Bollettino Unione Matematica Italiana

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

Annamaria Mazzia

Elementi Finiti Misti e Volumi Finiti per la soluzione del problema di flusso e trasporto di contaminanti radioattivi pesanti in mezzi porosi

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. **3-A**—*La Matematica nella Società e nella Cultura* (2000), n.3, p. 383–386.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2000_8_3A_3_383_0>

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2000.

Bollettino U. M. I.
La Matematica nella Società e nella Cultura
Serie 8, Vol. III-A, Dicembre 2000, 383-386

Elementi Finiti Misti e Volumi Finiti per la soluzione del problema di flusso e trasporto di contaminanti radioattivi pesanti in mezzi porosi.

ANNAMARIA MAZZIA

In questo lavoro è stato sviluppato un metodo numerico accurato ed efficiente per risolvere problemi accoppiati di flusso e trasporto di contaminanti radioattivi in acque sotterranee. Lo studio è finalizzato, soprattutto, allo studio del sito più contaminato del mondo, il lago Karachai, negli Urali del Sud (Russia). Questo lago fu utilizzato, fin dagli anni cinquanta, per immagazzinarvi residui radioattivi provenienti da esperimenti nucleari e, successivamente, come discarica dei rifiuti liquidi radioattivi della centrale nucleare di Mayak. Per comprendere la gravità del problema, basti pensare che la quantità di contaminanti radioattivi presenti nel lago Karachai è maggiore, in termini di radioattività, a quanto rilasciato dall'incidente di Chernobyl nel 1986. Inoltre, bastano appena poche ore sulla riva del lago per ricevere una dose fatale di radiazioni.

Questa ricerca rientra nell'ambito del progetto RaCoS, un contratto europeo attivo presso il Dipartimento di Metodi e Modelli Matematici per le Scienze Applicate dell'Università di Padova, di cui coordinatore è il prof. G. Gambolati. Il progetto ha come finalità lo sviluppo di un modello predittivo del trasporto di radionuclidi nell'acquifero sottostante il lago Karachai. Tale modello dovrà essere utilizzato per la valutazione dell'efficienza di tecniche di contenimento atte alla prevenzione della contaminazione da sostanze radioattive dei fiumi che scorrono nelle vicinanze del lago.

La centrale di Mayak riversa nel lago sostanze radioattive quali Cs^{137} e Sr^{90} assieme a soluzioni saline ad alta densità. Queste soluzioni pesanti infiltrano nel terreno trasportando con loro i radionuclidi. La simulazione dei processi di trasporto è dunque governata dal modello matematico del *flusso di densità*, un sistema nonlineare formato dalle equazioni di flusso del fluido e di trasporto dei contaminanti:

$$
\begin{aligned}
&\sigma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \phi S_w \varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\varrho}{\varrho_0} q^* + q \\
&\vec{v} = -K_s \frac{1+\varepsilon c}{1+\varepsilon' c} K_r (\vec{\nabla} \psi + (1+\varepsilon c)\, \eta_z) \qquad (1)\\
&\phi \frac{\partial S_w c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{v}) + qc^* + f.
\end{aligned}
$$

La prima equazione rappresenta l'equazione di flusso per la pressione ψ, la seconda è la velocità di Darcy $\vec{v}$ e la terza è l'equazione di trasporto per la concentrazione c.

Per risolvere numericamente il problema accoppiato di flusso e trasporto, si è considerato lo schema iterativo di Picard, che consiste nella soluzione simultanea delle prime due equazioni di (1) per poi calcolare l'equazione di trasporto, che fornisce la concentrazione del contaminante. Questa procedura è ripetuta fino a che non si ottiene convergenza. Per ottenere soluzioni accurate, è fondamentale che il campo delle velocità sia accurato. Inoltre, visto che in problemi reali i domini sono irregolari, è opportuno operare su griglie non strutturate. L'originalità di questo lavoro consiste nel risolvere il problema di flusso e trasporto combinando un metodo agli Elementi Finiti Misti Ibridi (EFMI) standard per la soluzione del problema di flusso, con una tecnica originale di time-splitting per la soluzione del problema di trasporto, entrambi sviluppati su griglie non strutturate [1, 3, 4, 5].

L'approccio degli EFMI garantisce proprietà come quella della conservazione della massa e velocità conservative, assicurandoci un campo di velocità accurato.

La tecnica di time-splitting per il trasporto ci permette di ottenere soluzioni altrettanto accurate per la concentrazione, in quanto i due termini di avvezione e dispersione nel trasporto vengono risolti separatamente considerando le discretizzazioni più adatte alle caratteristiche di ciascuna equazione, tali da garantire soluzioni efficienti e, per il caso dell'avvezione, capaci di catturare bene gli shocks e le discontinuità. Perció uno schema ai Volumi Finiti (VF) è utilizzato per risolvere la parte avvettiva dell'equazione di trasporto [2], mentre lo schema agli EFMI è usato per la parte dispersiva. La scelta è stata guidata oltre che da ragioni di accuratezza, robustezza ed efficienza dei due metodi, anche dal fatto che sono entrambi basati sulla formulazione debole dell'equazione di partenza e usano spazi funzionali molto simili.

In maniera molto semplice la tecnica del time-splitting può essere schematizzata riscrivendo l'equazione del trasporto come:

$$\phi \frac{\partial S_w c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{F} + \vec{G}) = f \tag{2}$$

dove $\vec{F} = c\vec{v}$ rappresenta il flusso avvettivo e $\vec{G} = -D\vec{\nabla} c$ è il flusso dispersivo. Ad ogni passo di tempo si risolve dapprima l'equazione contenente il solo termine avvettivo con i VF (*passo avvettivo*) ottenendo così un'approssimazione della concentrazione che si utilizza come valore iniziale nel successivo passo (*passo dirspersivo*), in cui l'equazione contenente la dispersione è discretizzata mediante gli EFMI.

Per ogni passo di tempo, per andare da t^k a t^{k+1}, si ha, dunque, il seguente algoritmo:

- passo avvettivo: su ogni triangolo T_l della griglia risolvere n_a volte con un schema ai VF esplicito, con Δt_a come passo temporale, determinando la concentrazione $\hat{c}_l^{k+1}$

1. $\phi_l^{(0)} := \phi_l^k \quad c_l^{(0)} := c_l^k$
2. DO $i_a = 0, n_a - 1$

(3) $$\phi^{(i_a+1)} c_l^{(i_a+1)} = \phi^{(i_a)} c_l^{(i_a)} + \Delta t_a [L_a(c_l^{(i_a)})]$$

END DO

3. $\hat{c}_l^{k+1} := c_l^{(n_a)}$

• passo dispersivo: su ogni triangolo T_l risolvere con un metodo agli EFMI implicito utilizzando $\hat{c}_l^{k+1}$ come condizione iniziale

(4) $$\phi^{k+1} c_l^{k+1} = \phi^k \hat{c}_l^{k+1} + \Delta t_d [L_d(c_l^{k+1})]$$

con $\Delta t_d = n_a \Delta t_a$, ottenendo l'approssimazione finale c_l^{k+1}.

Nell'algoritmo precedente L_a e L_d rappresentano gli operatori di discretizzazione spaziale, rispettivamente per l'avvezione e per la dispersione, mentre c_l rappresenta l'approssimazione della concentrazione sul triangolo T_l. Per semplicità è stato posto $S_w = 1$. Per il passo avvettivo si utilizza uno schema esplicito nel tempo, mentre per il passo dispersivo è impiegato uno schema implicito. Questo può essere visto come un difetto della tecnica del time-splitting perchè il passo di tempo avvettivo è limitato da ragioni di stabilità, ma in molti problemi di importanza pratica, occorre utilizzare passi temporali anche più piccoli di quelli dettati dalla stabilità per ottenere risultati efficienti. Inoltre, il fatto che nel passo dispersivo si utilizza uno schema implicito permette l'impiego di due passi temporali, uno per l'avvezione e uno per la dispersione e, quindi, è possibile fare n_a (>1) passi avvettivi per ciascun passo dispersivo.

Sono stati esaminati diversi schemi di time-splitting: uno schema del second'ordine nello spazio e del prim'ordine nel tempo, con la possibilità di utilizzare diversi passi temporali per l'avvezione e per la dispersione, e un'estensione al second'ordine anche nel tempo. Per quest'ultimo caso, non è sufficiente considerare schemi accurati al second'ordine nel tempo per ciascuno dei due operatori, avvettivo e dispersivo, in quanto il time-splitting introduce un errore proporzionale al passo temporale. Per ritrovare il second'ordine anche nel tempo, si dimostra che occorre introdurre un termine di correzione nella discretizzazione dell'avvezione che tenga conto della dispersione. Un algoritmo che sia globalmente accurato al second'ordine è stato ottenuto utilizzando $n_a = 1$. Nel caso $n_a > 1$, (ovvero passi diversi per avvezione e dispersione), sembra più difficile individuare un termine di correzione che determini un algoritmo globalmente accurato al second'ordine.

Gli esempi numerici studiati confermano la validità del metodo, perchè le soluzioni rivelano diffusione numerica minima senza oscillazioni, conservano la simmetria e sono capaci di catturare bene gli shocks.

Avendo, dunque, due strumenti validi per risolvere il flusso e il trasporto, si può affrontare la risoluzione del problema accoppiato. La procedura numerica viene sperimentata su un caso test della letteratura, il problema di Elder, in cui il flusso del fluido è governato soltanto dalla forza di gravità e dalle successive differenze di densità.

I risultati confermano che l'approccio utilizzato è accurato, non presenta oscillazioni numeriche nè introduce eccessiva diffusione numerica come accade con metodi più convenzionali. Inoltre, la presenza di griglie non strutturate non influenza la soluzione ma le simmetrie sono ben conservate. Tutto ciò suggerisce di utilizzare questa tecnica per risolvere situazioni più complesse, come ad esempio, quella del lago Karachai. I risultati che sono stati ottenuti sono in buon accordo con le osservazioni sperimentali.

Il codice bidimensionale per risolvere il problema accoppiato di flusso e trasporto di contaminanti radioattivi basato sugli EFMI e i VF e sulla tecnicna di time-splitting è altamente accurato e può essere utilizzato per confrontare i risultati ottenuti da codici tridimensionali (in genere basati sugli elementi finiti). In particolare, si può verificare se la diffusione numerica necessariamente introdotta per mantenere la stabilità dei codici tridimensionali determini una predizione sbagliata del movimento dei contaminanti. Le verifiche fatte fino ad ora permettono di dire che la diffusione numerica introdotta dai codici tridimensionali non influenza negativamente la predizione del contaminante. Tuttavia, se si vogliono ottenere risultati qualitativi più accurati conviene utilizzare l'approccio bidimensionale basato sul time-splitting.

BIBLIOGRAFIA

[1] Dawson C. N., *Godunov-mixed methods for advection-diffusion equations in multidimensions,* SIAM J. Num. Anal., **30** (1993), 1315-1332.

[2] Liu X. D., *A maximum principle satisfying modification of triangle based adaptive stencils for the solution of scalar hyperbolic conservation laws,* SIAM J. Num. Anal., **30** (1993), 701-716.

[3] Mazzia A., Bergamaschi L. e Putti M., *A second order time-splitting technique for advection-dispersion equation on unstructured grids,* Proceedings of: Godunov Methods: Theory and Applications, (2000), in press.

[4] Mazzia A., Bergamaschi L. e Putti M., *A time-splitting technique for advection-dispersion equation in groundwater,* J. Comp. Phys., **157** (2000), 181-198.

[5] Mazzia A., Bergamaschi L. e Putti M., *Triangular finite volume-mixed finite element discretization for the advection-diffusion equation,* Notes on Numerical Fluid Mechanics. Large Scale Scientific Computations of Engineering and Environmental Sciences, M. Griebel, S. Margenov, and P. Yalamov, eds., Vieweg, **73** (2000), 371-378.

Dipartimento di Metodi e Modelli Matematici
per le Scienze Applicate, Università di Padova
e-mail: mazzia@dmsa.unipd.it
Dottorato di Ricerca in Matematica Computazionale
(sede amministrativa: Padova) – Ciclo XII
Direttori di ricerca: Prof. G. Pini, Università di Padova
e Prof. D. Trigiante, Università di Firenze