C nei nodi i e ip e i e im (flussi specifici) come (Aricò & Tucciarelli, 2012,a,b):

$$Fd_{i,ip}^T = \mathbf{D}(\mathbf{x}_{ip} - \mathbf{x}_i) \wedge (\mathbf{x}_c^T - \mathbf{x}_{i,ip}) \frac{1}{|\mathbf{r}_{i,ip}|^2} \quad \text{e} \quad Fd_{i,im}^T = \mathbf{D}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{im}) \wedge (\mathbf{x}_c^T - \mathbf{x}_{i,im}) \frac{1}{|\mathbf{r}_{i,im}|^2} \quad (14).$$

dove la norma Euclidea di $\mathbf{r}_{i,ip}$ ($\mathbf{r}_{i,im}$) rappresenta anche la distanza tra i nodi i e ip (im).

La capacità di invaso si assume concentrata nei nodi, nella misura 1/3 dell'area di tutti i triangoli che condividono il nodo. Dopo integrazione spaziale e temporale (nel tempo si effettua una integrazione pienamente implicita), si perviene alla soluzione di un sistema lineare di dimensione pari al numero di nodi:

$$\sum_{T=1, N_T} \frac{|T_i| \delta_i^T}{3} R_i \varepsilon_i \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} + \sum_{T=1, N_T} \left(Fd_{i,ip}^T (C_i^{k+1} - C_{ip}^{k+1}) + Fd_{i,im}^T (C_i^{k+1} - C_{im}^{k+1}) \right) \delta_i^T = 0, i=1, \dots, N(15),$$

con ε_i e R_i i valori nodali di ε e R , $\delta_i^T = 1$ o 0 se $i \in T$ o no, k e $k + 1$ indicano l'inizio e la fine del passo temporale, $Fd_{i,ip}^T$ e $Fd_{i,im}^T$ si calcolano con l'Eq. (14). Si dimostra (Aricò & Tucciarelli, 2012,a,b) che, adottando una mesh GD, si ottiene una M -matrice di rigidità, se le distanze dei circocentri anisotropi dai punti medi dei lati è calcolata come c_e e c_m nell'Eq. (9). In un mezzo anisotropo eterogeneo, nel tensore \mathbf{D} si distinguono una componente scalare d_0 (funzione dei coefficienti diagonali) ed una tensoriale direzionale \mathbf{D}' (funzione dei coefficienti extra-diagonali). d_0 è assegnata ad ogni nodo e nel calcolo del flusso se ne assume costante il valore medio nel triangolo. \mathbf{D}' si assegna ad ogni triangolo della mesh di partenza che soddisfa la proprietà GD. Se è necessario effettuare un'operazione di *edge swap*, i valori medi di \mathbf{D}' nei due nuovi triangoli che si ottengono per rotazione del generico lato, si assumono pari alla media dei corrispondenti valori della componente direzionale calcolata per i due triangoli originari (prima dell'*edge swap*) (Aricò & Tucciarelli, 2012,a,b).

5 TEST NUMERICI

5.1 Test 1. Campo di moto assegnato e stazionario e mezzo omogeneo

Il dominio è unitario $[0, 1]^2$ con condizioni di Dirichlet: $C_D(\mathbf{x}, t) = 1$ su Γ_{CD1} e $C_D(\mathbf{x}, t) = 0$ su Γ_{CD2} , dove $\Gamma_{CD1} = [(x_1, x_2) \text{ con } (x_1 = 0 \text{ e } 0 \leq x_2 \leq 1) \cup (0.3 \leq x_1 \leq 1 \text{ e } x_2 = 0)]$, $\Gamma_{CD2} = \Gamma - \Gamma_{CD1}$. $C_0 = 0$. Il campo di moto è assegnato e stazionario: $\mathbf{q} = (1, 3)^T$. I coefficienti $D_d = 0$, $\alpha_L = 0.1$ m, $\alpha_T = 1.d-02$ e $1.d-04$ m, $Re = 1$, $\lambda = 0$. Il passo temporale è 0.005 s. Il test è stato proposto da *Mazzia et al.* (2011). Una mesh GD non strutturata con 17408 triangoli e 8881 nodi è stata usata per le simulazioni del modello proposto. Le figure 1,a-1,d riportano i profili delle linee a pari concentrazione (iso- C) a $T = 0.1$ e 0.5 s, per entrambi i casi di anisotropia del tensore \mathbf{D} . I risultati calcolati sono in buon accordo con quelli calcolati da *Mazzia et al.* (2011), che propongono uno schema Godunov FV/Galerkin $P1$ FE. La riduzione di α_T provoca la riduzione della velocità di avanzamento nella parte centrale del fronte (specialmente a $T = 0.1$ s): questo genera un profilo a forma di S delle iso- C e fronti più ripidi in direzione x_1 . Per $\alpha_T = 1.d-04$, il presente modello calcola profili di C più ripidi di quelli di *Mazzia et al.* (2011).

5.2 Test 2. Il test Andra Couplex 1 (Bourgeat et al., 2004)

Il test riguarda il trasporto di iodio I 129 e presenta alcune difficoltà: dominio con rapporto larghezza/altezza circa 30, 4 strati geologici con parametri fisici ($K, D_d, \alpha_L, \alpha_T$) molto diversi, il rilascio di iodio in una zona (*repository*, \mathfrak{R}) concentrata nello spazio e durata di rilascio breve rispetto ai tempi del trasporto convettivo e dispersivo/diffusivo. La figura 2,a mostra la geometria del dominio. \mathfrak{R} è un sorgente nello strato di argilla, $\mathfrak{R} = (18440, 21680) \times (244, 250)$. La figura 2,b mostra il rilascio temporale di iodio. La tabella 1 riporta i parametri fisici degli strati geologici, la tabella 2 le condizioni al contorno per H e C . $C_0 = 0$ e il problema di flusso è stazionario. Il dominio si discretizza con una mesh GD (31234 triangoli e 16133 nodi). Il passo temporale è 200 anni. La figura 3,a mostra le linee iso- H (in rosso i contorni delle zone geologiche ed di \mathfrak{R}). In prossimità di \mathfrak{R} avviene un cambio della direzione del vettore velocità. In figura 3,b si mostra un particolare del campo di moto in prossimità di \mathfrak{R} (\mathfrak{R} linee rosse).

Nella porzione di dominio attorno ad \mathfrak{R} a destra dell'iso- H verticale, il vettore velocità è diretto verso il basso e le componenti di trasporto convettivo e diffusivo agiscono nella stessa direzione, nella parte superiore hanno invece direzione opposta. Il risultato di tale sovrapposizione o meno di effetti è mostrato in figura 4,a, che riporta un particolare delle iso- C vicino a \mathfrak{R} a $T = 10110$ anni. In figura si mostrano anche le iso- H (in blu). Un fronte ripido di concentrazione nella parte inferiore di \mathfrak{R} si muove verso il basso, mentre nella parte superiore la diffusione allontana le iso- C e un profilo di C smussato si muove verso l'alto. Nella regione attorno ad \mathfrak{R} posta a sinistra dell'iso- H verticale accade esattamente l'opposto: un fronte ripido si muove verso l'alto nella parte alta di \mathfrak{R} e nella parte bassa un profilo molto più smussato si diffonde verso il basso. Si osservi che sia a destra sia a sinistra dell'iso- H verticale, l'andamento delle iso- C risente della direzione del campo di moto. All'inizio del rilascio dello iodio, una piccola quantità di inquinante si muove nella direzione verticale in prossimità dell'iso- H verticale. Questo è probabilmente dovuto all'opposto movimento di massa di inquinante nelle parti a destra e a sinistra dell'iso- H verticale. Questo inquinante è successivamente trasportato per convezione/diffusione e si spiegherebbero così, nelle zone con andamento smussato rispetto alle zone con fronte ripido di C , le maggiori distanze dal contorno di \mathfrak{R} delle iso- C con i valori più bassi. In figure 4,b-4,e si riportano le iso- C per $T = 10110, 50110, 2 \cdot 10^5, 10^6$ e 10^7 anni. All'aumentare della durata, i profili di C , a destra e a sinistra dell'iso- H verticale, tendono ad uniformarsi attorno ad \mathfrak{R} . *Bernard-Michel et al.* (2004) hanno implementato per lo stesso test uno schema FV, uno FE ed uno MHFE. Per motivi di spazio, non è possibile mostrare qui i risultati, anche se facilmente reperibili nel citato articolo. La quantità di iodio presente nel dominio, calcolata con i modelli di *Bernard-Michel et al.* (2004), è visibilmente inferiore a quella calcolata dal metodo proposto. Ad ogni iterazione è stato calcolato, per il presente modello, il *mass balance ratio* (MBR), il rapporto tra la differenza tra la massa misurata al generico tempo t e la massa inizialmente presente nel dominio e il flusso di inquinante immesso nel dominio, integrato fino al tempo t . In un modello "ideale", MBR è pari a 1. Nel presente modello la differenza fra MBR e l'unità è dell'ordine dell'errore di macchina (10^{-15}). Le iso- C calcolate da *Bernard-Michel et al.* (2004) a 10110 e 50110 anni sono molto uniformi attorno a \mathfrak{R} e non sembrano dipendere dalla variazione del campo di moto prima discussa.

6 CONCLUSIONI

E' stato presentato un modello numerico per la soluzione del problema di trasporto in mezzi eterogenei anisotropi, in cui il campo di moto è variabile nello spazio e nel tempo, sebbene assunto indipendente dal problema di trasporto. Una soluzione innovativa del campo di moto, mediante un modello MHFE opportunamente modificato, è stata accoppiata alla soluzione MAST, per la soluzione del problema di trasporto convettivo e reattivo e ad una soluzione del problema di diffusione e dispersione meglio descritta in una memoria parallela (*Aricò & Tucciarelli*, 2012,b). Nei test presentati, il modello non calcola oscillazioni spurie ed i risultati sono fisicamente accettabili pur non essendo disponibili soluzioni analitiche di confronto. Lo scarto tra il MBR di un modello ideale e di quello calcolato dal modello proposto non supera in valore assoluto $1 \cdot 10^{-15}$, dimostrando una perfetta conservazione della massa.

BIBLIOGRAFIA

- Aricò, C. & Tucciarelli, T., MAST solution of advection problems in irrotational flow fields, *Adv. Wat. Resour.*, 2007, 30, 665-685.
- Aricò, C. & Tucciarelli, T., Efficient solution of heterogeneous anisotropic diffusion problems, *J. Comput. Phys.*, 2012, a submitted.
- Aricò, C. & Tucciarelli, T., Un'efficiente metodologia per la soluzione di problemi diffusivi anisotropi eterogenei, sottoposto al XXXIII Convegno nazionale di Idraulica e Costruzioni Idrauliche, 2012, b Brescia.
- Aricò, C., Sinagra M. & Tucciarelli, T., Efficient solution of heterogeneous anisotropic transport problems, *Adv. Wat. Res.*, 2012 submitted.
- Bascià, A. & Tucciarelli, T. An explicit unconditionally stable numerical solution of the advection problem in irrotational flow fields, *Wat. Resour. Res.*, 2004, 40(6) W06501.
- Bernard-Michel, G., Le Potier C., Beccantini A. Gounand S. & Chraïbi M., The Andra Couplex 1 test case: Comparison between finite-element, mixed hybrid finite element and finite volume element discretizations, *Comput. Geosc.*, 2004, 8, 187-201.
- Bourgeat, A., Kern, M., Schumacher, S. & Talandier, J. The COPLEX test cases: Nuclear waste disposal simulation. *Comput. Geosc.*, 2004, 8, 83-98.
- Dawson, C. N., Godunov-mixed methods for advective flow problems in one space dimension, *SIAM J. Num. Anal.* 1991, 28(5), 1282-1309.
- Forsyth, P.A. A control volume finite element approach to NAPL groundwater contamination, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 1991, 12, 1029-1057.
- Mazzia, A., Manzini, G. & Putti, M. Bad behaviour of Godunov Mixed Methods for strongly anisotropic advection-dispersion equations, *J. Comput. Phys.*, 2011, 230(23), 8410-8426.
- Putti, M. & Cordes, C. Finite element approximation of the diffusion operator on tetrahedral, *SIAM J. Sci. Comput.* 1988, 19(4), 1154-1168.
- Younes, A., Ackerer, P. & Lehmann, F., A New Mass Lumping for the Mixed Hybrid Finite Element Method, *Int. J. Num. Met. Eng.*, 2006, 67, 89-107.

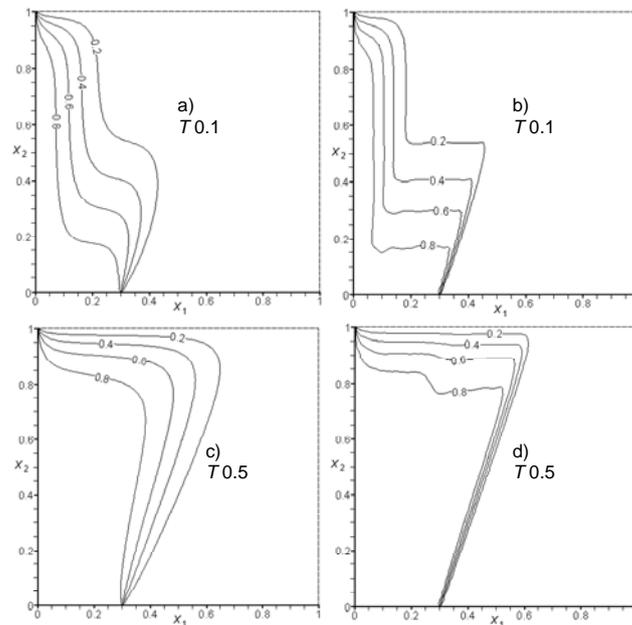


Figura 1. Test 1. Iso-C calcolate dal modello proposto: a), c) $\alpha_T = 1.d-02$ m; b), d) $\alpha_T = 1.d-04$ m

layer	K [m/year]	D_d [m ² /year]	α_L [m]	α_T [m]	$R\epsilon$ [-]	T_I I 129 [year]
marl	$3.1536 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-04}$	0	0	1	$1.57 \cdot 10^7$
limestone	6.3072	$5 \cdot 10^{-04}$	50	1	1	$1.57 \cdot 10^7$
clay	$3.1536 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-07}$	0	0	0.001	$1.57 \cdot 10^7$
dogger	25.2288	$5 \cdot 10^{-04}$	50	1	1	$1.57 \cdot 10^7$

Tabella 1. Test 2. Parametri fisici degli strati geologici e tempo di vita media T_I dello iodio I 129

$H = 289$ m $x_1 = 25000, 0 \leq x_2 \leq 200$	$\frac{\partial C_i}{\partial n} = 0$ $x_1 = 0, 295 \leq x_2 \leq 595, 0 \leq x_2 \leq 200$
$H = 310$ m $x_1 = 25000, 350 \leq x_2 \leq 595$	$\mathbf{D}_i \nabla C_i \cdot \mathbf{n} - C_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ $0 \leq x_1 \leq 25000, x_2 = 0$
$H = 180 + \frac{160x_1}{25000}$ m $0 \leq x_1 \leq 25000, x_2 = 695$	$C_i = 0$ altrove
$H = 200$ m $x_1 = 0, 295 \leq x_2 \leq 595$	
$H = 286$ m $x_1 = 0, 0 \leq x_2 \leq 200$	
$\partial H / \partial n = 0$ altrove	

Tabella 2. Test 2. Condizioni al contorno. Sinistra) potenziale H ; destra) concentrazione C

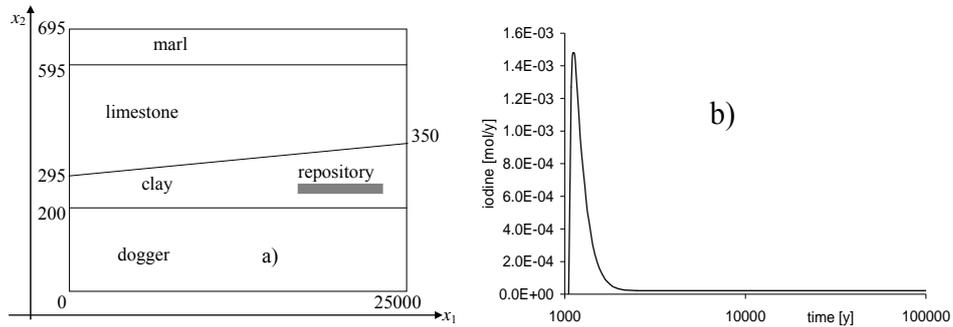


Figura 2. Test 2. a) geometria e stratificazione (misure in m) ; b) rilascio di I 129 nel tempo

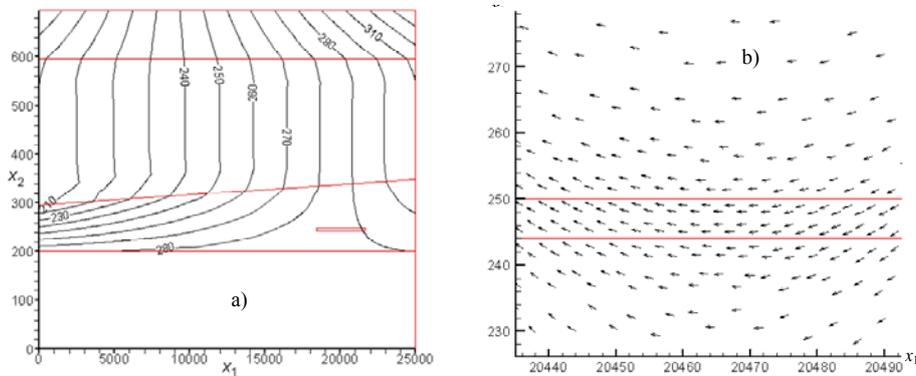


Figura 3. Test 2. a) Potenziali calcolati dal modello proposto (valori in m); b) particolare dei vettori velocità calcolati presso il repository

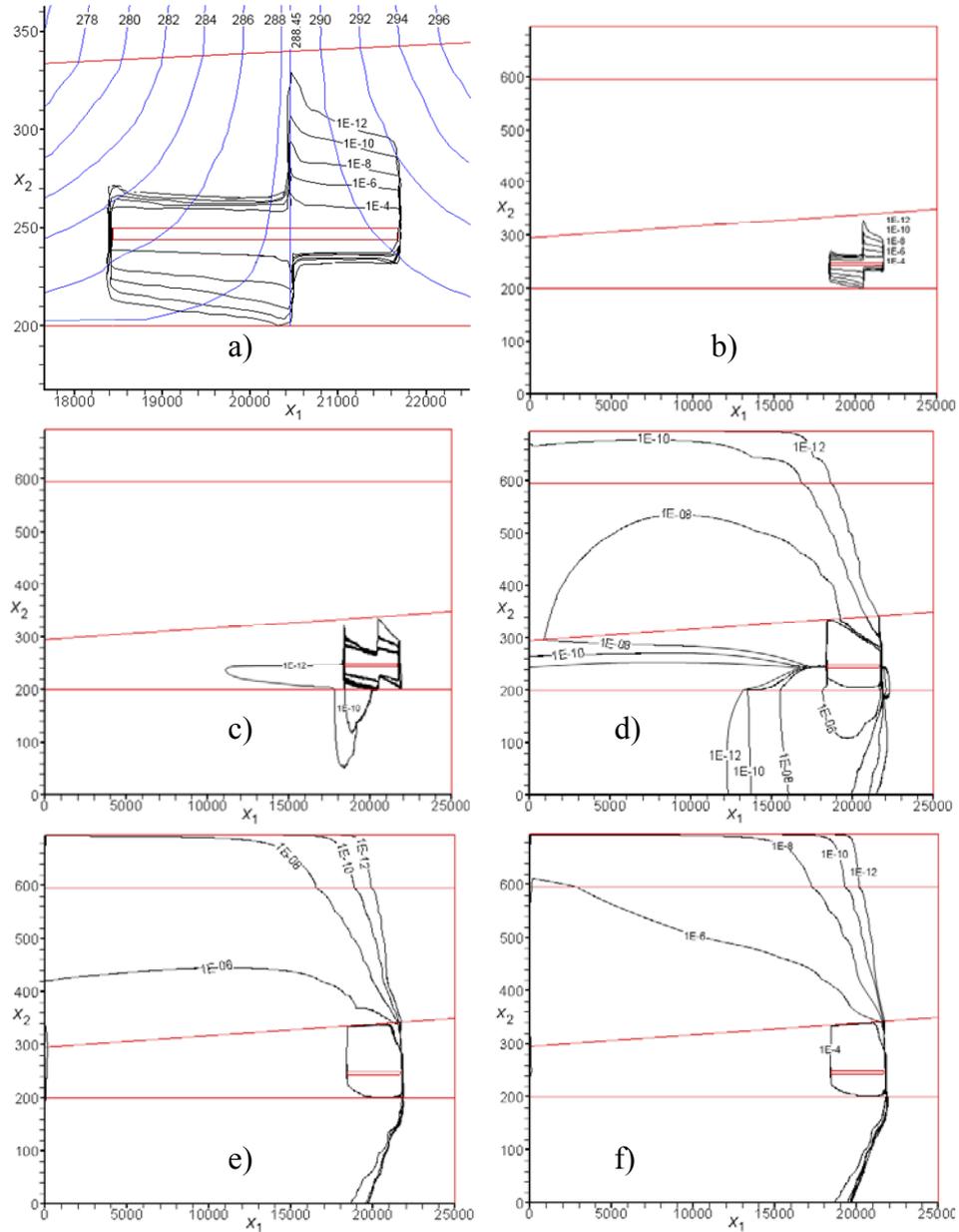


Figura 4. Test 2. Linee iso-C calcolate dal modello proposto per le durate: a) 10110 anni (particolare vicino al repository), b) 10110 anni, c) 50110 anni, d) $2 \cdot 10^5$ anni, e) 10^6 anni, f) 10^7 anni (in rosso zone geologiche e repository) (distanze in m)