



Unione Europea



Università della Calabria



UNIVERSITÀ DEL SALENTO

Università del Salento



Università degli Studi della Basilicata



Politecnico di Bari

Dottorato di Ricerca in Ingegneria Idraulica per l'Ambiente ed il Territorio
XX Ciclo (2004-2007)

Dissertazione per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca

**Un modello agli automi cellulari macroscopici per
la modellazione dei fenomeni di moto e trasporto
nei mezzi porosi**

Settore Scientifico Disciplinare ICAR-02

Francesco Ruga

Coordinatore

Prof. Ing. Paolo Veltri

Relatori

Prof. Ing. Salvatore Troisi

Prof. Ing. Giuseppe Mendicino

Dott. Ing. Salvatore Straface

Novembre 2008

Indice

Indice delle figure	iii
Indice delle tabelle	v
Introduzione.....	1
Capitolo I – Processi fisici di flusso e trasporto nei mezzi porosi	4
1. Interazione tra fluido e mezzo poroso.....	7
2. La legge di Darcy.....	11
3. Il moto in un mezzo poroso saturo indeformabile	13
4. Il moto in un mezzo poroso parzialmente saturo	16
5. Il trasporto di massa nella zona satura	20
5.1. Convezione	21
5.2. Diffusione molecolare	24
5.3. Dispersione cinematica.....	25
6. Il trasporto di massa nella zona non satura	27
7. Formulazione del problema matematico	30
Capitolo II – Approccio discreto ai problemi di flusso e trasporto in un mezzo poroso	32
1. Quantità fisiche.....	34
1.1 Variabili di configurazione, di sorgente ed energetiche.....	35
1.2 Variabili fisiche e geometriche	35
1.3 Complesso di celle	38
2. Formulazione discreta delle equazioni.....	40
2.1 La legge di Darcy.....	40
2.2 Formulazione discreta del flusso idrico sotterraneo	46
2.3 Formulazione discreta del trasporto di massa.....	49
Capitolo III – Automi cellulari	55
1. Sistemi di calcolo parallelo	55
1.1 Metriche per la misura delle prestazioni	57
2. Automi cellulari	59
2.1 Breve storia degli automi cellulari.....	60
2.2 Definizione informale di automa cellulare	61
2.3 Definizione formale di automa cellulare.....	65
2.3.1 L’automa finito e l’automa elementare	65
2.3.2 L’automa cellulare omogeneo deterministico	66

3. Applicazioni degli Automi Cellulari nella fluidodinamica	68
3.1 Gas Reticolari.....	69
3.1.1 Modelli di Boltzmann su reticolo	75
4. Automi cellulari e fenomeni macroscopici	77
4.1 Modellazione con automi cellulari.....	78
4.1.1 Un metodo empirico per la modellazione di fenomeni macroscopici con AC	79
4.1.2 Estensione della definizione di Automa Cellulare per la modellazione di fenomeni macroscopici.....	82
Capitolo IV – Un modello matematico di flusso e trasporto agli AC macroscopici.....	84
1. Il modello AC per la simulazione del flusso e del trasporto in un mezzo poroso	84
1.1 Aggiornamento delle proprietà idrauliche del suolo	88
1.2 Applicazione dell'equazione discreta del flusso.....	89
1.3 Aggiornamento delle proprietà idrodispersive del suolo.....	91
1.4 Applicazione dell'equazione discreta del trasporto	91
2. Quantizzazione dell'AC.....	92
3. Scalabilità dell'AC.....	93
Capitolo V – Validazione del modello matematico agli AC.....	95
1. L'ambiente CAMELOT per la simulazione del modello agli AC.....	95
2. L'apparato sperimentale: il Laboratorio Hydrogeosite	96
2.1 Prova di emungimento nel Laboratorio Hydrogeosite.....	100
2.2 Caratterizzazione del mezzo poroso saturo	103
2.3 Validazione del codice ad AC.....	105
2.3.1 Schematizzazione del pozzo.....	106
2.3.2 Implementazione del modello.....	109
3. Risultati	111
Conclusioni.....	114
Appendice I – Il tensore di Dispersione cinematica	116
Appendice II – Schematizzazione del pozzo in ambiente Camelot.....	121
Bibliografia.....	124

Indice delle figure

Figura 1: Il ciclo idrologico	1
Figura 2: Rilascio al suolo di sostanze chimiche	2
Figura 3: Acquifero freatico	5
Figura 4: Acquifero confinato.....	5
Figura 5: Acquifero semiconfinato.....	6
Figura 6: Tubo capillare [Bear, 1989].....	10
Figura 7: Esperimento di Darcy [Custodio, 1996].....	11
Figura 8: Centroide del volume elementare	13
Figura 9: Volume di riferimento elementare in acquifero non-confinato [de Marsily, 1986]	15
Figura 10: Comportamento dei filetti fluidi tra i grani di terreno [Chiesa G., 1988]	21
Figura 11: Schema della dispersione laterale dei filetti fluidi in un terreno granulare [Chiesa G., 1988].....	21
Figura 12: Schema di un elemento di falda soggetto al flusso di acqua inquinata [Chiesa G., 1988]	22
Figura 13: Percorsi tortuosi a cui è costretto il flusso idrico sotterraneo. [Troisi S. e al., 1985]	27
Figura 14: Approccio differenziale (sopra) e approccio discreto (sotto) [Tonti, 1997].....	33
Figura 15: Orientazione interna ed esterna nello spazio tridimensionale [Tonti, 2000].....	36
Figura 16: Orientazione esterna di un elemento spaziale [Tonti, 2000]	37
Figura 17: Complesso di celle primale e duale [Tonti, 2000]	39
Figura 18: Duale di Voronoi	40
Figura 19: Tetraedro generico nello spazio.....	41
Figura 20: Duale cartesiano	43
Figura 21: Elemento cubico nello spazio	43
Figura 22: Riferimenti spaziali per cella cubica	45
Figura 23: Cambio di base del sistema di riferimento	54
Figura 24: Classificazione delle architetture parallele [Spezzano et al., 1999].....	56
Figura 25: Schema di un semplice automa [Spezzano et al., 1999]	59
Figura 26: Spazi cellulari (a) unidimensionale, (b) bidimensionale con celle quadrate, (c) bidimensionali con celle esagonali e (d) tridimensionale con celle cubiche [D'AMBROSIO, 2003]	62
Figura 27: Vicinato per un Automa Cellulare uni-dimensionale [D'AMBROSIO, 2003].....	63
Figura 28: Vicinati di von Neumann (a) e di Moore (b) per un Automa Cellulare bidimensionale con tassellazione quadrata e vicinato esagonale (c) per un Automa Cellulare bidimensionale con tassellazione esagonale [D'AMBROSIO, 2003].....	64
Figura 29: Regole di collisione del modello FHP. (a) e (b) descrivono, rispettivamente, la configurazione della cella prima e dopo l'urto nel caso di due particelle; (c) e (d) descrivono, rispettivamente, la configurazione della cella prime e dopo l'urto nel caso di tre particelle [D'AMBROSIO, 2003]	71
Figura 30: Dinamica di un'onda (b) nel modello FHP dovuta alla diffusione di una concentrazione di particelle nella zona centrale del reticolo (a).....	74
Figura 31: Simulazione di un flusso intorno a una lamina in un modello di Boltzmann. Le figure da (a) ad (f) illustrano l'evoluzione del sistema	76
Figura 32: Vicinato di von Neumann tridimensionale	86
Figura 33: Schematizzazione dei due passi elementari su cui si basa l'evoluzione dell'AC ..	87

Figura 34: Funzione di transizione applicata alla cella o in un caso di infiltrazione bidimensionale	90
Figura 35: Disposizione dei piezometri e del pozzo dell'Hydrogeosite.....	97
Figura 36: Ricostruzione tridimensionale dell'Hydrogeosite.....	97
Figura 37: Vista di insieme dell'apparato sperimentale	98
Figura 38: Superficie piezometrica risultante dalla simulazione con ModFlow	99
Figura 39: Grafico degli abbassamenti registrati nel pozzo durante la prova di pompaggio	101
Figura 40: Grafico degli abbassamenti registrati nel piezometro 8 durante la prova di pompaggio	101
Figura 41: Grafico degli abbassamenti registrati nel piezometro 15 durante la prova di pompaggio	102
Figura 42: Schema della sezione del sito sperimentale durante la prova di emungimento .	102
Figura 43: Grafico bi-logaritmico degli abbassamenti normalizzati ($w_n = 4\pi Bw/Q$) rispetto al tempo normalizzato ($t_n = t/r^2$) per il piezometro 11. Ugual comportamento si ha in tutti gli altri piezometri monitorati	103
Figura 44: Analisi degli abbassamenti per il piezometro 11 con il metodo di Neuman (1975). Ugual comportamento si ha per tutte le curve abbassamenti-tempo relative agli altri piezometri monitorati.....	104
Figura 45: Schematizzazione del pozzo al passo iniziale (a) e ad un generico passo successivo (b)	107
Figura 46: Grafico dell'andamento del carico idraulico nel tempo, ottenuto nel pozzo di emungimento con il codice ad AC (parametri di tentativo)	110
Figura 47: Grafico dell'andamento del carico idraulico nel tempo, ottenuto nel pozzo di emungimento con il codice ad AC (parametri di laboratorio)	111
Figura 48: Cono di depressione, in condizioni di stazionarietà, ottenuto con il modello ad AC	112
Figura 49: Confronto tra gli abbassamenti di carico, in condizioni di stazionarietà, simulati e misurati durante la prova sperimentale nei punti di controllo	113
Figura 50: Cambio di base del sistema di riferimento	116
Figura 51: Direzioni principali di moto	117
Figura 52: Base delle direzioni principali di moto.....	117
Figura 53: Base delle direzioni principali di isotropia.....	118

Indice delle tabelle

Tabella 1: Abbassamenti in stazionario registrati durante la prova di emungimento.....	100
Tabella 2: Valori di permeabilità K e di porosità efficace S_y ottenuti con il metodo delle Type Curve di <i>Neuman</i> (1975) in tutti i piezometri monitorati	105
Tabella 3: Parametri utilizzati nella implementazione del codice	106
Tabella 4: Valori di tentativo dei parametri a saturazione	109
Tabella 5: Valori di conducibilità idraulica a saturazione e capacità di campo, ottenuti da prove di laboratorio eseguite su campioni di terreno prelevate dall' <i>Hydrogeosite</i>	111
Tabella 6: Confronto tra gli abbassamenti di carico, in condizioni di stazionarietà, simulati e misurati durante la prova sperimentale nei punti di controllo	113

Introduzione

Il settore delle tecnologie ambientali è in forte evoluzione, sia qualitativa sia quantitativa, per differenti e vari motivi, riconducibili però ad un unico aspetto di fondo: la consapevolezza che le problematiche connesse alla tutela del territorio ed al miglioramento delle condizioni ambientali possono essere affrontate utilizzando efficacemente i risultati delle ricerche e delle sperimentazioni di base ottenuti in questi ultimi anni. La risorsa idrica è soggetta ad un ciclo idrologico chiuso, il cui motore è costituito dall'energia solare e dalla gravità. Queste forze provocano una serie di fenomeni, variabili nel tempo e nello spazio, che si ripetono con sistematicità. L'acqua della superficie marina e terrestre è costantemente soggetta ad evaporazione e passa nell'atmosfera per effetto dell'energia solare. Qui il vapore si condensa e, per azione della forza di gravità, ricade sotto forma di precipitazioni in parte sull'idrosfera ed in parte sulle superfici continentali (Figura 1). Nel primo caso, col ritorno delle acque al mare, il ciclo (detto oceanico) si chiude rapidamente. Nel secondo caso, il percorso verso l'idrosfera è più lungo e lento (ciclo continentale). Le acque che cadono sulla litosfera restano in parte in superficie ed in parte s'infiltrano nel sottosuolo.

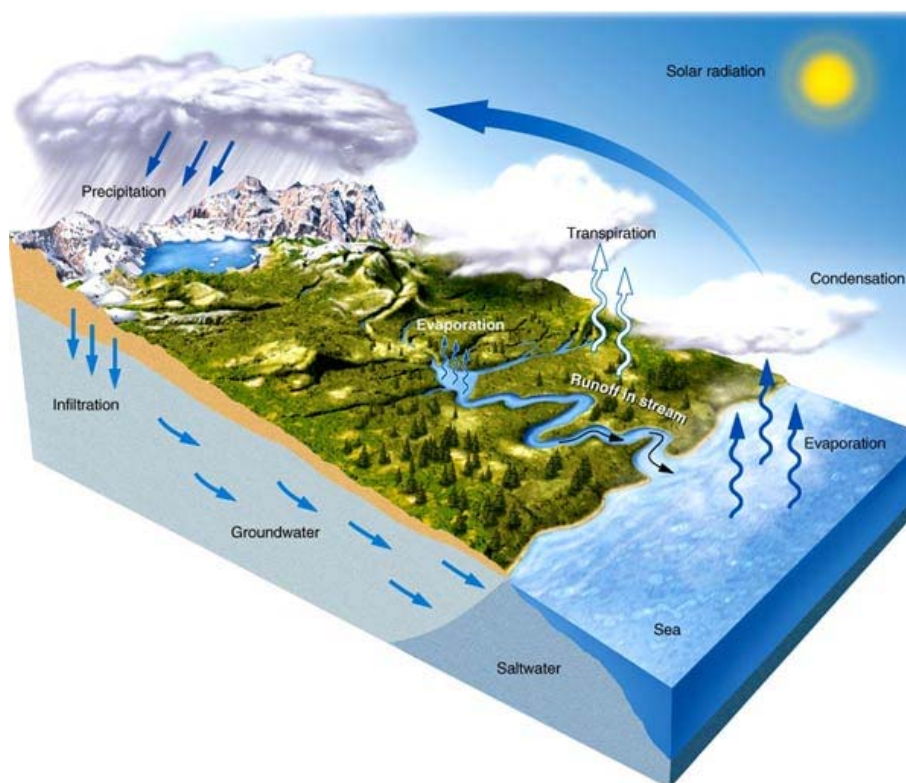


Figura 1: Il ciclo idrologico

Le acque superficiali si dividono in due frazioni: una certa aliquota rientra subito nell'atmosfera perché evapora (acque di evaporazione); l'aliquota rimanente scorre sul suolo (acque di ruscellamento superficiale) e trova recapito preferenziale in mare, attraverso i corsi d'acqua. Anche le acque di infiltrazione si suddividono in due frazioni: la prima è trattenuta nella zona più prossima al suolo ed è restituita all'atmosfera attraverso i fenomeni dell'evaporazione e della traspirazione (acqua di evapotraspirazione); la seconda frazione penetra in profondità (acqua di infiltrazione efficace) ed alimenta, per via sotterranea attraverso il suolo e le rocce, sorgenti, fiumi, laghi e mari.

L'antropizzazione spinta di alcune porzioni di territorio ha causato l'interazione di questi meccanismi naturali con il rilascio al suolo di sostanze chimiche nocive (Figura 2), che vengono quindi trasportate dal massa idrica causando fenomeni di inquinamento di vaste proporzioni.



Figura 2: Rilascio al suolo di sostanze chimiche

La trattazione del problema della modellazione del moto e del trasporto di inquinanti in falda, su grandi scale spazio-temporali, è possibile grazie all'impiego degli automi cellulari macroscopici su architetture di calcolo parallele. Lo studio della dinamica dei sistemi complessi, infatti, è reso oggi possibile dalla disponibilità dei calcolatori paralleli, i quali sono composti da più unità di elaborazione che in parallelo possono eseguire un singolo programma in un tempo molto ridotto rispetto al calcolatore singolo.

Nel modello agli automi cellulari macroscopici (AC) un sistema viene rappresentato come composto da tante semplici parti ed ognuna di esse per evolvere ha una propria regola interna ed interagisce solo con le parti ad essa vicine. L'evoluzione globale del sistema emerge dalle evoluzioni di tutte le parti elementari.

Un AC è un sistema dinamico discreto. Spazio, tempo e stati del sistema sono discreti. Ogni elemento dell'automa in una griglia spaziale regolare è detto cella e può essere in uno degli stati finiti che la cella può avere. Gli stati delle celle variano secondo una regola locale, cioè lo stato di una cella ad un dato istante di tempo dipende dallo stato della cella stessa e dagli stati delle celle vicine all'istante precedente. Gli stati di tutte le celle sono aggiornati contemporaneamente in maniera sincrona. L'insieme degli stati delle celle compongono lo stato dell'automa. Quindi lo stato dell'automa evolve in passi temporali discreti.

Nell'applicazione condotta in questo studio il sistema complesso è costituito dal sistema idrico sotterraneo in cui avvengono i processi di moto idrico e trasporto di inquinanti, e dall'evoluzione spazio-temporale degli stessi. Queste problematiche, già descritte in letteratura da equazioni differenziali che ne descrivono il comportamento, trova il suo limite applicativo nella estrema complessità che caratterizza il sistema idrico sotterraneo. Questo rende le equazioni differenziali integrabili in forma esatta solo per particolari geometrie molto semplici, che molto si discostano dalle realtà. Per tale motivo in letteratura sono proposti dei metodi risolutivi alle differenze finite che consentono di discretizzare l'equazione differenziale e di poter ottenere una soluzione approssimata del problema osservato. Anche questo metodo risolutivo ha un limite nella onerosità computazionale che tale approccio richiede. Questo rende la procedura utilizzabile su domini spazio-temporali ridotti in quanto la capacità elaborare un problema di questo tipo è limitata dalla quantità di memoria e dalla velocità di calcolo disponibili su un singolo calcolatore.

Il valore aggiunto di questo lavoro è il superamento di tale limite tramite l'impiego degli AC su architettura di calcolo parallela che, suddividendo il problema su un numero potenzialmente infinito di calcolatori, è capace di risolvere il problema proposto su un dominio potenzialmente infinito. Da questo si evince immediatamente che tale approccio consente di studiare i fenomeni in falda con caratteristiche tali da essere il più possibile simile alla realtà.

Capitolo I – Processi fisici di flusso e trasporto nei mezzi porosi

Per mezzo poroso si intende una porzione di spazio costituita da una matrice solida e da un sistema di pori, riempiti parzialmente o completamente da una o più fasi fluide (gassose e/o liquide), in cui avviene il moto.

Si distingue essenzialmente una zona di saturazione nella quale i pori sono completamente occupati da acqua ed una sovrastante zona di aerazione nella quale i pori contengono sia gas (aria e vapore d'acqua) sia acqua. Le due zone sono separate dalla superficie piezometrica in corrispondenza della quale, si assume nulla la pressione relativa dell'acqua.

Due diverse variabili possono essere utilizzate per definire la quantità di acqua presente ad un certo istante di tempo nel mezzo poroso. Ricordando che il volume del dominio poroso considerato nella definizione dei valori virtuali, locali ed istantanei che costituisce lo schema continuo e apparente del fluido nel mezzo poroso e dei fenomeni che lo interessano è spesso chiamato volume elementare rappresentativo (Representative Elementary Volume – REV) si possono indicare con:

$$\theta_w = \frac{\text{Volume idrico nel REV all'istante } t}{\text{Volume totale del REV}}; \quad 0 \leq \theta_w \leq n$$

$$S_w = \frac{\text{Volume idrico nel REV all'istante } t}{\text{Volume dei vuoti nel REV}}; \quad 0 \leq S_w \leq 1$$

dove θ_w è il contenuto idrico e S_w è il grado di saturazione.

Naturalmente, le due variabili sono legate dalla relazione:

$$\theta_w = nS_w$$

nella quale n è la porosità nel punto considerato.

Il mezzo poroso saturo costituisce l'acquifero (dal latino aqua = acqua e fero = io porto) ed è una formazione idrogeologica permeabile che permette il deflusso significativo di una falda idrica sotterranea e la captazione di quantità apprezzabili d'acqua con mezzi economici. E' paragonabile ad un giacimento minerario il cui minerale, l'acqua, è più o meno rinnovabile. Nella terminologia corrente è spesso usato il sinonimo di falda idrica sotterranea.

La configurazione dell'acquifero verte sulle sue dimensioni e sulle caratteristiche dei limiti geologici ed idrodinamici (condizioni ai limiti). La base dell'acquifero è costituita da una formazione idrogeologica impermeabile. Al contrario il suo limite superiore può essere di tre tipi:

- idrodinamico, con fluttuazioni libere della superficie piezometrica e direttamente a contatto con la zona non satura (acquifero freatico, Figura 3);
- geologico impermeabile (acquifero confinato, Figura 4);
- geologico semipermeabile (acquifero semi-confinato, Figura 5).

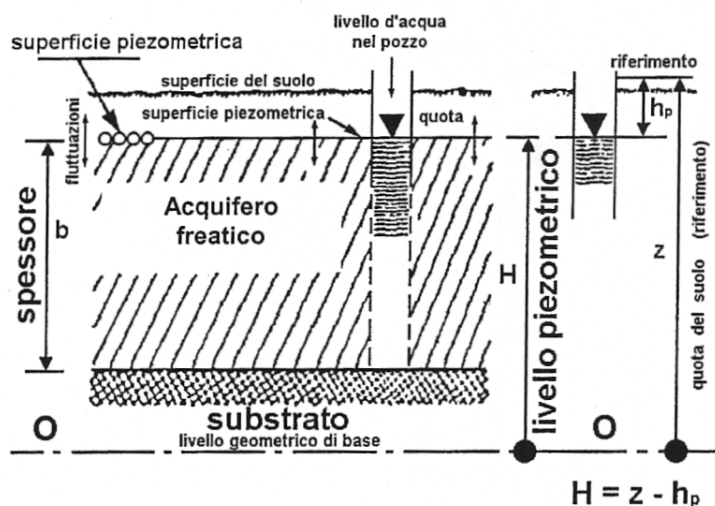


Figura 3: Acquifero freatico

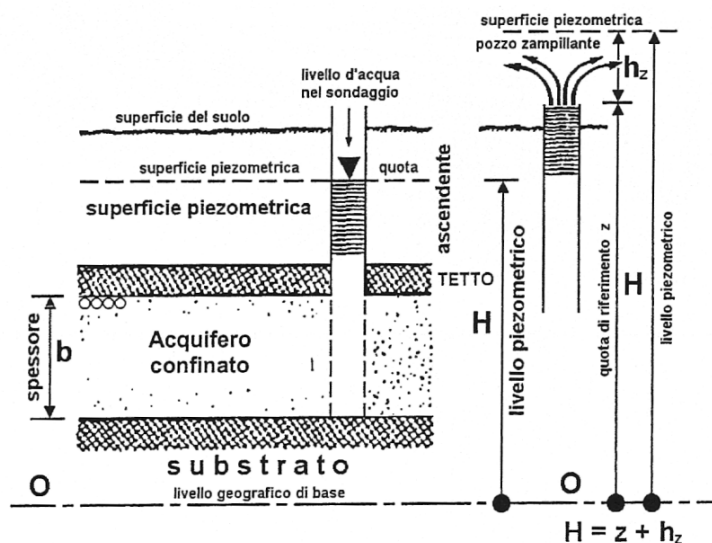


Figura 4: Acquifero confinato

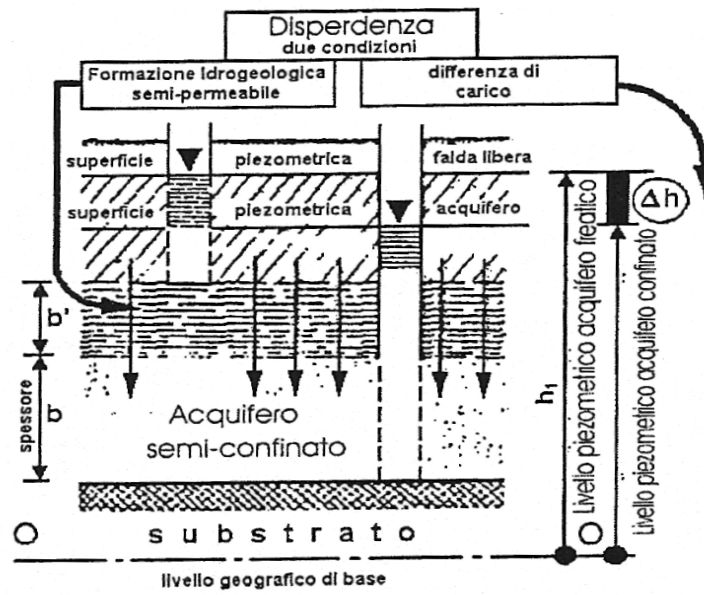


Figura 5: Acquifero semiconfinato

1. Interazione tra fluido e mezzo poroso

La zona non satura si estende dal piano campagna alla superficie di falda e comprende la frangia capillare dove i pori potrebbero essere saturi. La caratteristica principale della zona vadosa è che la pressione dei pori potrebbe essere negativa (Figura 6). L'idrologia della zona vadosa differisce dalla idrologia della zona satura a causa della presenza di aria nei pori. Le proporzioni relative dell'aria e dell'acqua nei pori possono variare, e con esse possono variare le proprietà idrauliche del mezzo poroso.

Nel flusso saturo il carico idraulico in un determinato punto è dato dalla pressione dell'acqua nei pori in quel punto e dalla quota in quel punto rispetto ad un determinato piano di riferimento.

Nel flusso insaturo invece l'acqua è soggetta ad una pressione negativa causata dalla tensione capillare Ψ . Tale potenziale è una funzione del contenuto volumetrico d'acqua θ :

$$\Psi = \Psi(\theta)$$

Il potenziale di umidità totale Φ è definito come:

$$\Phi = \Psi(\theta) + Z + \Pi + E + \Omega$$

dove: Ψ = potenziale capillare

Z = potenziale gravitazionale

Π = potenziale di pressione

E = potenziale elettrochimico

Ω = potenziale osmotico.

Trascurando i potenziali osmotico, elettrochimico e di pressione, il potenziale di umidità totale è dato da:

$$\Phi = \Psi(\theta) + Z$$

Il potenziale di capillarità può essere misurato come una pressione capillare P_c , che dimensionalmente è una energia per unità di volume, mentre il potenziale gravitazionale è

pari a $\rho_w g z$, anch'esso con dimensioni di una energia per unità di volume. Allora il potenziale di umidità totale assume la forma:

$$\Phi_{EV} = P_c + \rho_w g z$$

mentre in termini di energia per unità di peso è:

$$\Phi_{EW} = \frac{P_c}{\rho_w g} + z = h + z$$

ed in termini di energia di massa infine:

$$\Phi_{EM} = \frac{P_c}{\rho_w} + g z$$

Se il potenziale gravitazionale risulta maggiore del potenziale di capillarità, la forza peso vince la tensione di capillarità, quindi si verifica un moto di umidità verso il basso (drenaggio), viceversa il moto di umidità sarà verso l'alto (imbibizione).

La riduzione del livello della superficie libera della falda determina il drenaggio del mezzo poroso, cioè quel processo in cui l'aria occupa progressivamente il posto dell'acqua nella matrice porosa. Questo spostamento dell'acqua da parte dell'aria avviene localmente dove la pressione dell'aria assume valori superiori a quella dell'acqua. Quest'ultima aderisce alle particelle solide più di quanto faccia l'aria, e ciò determina una curvatura della superficie di interfaccia. Inoltre poiché tale interfaccia aria-acqua può sopportare sforzi di trazione grazie alla presenza di tensioni superficiali, risulta che la differenza tra la pressione dell'aria e dell'acqua viene equilibrata dalle stesse tensioni che agiscono lungo il contorno della superficie. Si può definire la pressione capillare come:

$$P_c = P_{aria} - P_w$$

All'aumentare della pressione capillare l'acqua si sposta nella matrice solida alla ricerca dei pori di dimensione sufficientemente piccoli da garantire tensioni di equilibrio. La risalita capillare vale:

$$h = -z = \frac{P_c}{\rho_w g}$$

Per quanto detto la pressione assoluta dell'acqua è inferiore alla pressione atmosferica, quindi nel sistema relativo la pressione capillare risulta negativa e la sua distribuzione è di tipo idrostatico.

La compresenza dell'aria e dell'acqua nella matrice solida richiede un parametro che caratterizzi il volume relativo dell'acqua nell'acquifero, definito come contenuto volumetrico d'acqua:

$$\theta = \frac{V_w}{V_t} = 0 \div 1$$

dove: V_w = volume d'acqua contenuto nel volume rappresentativo dell'acquifero

V_t = volume rappresentativo dell'acquifero

esso è pari a zero per mezzo asciutto, mentre è pari ad 1 per mezzo completamente saturo, e diminuisce all'aumentare di P_c in quanto l'acqua, all'aumentare della pressione capillare, deve occupare volumi sempre più piccoli. Le curve $P(\theta)$ o $h(\theta)$ sono dette curve di ritenzione e descrivono la capacità del mezzo poroso a trattenere l'acqua nel corso dei processi di drenaggio e imbibizione.

I terreni in condizioni non sature presentano una conducibilità idraulica inferiore rispetto al caso di condizioni sature, in quanto, in base all'analisi fatta pocanzi, una parte del volume dei pori risulta occupato dalla fase gassosa riducendo così il volume d'acqua che può essere trasmesso. Pertanto l'umidità del terreno nella zona vadosa si sposta verso le sezioni bagnate degli spazi interstiziali. Quando il terreno viene drenato i pori più larghi si svuotano per primi e, poiché ad essi è attribuito il maggior livello di conducibilità idraulica, si verifica una immediata diminuzione della capacità del terreno di trasmettere l'acqua. La conducibilità idraulica non satura è una funzione del contenuto volumetrico d'acqua:

$$K = K(\theta) = K(\Psi)$$

essa dipende dalla temperatura, ed a parità di θ , K aumenta con la temperatura. La conducibilità idraulica può essere stimata, secondo Van Genuchten, dai parametri ottenuti dalla curva di ritenzione:

$$K(\theta) = K_s S_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2$$

dove: K_s = conducibilità idraulica satura

$$S_e = (\theta - \theta_r) / (\theta_s - \theta_r)$$

m = parametro di Van Genuchten.

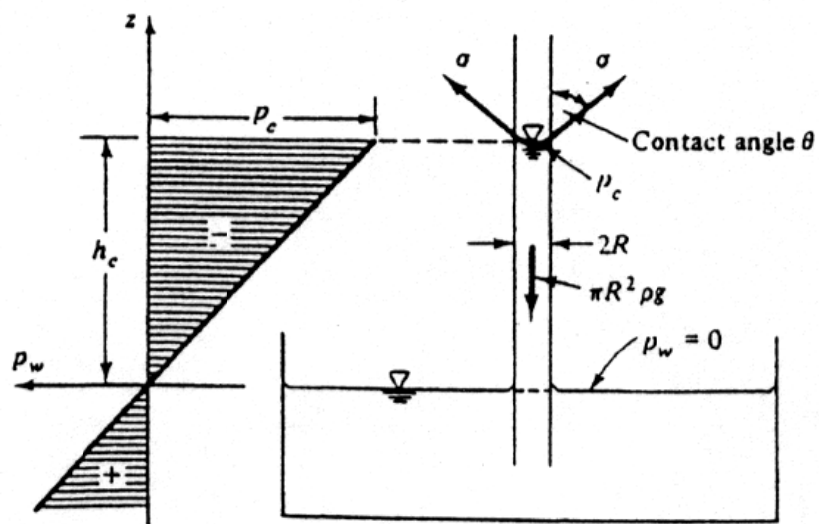


Figura 6: Tubo capillare [Bear, 1989]

2. La legge di Darcy

La legge di Darcy stabilisce una proporzionalità diretta, in regime laminare, tra il flusso di un fluido in un mezzo poroso Q ed il gradiente idraulico i tramite il coefficiente k (permeabilità). Con riferimento alla Figura 7 potremo scrivere:

$$Q = k \cdot A \cdot i = k \frac{\Delta h}{\Delta L}$$

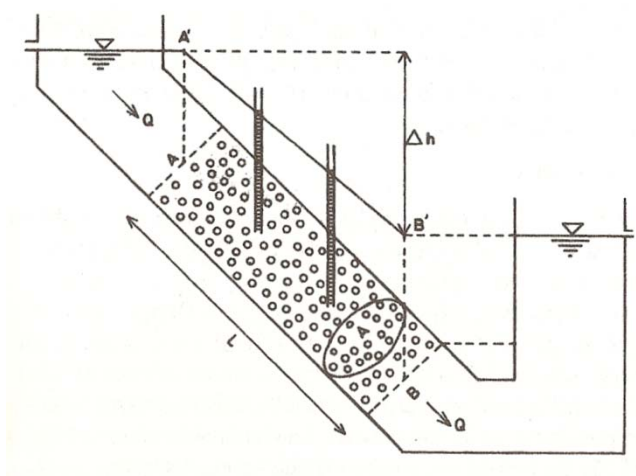


Figura 7: Esperimento di Darcy [Custodio, 1996]

Il valore di k , nell'ambito della legge di Darcy, è un valore costante per ogni mezzo e per tutti i fluidi, nelle stesse condizioni. Non è facile correlare sempre il valore di k con le caratteristiche del mezzo poroso. Un terreno molto poroso può essere molto permeabile se i suoi pori sono abbastanza grandi e ben interconnessi (ghiaia), oppure quasi impermeabile se i pori sono di dimensioni molto piccole e/o semichiusi (argille). Su k influiscono oltre alla natura del terreno anche la densità e la viscosità del fluido che, a sua volta, dipendono dalla temperatura e dalla pressione:

$$k = k_0 \cdot \frac{\gamma}{\mu}$$

dove k_0 è la permeabilità intrinseca, γ è il peso specifico del fluido e μ la viscosità.

Con riferimento alla permeabilità, un mezzo si definisce omogeneo quando le sue proprietà sono costanti in tutti i suoi punti; se invece queste cambiano da un punto a un

altro il mezzo si dice eterogeneo. In termini stretti, tutti i mezzi porosi o fratturati sono eterogenei per loro natura. Ai fini pratici tuttavia interessano solo le proprietà considerate medie. Pertanto un mezzo di per sé eterogeneo si può considerare macroscopicamente omogeneo, se le proprietà medie in un certo volume di materiale attorno a ciascun punto considerato non variano da un luogo ad un altro.

Un mezzo è idraulicamente isotropo quando le sue proprietà non dipendono dall'orientamento, ossia permangono uguali qualunque sia la direzione considerata. Se la permeabilità cambia con l'orientamento significa che il mezzo è anisotropo. Sia l'omogeneità che l'isotropia ammettono un fattore di scala.

In termini generali, in un sistema di riferimento ortogonale xyz , la legge di Darcy si può esprimere come:

$$\bar{U} = -\underline{k} \cdot \text{grad} \bar{h}$$

Dove U rappresenta il vettore velocità e k il tensore delle permeabilità:

$$\underline{k} = \begin{vmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{vmatrix}$$

3. Il moto in un mezzo poroso saturo indeformabile

Considerando il volume elementare nel riferimento ortogonale xyz in Figura 8, e tenendo conto che il flusso di massa entrante in una generica faccia è $\rho U_n A_n$, sviluppando in serie di Taylor si ottiene il flusso di massa entrante e quello uscente:

$$I_x = \rho U_x \Delta_y \Delta_z - \frac{\partial}{\partial x} (\rho U_x) \Delta_y \Delta_z \frac{1}{2} \Delta_x$$

$$O_x = \rho U_x \Delta_y \Delta_z + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U_x) \Delta_y \Delta_z \frac{1}{2} \Delta_x$$

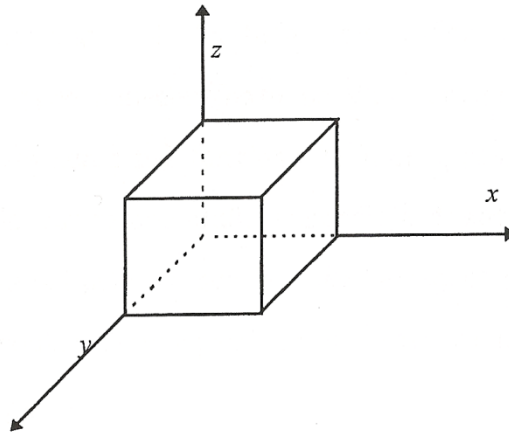


Figura 8: Centroide del volume elementare

Ricavando tali espressioni per tutte le direzioni ed applicando il principio di conservazione della massa si ha:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho U_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho U_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho U_z) \right] \Delta x \Delta y \Delta z = \frac{\partial}{\partial t} (\rho n \Delta x \Delta y \Delta z)$$

con n porosità del mezzo.

L'equazione di continuità del sistema ipotizzato è quindi:

$$\operatorname{div}(\rho \bar{U}) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho n) + \rho q^* = 0$$

con q^* termine sorgente ed U velocità di filtrazione espressa dalla legge di Darcy.

Un acquifero non-confinato è limitato solo inferiormente. La principale differenza fra un acquifero non-confinato ed uno confinato è che nel primo la quantità d'acqua rilasciata non è funzione della compressibilità del fluido e del mezzo ma dipende dalla variazione della superficie freatica e quindi dall'acqua effettivamente presente nei pori. In questo caso ogni variazione di carico idraulico causa un movimento della superficie libera la quale aumenta o diminuisce la quantità d'acqua immagazzinata saturando o drenando i pori. Nella equazione di continuità bisogna considerare un volume elementare che comprenda una sezione della superficie libera. Il volume di riferimento sarà quindi un prisma verticale di spessore e che comprenda uno strato di acquifero preso tra lo strato impermeabile di fondo e la superficie freatica (Figura 9). In questo caso l'approccio si basa sull'assunzione di Dupuit (1863) secondo cui il moto è essenzialmente orizzontale vale a dire, fissata una verticale, le velocità hanno direzione orizzontale e parallela l'un l'altra.

Se le velocità hanno componente verticale nulla, in accordo alla legge di Darcy, il carico piezometrico non varia lungo la direzione verticale, cioè:

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 0 \rightarrow h = h(x, y)$$

e lo studio del moto in un mezzo poroso non-confinato diventa un problema bidimensionale. L'assunzione di moto essenzialmente orizzontale è da ritenersi pienamente valida per gli acquiferi in cui lo spessore saturo varia gradualmente rispetto alla estensione orizzontale, cioè quando la pendenza della superficie libera è relativamente piccola. Secondo Bear (1972), tale condizione è fissata in:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \ll 1$$

Tale circostanza si verifica per la gran parte degli acquiferi naturali che hanno sempre una estensione orizzontale predominante sulla loro dimensione verticale.

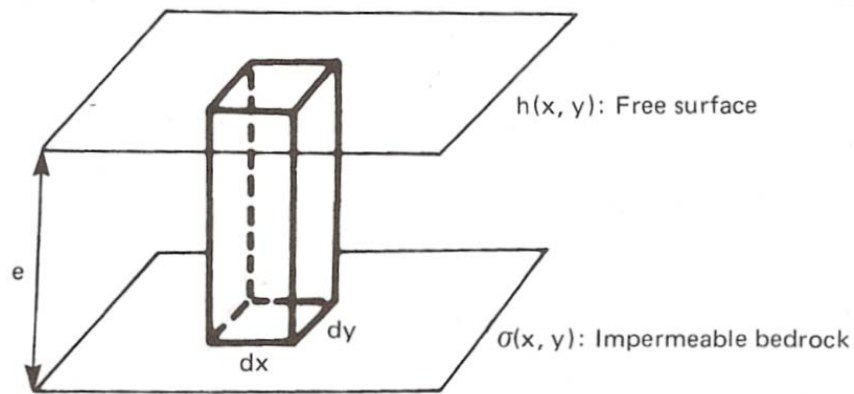


Figura 9: Volume di riferimento elementare in acquifero non-confinato [de Marsily, 1986]

In accordo all'assunzione di Dupuit si procede ad effettuare il bilancio di massa per il volume elementare, adottando un sistema di riferimento dato dalle direzioni principali di permeabilità si ottiene l'equazione di Boussinesq:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + q^* = n_e \frac{\partial h}{\partial t}$$

4. Il moto in un mezzo poroso parzialmente saturo

Inizialmente, sia l'acqua sia l'aria (fluidi immiscibili) si muovono simultaneamente negli spazi vuoti del mezzo poroso, insieme, eventualmente al vapore d'acqua. Le variazioni di temperatura e di concentrazione dei solidi disciolti nell'acqua possono influenzare la pressione di vapore dell'acqua e causare cambiamenti di fase e trasporto di vapore per diffusione. Nella trattazione che segue non si considereranno il movimento dell'acqua in fase di vapore, né il movimento dovuto ai gradienti di pressione osmotica legati alle differenze di concentrazione dei sali disciolti, né il movimento dovuto alle variazioni di temperatura. Si ipotizzerà inoltre che la matrice solida sia rigida e stabile ovvero non sia soggetta a fenomeni di consolidamento o subsidenza. Alcuni di tali fenomeni possono comunque, in alcune situazioni, diventare importanti e di conseguenza non possono essere trascurati. Si considera quindi solo il moto prodotto dalle variazioni di carico piezometrico dell'acqua, definito come:

$$\phi = z + \int \frac{dp_w}{\gamma_w}$$

dove il peso specifico dell'acqua (γ_w) è generalmente funzione della sua pressione p_w . Indagini sperimentali indicano che quando due fluidi si muovono simultaneamente in un mezzo poroso, ognuno di essi tende a percorrere il proprio tortuoso cammino secondo una rete di canali variabile con il grado di saturazione. Ne deriva che al diminuire del grado di saturazione del fluido non bagnante i canali di quel fluido si riducono fino a formare regioni isolate, dove il grado di saturazione del fluido bagnante assume il valore residuo. Analogamente, al diminuire del grado di saturazione del fluido bagnante esso diventa discontinuo fino a raggiungere il suo grado di saturazione minimo. Se ognuno dei due fluidi diventa discontinuo nel mezzo poroso non si può avere moto per nessuno di essi. Lo stesso principio può essere esteso al caso di tre o più fasi che si muovono contemporaneamente nel mezzo poroso.

Si può applicare il concetto di permeabilità, definito per il moto di un fluido in un mezzo poroso saturo, tenendo conto della presenza di una seconda fase che occupa parte dei vuoti del mezzo poroso. Naturalmente è necessario esprimere, per ognuna delle fasi, la

dipendenza della permeabilità dal grado di saturazione. Utilizzando la legge di Darcy, le equazioni del moto dell'aria (fase non bagnante) e dell'acqua (fase bagnante) assumono in un mezzo poroso non saturo anisotropo la forma (Frega et al., 2004):

$$q_{iw} = -\frac{k_{ijw}(S_w)}{\mu_w} \left[\frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right] = -k_{ij} \frac{k_{rw}(S_w)}{\mu_w} \left[\frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right]$$

$$q_{inw} = -\frac{k_{ijnw}(S_{nw})}{\mu_{nw}} \left[\frac{\partial p_{nw}}{\partial x_j} + \rho_{nw} g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right] = -k_{ij} \frac{k_{rnw}(S_{nw})}{\mu_{nw}} \left[\frac{\partial p_{nw}}{\partial x_j} + \rho_{nw} g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right]$$

con $i, j = 1, 2, 3$. I pedici w e nw indicano rispettivamente il fluido bagnante (*wetting*) e non bagnante (*nonwetting*). I termini $k_{ijw}(S_w)$ e $k_{ijnw}(S_w)$ rappresentano le permeabilità insature dei due fluidi e, possono essere definite come il prodotto della permeabilità a saturazione (k_{ij}) e delle permeabilità relative dei due fluidi (k_{rw} e k_{rnw}). Generalmente, le densità ρ_w e ρ_{nw} non sono costanti ma dipendono dalle pressioni dei due fluidi (p_w e p_{nw}). Anche se discutibile, si ipotizza che la permeabilità relativa sia espressa dalla stessa funzione per ognuna delle componenti che descrivono il mezzo poroso anisotropo. Nelle ipotesi di densità costanti dei due fluidi possono risciversi le equazioni precedenti come:

$$\mathbf{q}_w = -\frac{\mathbf{k}_w(S_w)}{\mu_w} \nabla(p_w + \gamma_w z) = -\frac{\mathbf{k}_w(S_w)\gamma_w}{\mu_w} \nabla\phi_w$$

$$\mathbf{q}_{nw} = -\frac{\mathbf{k}_{nw}(S_{nw})}{\mu_{nw}} \nabla(p_{nw} + \gamma_{nw} z) = -\frac{\mathbf{k}_{nw}(S_{nw})\gamma_{nw}}{\mu_{nw}} \nabla\phi_{nw}$$

Se si trascura inoltre il movimento dell'aria, o $\phi_{nw} = \phi_{air} = cost$, è possibile scrivere per il moto dell'acqua:

$$\mathbf{q}_w = -\frac{\mathbf{k}_w(S_w)}{\mu_w} \nabla(p_w + \gamma_w z) = -\frac{\mathbf{k}_w(S_w)\gamma_w}{\mu_w} \nabla(-p_c + \gamma_w z)$$

dove $p_c = -p_w$ e $\mathbf{k}_w(S_w)$ è la permeabilità effettiva dell'acqua. E' possibile introdurre il concetto di conduttività idraulica $\mathbf{K}_w(S_w) = \mathbf{k}_w(S_w)\gamma_w/\mu_w$ e scrivere, per $\rho_w = \gamma_w/g = \text{cost}$,

$$\mathbf{q}_w = -\mathbf{K}_w(S_w)\nabla\phi_w.$$

La relazione $p_c = p_c(\theta_w)$ non è unica a causa del fenomeno dell'isteresi e quest'ultima può diventare rilevante in alcuni problemi. Al diminuire del grado di saturazione i pori più grandi vengono drenati ed il moto ha luogo in quelli via via più piccoli. Questo causa una riduzione dell'area trasversale disponibile per il flusso e un aumento della tortuosità dei percorsi nel mezzo poroso.

Nelle ipotesi più generali, l'equazione di conservazione della massa fluida per il moto in un mezzo poroso non saturo è espressa dall'equazione:

$$\frac{\partial(\rho_w n S_w)}{\partial t} + \nabla(\rho_w \mathbf{q}) = 0.$$

L'equazione differenziale che descrive il moto di un fluido in un mezzo poroso parzialmente saturo, equazione di *Richards* [1931], è ottenuta combinando l'equazione di Darcy con l'equazione di continuità [*Philip*, 1969]. Per un moto monodimensionale verticale in un mezzo non-saturo, l'equazione di Richards è scritta:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\psi) \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} + 1 \right) \right)$$

Assumendo ψ come variabile indipendente ed introducendo il coefficiente globale di immagazzinamento $S(\psi)$, per descrivere un mezzo variabilmente saturo, si ottiene:

$$S(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_s K_r(\psi) \frac{\partial}{\partial z} (\psi + z) \right)$$

dove:

- ψ Carico capillare,
- t Tempo,
- z Coordinata verticale (orientata verso l'alto),
- $K(\psi)$ Conducibilità idraulica,
- K_s Conducibilità idraulica a saturazione,
- $K_r(\psi)$ Conducibilità idraulica relativa,
- $S(\psi)$ Coefficiente globale d immagazzinamento = $S(\psi) \equiv (d\theta/d\psi) + (\theta(\psi)/\phi)S_s$
- θ Contenuto d'acqua nel suolo,
- $d\theta/d\psi$ Capacità specifica,
- ϕ Porosità,
- S_s Coefficiente specifico di immagazzinamento.

Nell'equazione la conducibilità idraulica, $K(\psi)$, risulta espressa dal prodotto tra la permeabilità idraulica a saturazione, K_s , e la permeabilità relativa, $K_r(\psi)$. Il coefficiente di immagazzinamento specifico tiene conto delle deformazioni del mezzo poroso e risulta un componente importante nella modellazione del moto nella zona non-satura. L'equazione di Richards risulta essere non lineare a causa della dipendenza, dalla variabile ψ , della capacità specifica e della conducibilità idraulica relativa.

5. Il trasporto di massa nella zona satura

Alla base della propagazione di un fenomeno di contaminazione nel suolo e nei corpi idrici sotterranei stanno i processi di trasporto di massa nella zona satura del suolo e del sottosuolo. Durante il trasporto di massa un generico contaminante subisce svariati processi di trasformazione chimico-fisica e/o biologica i quali causano due tipi di risultati:

- l'attenuazione della concentrazione degli inquinanti;
- la diminuzione della velocità degli inquinanti.

Il trasporto di massa di una sostanza chimica nel corpo idrico sotterraneo è soggetto, come soluto, ai processi di advezione, dispersione meccanica e diffusione molecolare.

L'advezione è un fenomeno di trasferimento di una sostanza chimica per effetto del moto dell'acqua nella quale si trova disciolta, lungo la direzione del flusso, con velocità uguale a quella effettiva del liquido interstiziale;

La dispersione meccanica (Figura 10, Figura 11) è un fenomeno di miscelazione del soluto causata:

- longitudinalmente (a), dalle disomogeneità delle velocità delle molecole nel mezzo poroso lungo la direzione del flusso. A causa della viscosità infatti alcune particelle di soluto e di solvente si muovono più lentamente della media della massa;
- trasversalmente (b), in direzione normale rispetto al vettore velocità macroscopica del fluido interstiziale, dalla tortuosità dei percorsi dei pori del terreno;

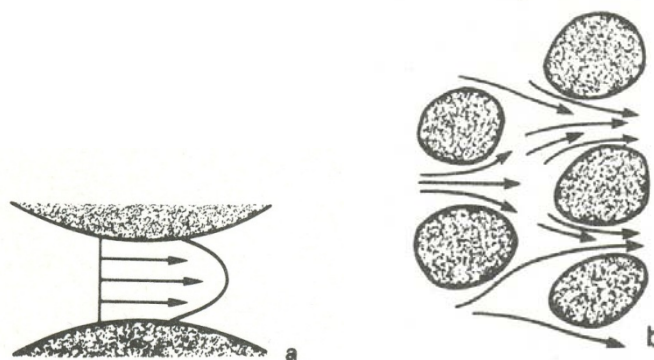


Figura 10: Comportamento dei filetti fluidi tra i grani di terreno [Chiesa G., 1988]

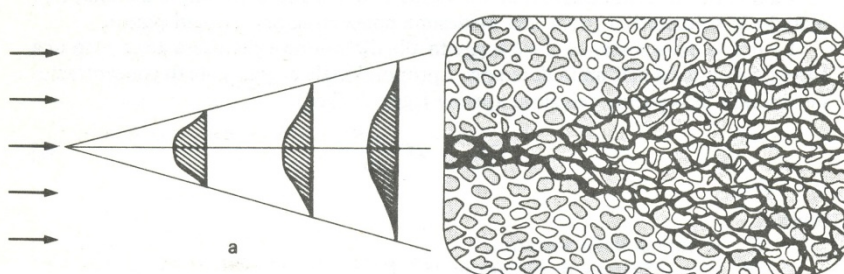


Figura 11: Schema della dispersione laterale dei filetti fluidi in un terreno granulare [Chiesa G., 1988].

La diffusione molecolare è un processo per il quale una sostanza chimica tende a migrare verso regioni a minore concentrazione rispetto a quella in cui si trova, anche in assenza di moto idrico. Lo studio del trasporto di massa nell'acquifero segue impostazioni assai diverse a seconda che si assuma o meno la non reattività, o conservatività, del soluto.

Di seguito vengono descritte le equazioni che descrivono i singoli fenomeni.

5.1. Convezione

Tale fenomeno si ha dove le distanze disciolte sono trasportate dal fluido attraverso il suo spostamento. Se si assume che il trasporto è governato solo dal fenomeno della convezione nella frazione di fluido che si muove, l'equazione di trasporto risultante si ottiene da un semplice bilancio di massa applicata, su scala macroscopica, al REV (Figura 12).

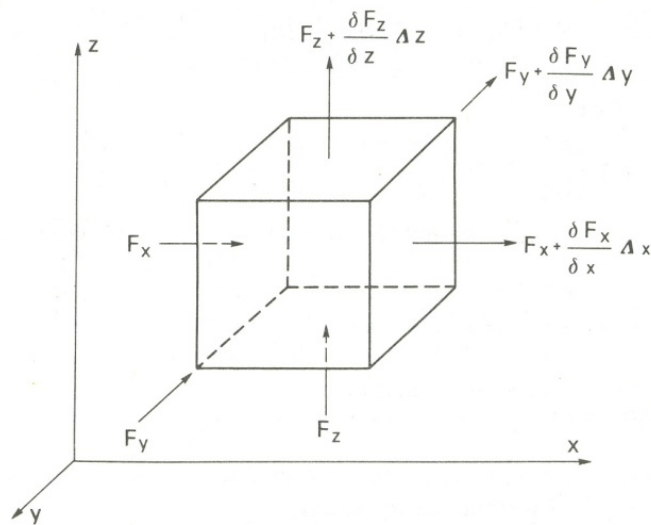


Figura 12: Schema di un elemento di falda soggetto al flusso di acqua inquinata [Chiesa G., 1988]

È proprio alla convezione che si attribuisce quel fenomeno per cui, se si effettua un'immissione, all'istante t_0 , di un tracciante a concentrazione C_0 , nella sezione x_0 di un tubo di flusso con velocità media u , la stessa concentrazione C_0 , si ritroverà nella sezione $x_1 = x_0 + u \cdot \Delta t$.

Il bilancio di massa di soluto impone che il flusso di massa entrante in un volume elementare in un dato intervallo di tempo è pari a quello uscente a meno di una variazione di massa nello stesso intervallo di tempo.

Il flusso di massa che attraversa il contorno del volume elementare è dato dalla seguente relazione:

$$\int_{\Sigma} C \bar{U} \cdot \underline{n} d\sigma$$

dove si è indicato con:

- C la concentrazione (volumetrica) del soluto;
- \bar{U} la velocità media di Darcy;
- \underline{n} la normale alla superficie di contorno;

La massa di soluto contenuta nel volume elementare D e' pari a:

$$\int_D n_c C dv$$

dove si è indicato con:

n_c la porosità cinematica del mezzo poroso;

La variazione di massa nell'unità di tempo può essere così posta:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D n_c C dv = \int_D n_c \frac{\partial C}{\partial t} dv$$

Il passaggio dalla prima forma alla seconda è reso lecito dalla legge di Leibnitz poiché D e' fisso e n_c è assunta costante. L'equazione di bilancio di massa diventa:

$$\int_{\Sigma} C \bar{U} \cdot \underline{n} d\sigma = \int_D n_c \frac{\partial C}{\partial t} dv$$

Mediante la regola di Ostrogradsky si può trasformare l'integrale di superficie in un integrale di volume e così:

$$-\int_D \nabla \cdot (C \bar{U}) dv = \int_D n_c \frac{\partial C}{\partial t} dv$$

Portando fuori il segno di integrale su ambo i lati, essendo D arbitrario, si ottiene:

$$-\nabla \cdot (C \bar{U}) = n_c \frac{\partial C}{\partial t}$$

che è l'equazione di bilancio per la sola convezione.

5.2. Diffusione molecolare

Tale fenomeno fisico è legato all'agitazione molecolare. In un fluido immobile il moto Browniano proietta le particelle in tutte le direzioni dello spazio. Se la concentrazione del fluido è uniforme nello spazio, presi due intorni nello spazio, questi mandano, in media, lo stesso numero di particelle di soluto verso l'altro, e l'agitazione molecolare non cambia la concentrazione della soluzione. Comunque, se la concentrazione della soluzione non è uniforme i punti con maggiore concentrazione mandano, in media, un maggior numero di particelle nello spazio rispetto ai punti con minore concentrazione. Il risultato di tale agitazione molecolare è che alcune particelle sono trasferite da zone a più alta concentrazione a punti con concentrazione inferiore. Fick ha trovato che il flusso di particelle di soluto in un fluido immobile è proporzionale al gradiente delle concentrazioni, attraverso la nota relazione:

$$\phi = -d_0 \nabla(C)$$

dove d_0 è chiamato coefficiente di diffusione molecolare e vale:

$$d_0 = \frac{RT}{N} \frac{1}{6\pi\mu r}$$

dove si è indicato con:

- R costante dei gas perfetti
- μ viscosità dinamica del fluido
- T temperatura in gradi Kelvin
- N numero di Avogadro
- r raggio medio degli aggregati molecolari

Per tenere conto sia del fenomeno convettivo che diffusivo l'equazione di bilancio diventa:

$$\int_{\Sigma} C\bar{U} \cdot \underline{n} d\sigma + \int_{\Sigma} n_c \phi \cdot \underline{n} d\sigma = - \int_D \nabla \cdot (C\bar{U}) dv - \int_D \nabla \cdot (n_c \phi) dv$$

La porosità totale entra qui in gioco perché l'integrale del flusso diffusivo su Σ è nullo sulla parte solida $[(1-n_e)\Sigma]$ e diversa da zero sui pori $[n\Sigma]$, mentre la velocità di Darcy è definita come se tutta l'area fosse aperta. Sostituendo si ottiene:

$$\nabla \cdot (n_e d_0 \nabla C - C \bar{U}) = n_e \frac{\partial C}{\partial t}$$

5.3. Dispersione cinematica

Tale fenomeno di mescolamento è legato principalmente alla eterogeneità delle velocità microscopiche all'interno dei mezzi porosi su qualsiasi scala di osservazione (Figura 13).

All'interno dei pori le velocità nella parte di fluido in moto non distribuite uniformemente; questo causa una propagazione più veloce lungo l'asse dei pori comparata con quella dovuta alla sola convezione.

La diversa grandezza dei pori genera dei gradienti di velocità che danno origine ad una maggiore diluizione ed una propagazione trasversale alla direzione principale del moto.

La divisione del trasporto in un termine convettivo, legato alla velocità di Darcy, ed il termine dispersivo, integrante gli effetti delle eterogeneità, è alquanto arbitrario.

La formulazione matematica adotta una legge di trasporto mediante dispersione molto simile a quella di Fick che tiene conto del fenomeno di mescolamento:

$$\phi = -\underline{\underline{D}} \nabla C$$

che è applicata a tutta l'intera sezione del mezzo, così come la velocità di Darcy, ma con un coefficiente di dispersione che ha queste caratteristiche:

- è un tensore simmetrico del secondo ordine:

$$D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix}$$

- le direzioni principali (autovettori) sono la direzione del vettore velocità (direzione longitudinale) e le altre due direzioni ortogonali;
- i valori dei coefficienti diagonali (autovalori) sono variabili e dipendono dalla velocità.

Se si assume un sistema di riferimento con gli assi cartesiani coincidenti con le direzioni principali di anisotropia del mezzo (direzione degli autovettori della matrice di D), i termini misti della matrice del tensore sopra riportata si annullano e, per mezzo isotropo e omogeneo, si può scrivere:

$$\underline{\underline{D}} = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix}$$

dove D_L e' il coefficiente di dispersione longitudinale, e D_T i coefficienti di dispersione trasversale. E' facile notare che D e' anisotropo anche se il mezzo fosse isotropo: l'anisotropia del tensore dispersione sta nel fatto che la velocità di dispersione è maggiore lungo la direzione del moto.

Nel dominio delle velocità usuali i coefficienti di dispersività assumono tale forma generale:

$$D_L = nd_0 + \alpha_L |U| \quad D_T = nd_0 + \alpha_T |U|$$

dove

d_0 coefficiente di diffusione molecolare

α_L coefficiente di dispersività longitudinale

α_T coefficiente di dispersività trasversale

Allora l'equazione di trasporto, che adesso include la dispersione cinematica e la diffusione molecolare, diventa:

$$\nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla C - \overline{CU}) = n \frac{\partial C}{\partial t}$$

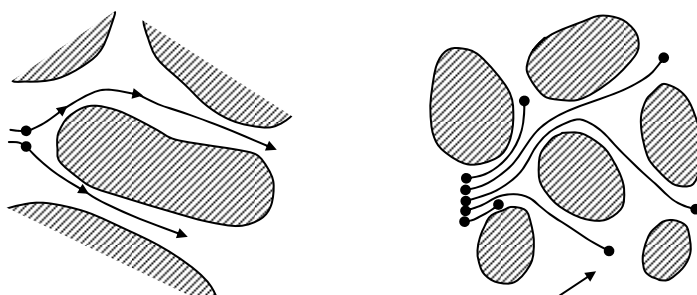


Figura 13: Percorsi tortuosi a cui è costretto il flusso idrico sotterraneo. [Troisi S. e al., 1985]

6. Il trasporto di massa nella zona non satura

Nella fase aeriforme l'umidità, in fase vapore, si sposta per diffusione da zone in cui la pressione di vapore è alta verso zone in cui la pressione di vapore è bassa. Con le consuete considerazioni sulla continuità della massa di soluto, si ottiene l'equazione del trasporto in un mezzo non saturo, che in forma esplicita è:

$$\begin{aligned} \theta \frac{\partial C}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[\theta \left(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial y} \left[\theta \left(D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \left(D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] + \\ & - \theta \left[\frac{\partial C}{\partial x} V_x + \frac{\partial C}{\partial y} V_y + \frac{\partial C}{\partial z} V_z \right] \end{aligned}$$

con:

θ contenuto d'acqua;

V_x, V_y, V_z componenti del vettore velocità effettiva, rispettivamente, in direzione x, in direzione y e in direzione z.

Diagonalizzando il tensore di dispersione:

$$\begin{aligned} \theta \frac{\partial C}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[\theta \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\theta \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] + \\ & - \theta \left[\frac{\partial C}{\partial x} V_x + \frac{\partial C}{\partial y} V_y + \frac{\partial C}{\partial z} V_z \right] \end{aligned}$$

e nel caso di rappresentazione bidimensionale:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\theta \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \theta \left(V_x \frac{\partial C}{\partial x} + V_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)$$

Così pure nel caso monodimensionale l'equazione in esame può essere esplicitata con la seguente espressione:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - V_z \frac{\partial C}{\partial z}$$

Nell'ipotesi di mezzo omogeneo e isotropo e considerando, per semplicità, il caso bidimensionale, il coefficiente di dispersione idrodinamica può scriversi:

$$D_{ii} = D_L \frac{V_i V_i}{V^2} + D_T \frac{V_j V_j}{V^2} + D_0 \tau$$

ove

$i \neq j$ e $i, j = 1, 2$;

$D_L = \alpha_L \cdot V + D_0$;

$D_T = \alpha_T \cdot V + D_0$;

avendo indicato con:

D_{ii} coefficiente di dispersione idrodinamica [$L^2 T^{-1}$];

D_L coefficiente di dispersione longitudinale [$L^2 T^{-1}$];

D_T coefficiente di dispersione trasversale [$L^2 T^{-1}$];

α_L dispersività longitudinale [L];

α_T dispersività trasversale [L];

τ tortuosità [0];

V_i componente della velocità lungo x [$L T^{-1}$];

V_j componente della velocità lungo y [$L T^{-1}$].

Analogamente, ripetendo le considerazioni sopra riportate nella forma monodimensionale, si può scrivere:

$$D_L = \alpha_L V + D_0$$

dove α_L e α_T , sono ancora parametri caratteristici del terreno, da determinare sperimentalmente per mezzo di prove con traccianti; poiché ci si riferisce ad un mezzo non

saturo, i valori che questi possono assumere risultano fortemente influenzati dal contenuto d'acqua (θ), ossia dal grado di saturazione.

La massa del soluto totale è la somma del soluto disciolto θC e della massa del soluto associato alla fase solida $B_d C^*$, cioè del soluto sorbito. Quindi l'equazione di continuità per il soluto è:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(B_d C^*)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_L \theta \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{\partial(\theta v C)}{\partial z}$$

Per tenere conto di eventuali perdite o immissioni di soluto nel dominio del flusso, si introduce nell'equazione precedente la funzione di sorgente e/o perdita Y , definibile come:

$$Y = -\eta_l \theta C^n - \eta_s B_d C^{*n} + \xi_l \theta C^m + \xi_s B_d C^{*m}$$

in cui i primi due termini del secondo membro indicano le reazioni di decadimento e gli ultimi due termini le reazioni di produzioni di soluto.

η_l, η_s = coefficienti di velocità delle reazioni di decadimento rispettivamente nella fase liquidi e nella fase solida

ξ_l, ξ_s = coefficienti di velocità delle reazioni di produzione rispettivamente nella fase liquidi e nella fase solida

n, m = ordini di velocità delle reazioni, rispettivamente di decadimento e di produzione.

Pertanto l'equazione di trasporto di massa advettivo-dispersivo per la zona insatura è espressa dalla relazione:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(B_d C^*)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_L \theta \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{\partial(\theta v C)}{\partial z} + Y$$

Si può osservare che per θ, B_d e D_s costanti l'equazione ritorna ad essere:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{B_d}{\theta} \frac{\partial C^*}{\partial t} + \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{rx}$$

cioè l'equazione del trasporto advettivo-dispersivo in un mezzo poroso saturo.

7. Formulazione del problema matematico

Le leggi fisiche sono generalmente tradotte in equazioni matematiche utilizzando una formulazione differenziale. Le equazioni differenziali esaminate nei precedenti paragrafi conducono alla individuazione del modello più idoneo, in base a semplificazioni ed assunzioni, per rappresentare tale realtà in termini matematici. La soluzione di un problema descritto da una equazione differenziale alle derivate parziali comporta la necessità di definire ed introdurre elementi che individuano in maniera completa il problema che si descrive. Tali elementi riguardano essenzialmente la geometria del dominio, i parametri che regolano il fenomeno fisico e la definizione di opportune condizioni al contorno ed iniziali.

Le condizioni iniziali sono date dalla indicazione del valore della variabile incognita in ogni punto del dominio di moto considerato.

Le condizioni al contorno possono essere invece di diversi tipi:

- assegnazione del valore assunto dalla variabile incognita nei punti di frontiera del dominio di moto (carico assegnato). E' riconducibile alla situazione in cui si ha un accumulo di acqua sulla superficie del suolo e che esercita una certa pressione, come ad esempio la presenza di un fiume o di un lago. Questa è una condizione al contorno del primo tipo (o di Dirichlet);
- assegnazione di un flusso normale in un punto del dominio di moto. E' verificabile, ad esempio, quando la pioggia raggiunge la superficie del suolo il quale, è assunto come una frontiera per il dominio del moto non saturo. E' una condizione al contorno del secondo tipo (o di Neumann);
- presenza di una frontiera semipermeabile (flusso e carico assegnati). Tale situazione è riscontrabile quando si ha uno strato sottile di permeabilità ridotta sulla superficie del suolo.

La presenza di un pozzo di emungimento, ad esempio, può essere definita con una condizione al contorno appena descritta, detta del terzo tipo (o di Cauchy).

Le condizioni iniziali e le condizioni al contorno sono solo la trasposizione in termini matematici della realtà fisica del problema di moto che si sta descrivendo pertanto, devono essere determinate sul campo e successivamente tradotte in termini matematici.

Naturalmente, affinché il problema matematico sia idoneo a rappresentare il fenomeno fisico deve verificarsi che:

- ✓ la soluzione deve esistere;
- ✓ la soluzione deve essere unicamente determinata;
- ✓ la soluzione deve dipendere in modo continuo dai dati.

Ogni problema che soddisfi i requisiti elencati è detto ben posto.

La soluzione analitica di una funzione di campo esiste raramente, per situazioni molto semplici. In generale, si deve ricorrere alla soluzione numerica. Per trovare una soluzione numerica, si richiede invece una formulazione finita (discreta) e quindi il contenuto geometrico deve essere, in un modo o nell'altro, ricostruito.

Capitolo II – Approccio discreto ai problemi di flusso e trasporto in un mezzo poroso

La formulazione differenziale dei fenomeni esaminati in questo lavoro di tesi non conduce ad una soluzione esatta del problema fisico, e solo in alcuni casi elementari, a geometria semplice, riusciamo ad ottenere una soluzione esatta (soluzione analitica). Nelle quasi totalità dei problemi fisici siamo invece costretti ad abbandonare il contesto differenziale e, con uno dei metodi numerici, arrivare ad una formulazione algebrica ed ottenere quindi una soluzione approssimata. L'utilizzo dei metodi di discretizzazione comporta di conseguenza la perdita di quelle grandezze che sono alla base della formulazione differenziale (divergenze, rotore, gradiente, ecc.) allo scopo di recuperare il contenuto geometrico, necessario per la formulazione algebrica.

Un approccio discreto permette invece di giungere direttamente ad un sistema algebrico dal quale ottenere la soluzione approssimata. Questa alternativa è basata su una formulazione del problema fisico in termini discreti, in modo da preservare il contenuto fisico e geometrico del problema originario (Figura 14). Lo scopo di tale approccio è essenzialmente quello di conservare l'attenzione sull'aspetto fisico del problema, pensare cioè ad un metodo numerico per descrivere un problema fisico, e non ad una particolare formulazione matematica.

I vantaggi di questo approccio sono diversi. Esso fornisce un modo univoco per la discretizzazione dei problemi fisici, e di conseguenza è applicabile a diverse teorie. Per il modo con il quale è concepita la formulazione discreta del problema, questo approccio preserva il significato fisico del problema originario. In definitiva, una formulazione discreta diretta delle leggi di campo permette di evitare l'introduzione della formulazione differenziale ed affrontare direttamente la soluzione delle equazioni algebriche.

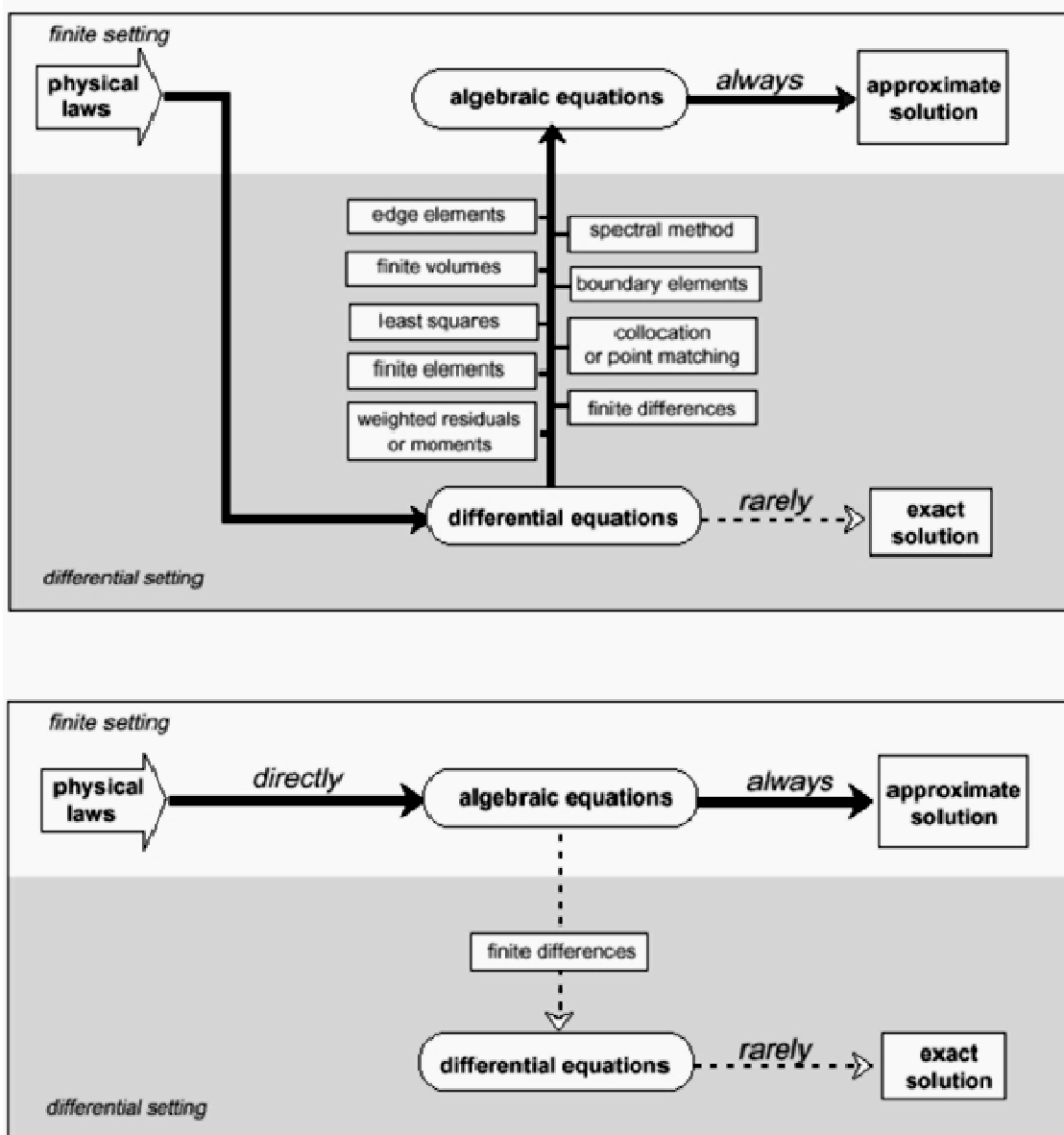


Figura 14: Approccio differenziale (sopra) e approccio discreto (sotto) [Tonti, 1997]

1. Quantità fisiche

La formulazione matematica delle leggi fisiche scaturisce dalla stessa esistenza delle grandezze fisiche. Pertanto se noi ne cerchiamo una formulazione finita diretta, dobbiamo rivedere queste ultime. Tre classificazioni sono in uso.

La prima classificazione delle grandezze fisiche è quella di *costanti fisiche* e *variabili fisiche*. Le costanti fisiche sono quelle quantità che descrivono la natura di un sistema o di un materiale e queste sono quelle tabulate nei libri e nei manuali: esse includono le costanti universali, le costanti dei materiali, i parametri di sistema, ecc. Le variabili fisiche specificano un particolare stato del sistema, la configurazione attuale di un sistema, le forze che agiscono su di esso, le sorgenti di un campo, i molti tipi di energia di un sistema (l'energia interna, quella cinetica, quella potenziale, l'entalpia, ecc.).

Introdurre una formulazione discreta per un generico problema fisico, implica da parte nostra cercare una formulazione completamente indipendente da quella differenziale. Questo significa introdurre le *funzioni di campo* ed evitare i processi di integrazione e, di conseguenza sostituire il termine "variabile integrale" con il termine "*variabile globale*". È importante ricordare che, per ogni problema fisico, otteniamo una misura sperimentale soprattutto di variabili globali. Le variabili locali sono necessarie in una formulazione differenziale in quanto, la nozione di derivata è naturalmente riferita a funzioni di punto. Al contrario le variabili globali sono quantità riferite al sistema, ad elementi spazio-temporali (punti, linee, superfici, volumi, istanti ed intervalli di tempo) e non solo a punti o istanti di tempo, sono cioè delle funzioni di dominio.

Un notevole vantaggio delle variabili globali è rappresentato dal fatto che conservano la continuità anche attraverso la superficie di separazione di due materiali con caratteristiche diverse mentre, le variabili locali sono discontinue. Questo implica che la formulazione differenziale è limitata a regioni in cui è conservata l'omogeneità del materiale: è necessario dividere il dominio in sottodomini ed introdurre per ogni materiale opportune condizioni di passaggio. Questo mostra come la formulazione differenziale impone una condizione di derivabilità sulle variabili locali che risulta però notevolmente restrittiva dal punto di vista fisico.

Al contrario la formulazione discreta, basata sulle variabili globali, accetta la discontinuità tra materiali senza la necessità di introdurre condizioni di regolarità.

1.1 Variabili di configurazione, di sorgente ed energetiche

In ogni teoria della fisica possiamo dividere le variabili in tre diverse categorie:

- ✓ Variabili di configurazione: sono le variabili che forniscono una descrizione del campo o del sistema. Queste variabili sono legate ad altre attraverso operazioni di somma, di differenza, di limite, di derivata e di integrale.
- ✓ Variabili di sorgente: sono le variabili che descrivono le sorgenti di campo e le forze agenti sul sistema. Queste variabili sono legate ad altre attraverso operazioni di somma, di differenza, di limite, di derivata e di integrale.
- ✓ Variabili energetiche: sono le variabili ottenute dal prodotto di una variabile di configurazione e di sorgente.

Una conferma dell'importanza di questa classificazione è fornita dalla possibilità di definire delle equazioni costitutive: equazioni che legano variabili di configurazione e variabili sorgente e contengono informazioni sui parametri che descrivono il materiale ed il sistema.

1.2 Variabili fisiche e geometriche

Esiste uno stretto legame tra variabili fisiche ed elementi geometriche. E' noto infatti che le variabili globali sono naturalmente associati ad elementi dello spazio e del tempo, cioè punti, linee, superfici, volumi, istanti ed intervalli. E' necessario in ogni caso, prima di analizzare tale associazione, introdurre il concetto orientazione di un elemento spaziale.

Nella formulazione differenziale è fondamentale il ruolo assunto dai punti: le variabili locali, come già detto, sono funzioni del punto. A tal fine è necessaria l'introduzione del *sistema di coordinate*.

Nella formulazione discreta non vengono presi in considerazione solo punti (**P**), ma anche linee (**L**), superfici (**S**) e volumi (**V**). Noi chiameremo questi ultimi *elementi spaziali*. La naturale sostituzione del sistema di coordinate è il *complesso di celle*.

Gli elementi spaziali e temporali possono essere dotati di orientazione.

- ✓ Orientazione interna. Con riferimento alla Figura 15, quando l'orientazione di un elemento spaziale è effettuata sull'elemento stesso si è definita una orientazione interna.

- ✓ Orientazione esterna. Quando l'orientazione di un elemento spaziale richiede l'indicazione della dimensione dello spazio in cui l'elemento è immerso, si è definita una orientazione esterna.

Contrariamente alla orientazione interna, che è intrinseca, quella esterna dipende dalle dimensioni dello spazio in cui l'elemento si trova (Figura 16). Ad esempio l'orientazione esterna di un segmento di linea immerso in uno spazio tridimensionale è un senso di rotazione attorno al segmento; in uno spazio bidimensionale è una freccia che attraversa il segmento, ecc..

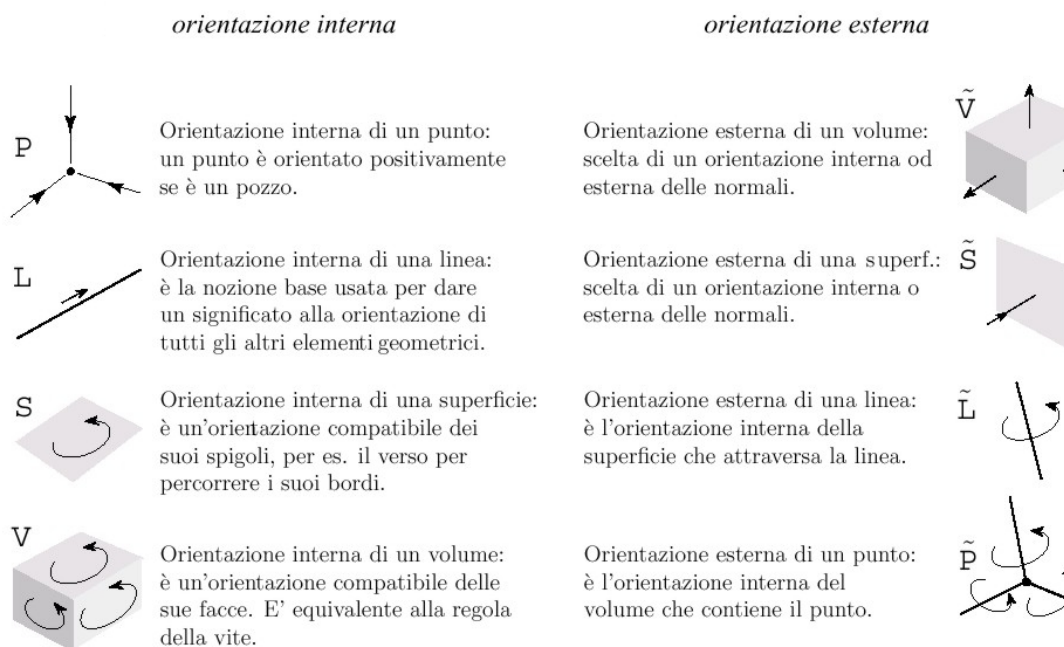


Figura 15: Orientazione interna ed esterna nello spazio tridimensionale [Tonti, 2000]

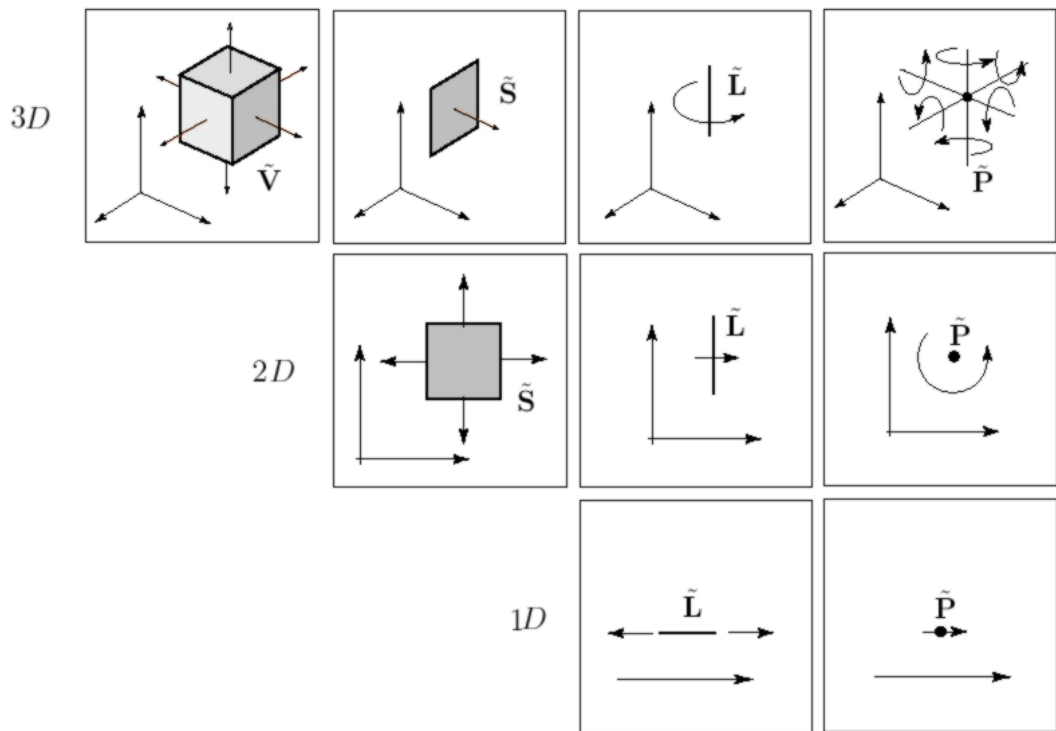


Figura 16: Orientazione esterna di un elemento spaziale [Tonti, 2000]

1.3 Complesso di celle

Abbiamo già accennato al fatto che nella formulazione discreta, che utilizza variabili globali, il sistema di coordinate, tipico della formulazione differenziale, è naturalmente sostituito dal complesso di celle. Utilizzando le nozioni della topologia algebrica, che utilizza i complessi di celle, i vertici, gli spigoli, le facce e le celle sono considerate come celle di dimensione 0, 1, 2 e 3 rispettivamente.

Dato un complesso di celle, che diremo primale, considerando un punto interno ad ogni 3-cella, per esempio il suo baricentro, è possibile costruire un secondo complesso di celle, che indicheremo duale, prendendo questi punti come vertici del complesso duale (Figura 17).

Se il complesso primale è formato da quadrati (in 2D) o da cubi (in 3D) anche il complesso duale risulterà formato da quadrati e da cubi. Il complesso duale è semplicemente sfalsato rispetto a quello primale. La scelta dei punti entro la n -cella, da considerare come 0-cella del duale, è completamente arbitraria e può essere imposta da scelte computazionali. Anche la modalità con cui congiungere i centri di due celle adiacenti è arbitraria e, in merito a questo aspetto si illustreranno nel Capitolo IV le motivazioni delle scelte effettuate.

Dato un complesso di celle possiamo attribuire a tutti i suoi elementi una orientazione interna. Indicheremo questo complesso come primale. Individuato un complesso duale, ottenuto ad esempio con una suddivisione baricentrica, tutti i suoi elementi saranno dotati di una orientazione esterna.

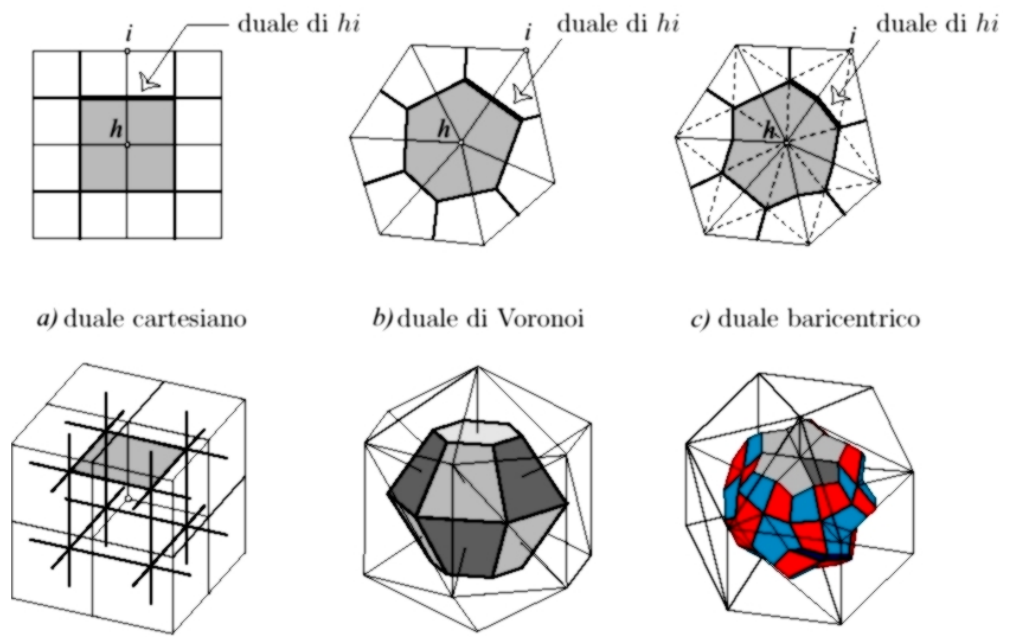


Figura 17: Complesso di celle primale e duale [Tonti, 2000]

2. Formulazione discreta delle equazioni

Con riferimento ai concetti già introdotti relativi al metodo delle celle, viene fornita una formulazione discreta delle equazioni che regolano il moto di un fluido ed il trasporto di massa in un mezzo poroso.

2.1 La legge di Darcy

La formulazione finita diretta della equazione di Darcy ottenuta su celle cubiche 3D è un caso particolare della più generica formulazione finita diretta della stessa equazione ottenuta su tetraedri.

Il risultato ottenuto ci consentirà di impiegare tale forma discreta della equazione di Darcy per la soluzione numerica del problema del flusso idrico sotterraneo in uno spazio tridimensionale, senza passare dalla forma differenziale della stessa equazione.

Inizialmente si sceglie un complesso primale di prismi tetraedrici e si costruisce il duale utilizzando come vertici i baricentri di ciascun tetraedro (Voronoi, Figura 18):

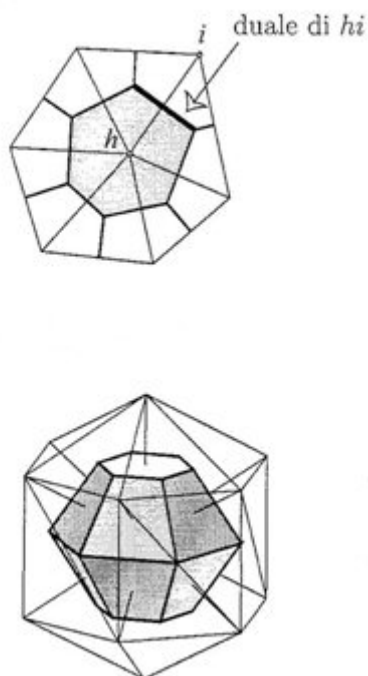


Figura 18: Duale di Voronoi

Con riferimento all'elemento generico nello spazio (Figura 19), si è ipotizzato che in ogni tetraedro la variabile H (carico piezometrico), sia esprimibile da una relazione del tipo:

$$H(x, y, z) = a + g_x x + g_y y + g_z z$$

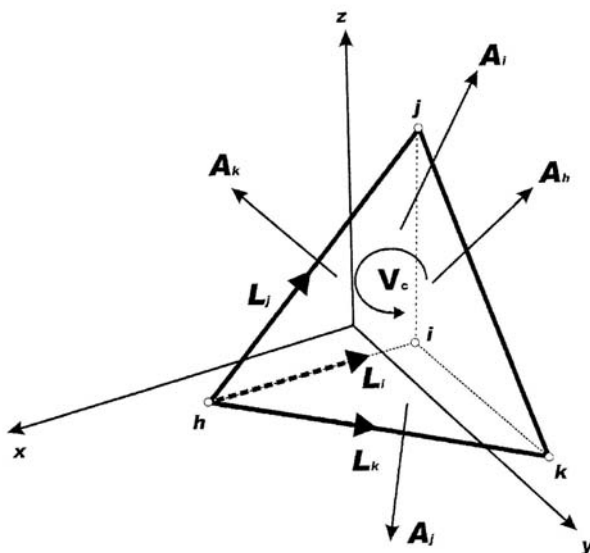


Figura 19: Tetraedro generico nello spazio

Nella quale i coefficienti g_x , g_y e g_z sono le componenti del vettore gradiente. Con riferimento all'elemento spaziale, ed indicando con h, i, j e k i vertici del tetraedro e con L_i, L_j e L_k i tre lati uscenti dal vertice h , si può scrivere:

$$H_i - H_h = g_x(x_i - x_h) + g_y(y_i - y_h) + g_z(z_i - z_h)$$

$$H_j - H_h = g_x(x_j - x_h) + g_y(y_j - y_h) + g_z(z_j - z_h)$$

$$H_k - H_h = g_x(x_k - x_h) + g_y(y_k - y_h) + g_z(z_k - z_h)$$

In forma matriciale assume la forma:

$$\begin{bmatrix} L_{ix} & L_{iy} & L_{iz} \\ L_{jx} & L_{jy} & L_{jz} \\ L_{kx} & L_{ky} & L_{kz} \end{bmatrix}_c \begin{Bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{Bmatrix}_c = \begin{Bmatrix} H_i - H_h \\ H_j - H_h \\ H_k - H_h \end{Bmatrix}_c$$

La soluzione del sistema, mediante la regola di Cramer, fornisce:

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{g}_x \\ \mathbf{g}_y \\ \mathbf{g}_z \end{Bmatrix}_c = \frac{1}{3V^c} \begin{bmatrix} A_{hx} & A_{ix} & A_{jx} & A_{kx} \\ A_{hy} & A_{iy} & A_{jy} & A_{ky} \\ A_{hz} & A_{iz} & A_{jz} & A_{kz} \end{bmatrix} = \begin{Bmatrix} H_h \\ H_i \\ H_j \\ H_k \end{Bmatrix}$$

Ovvero:

$$\mathbf{g}_c = \frac{1}{3V^c} A_c H_c$$

L'equazione di Darcy esprime il legame tra il flusso q ed il gradiente g :

$$\begin{Bmatrix} q_x(x, y, z) \\ q_y(x, y, z) \\ q_z(x, y, z) \end{Bmatrix}_c = - \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{g}_x(x, y, z) \\ \mathbf{g}_y(x, y, z) \\ \mathbf{g}_z(x, y, z) \end{Bmatrix}_c$$

Ovvero:

$$q_c = -k_c \mathbf{g}_c$$

Passando ad un dominio cubico, il complesso primale è costituito da celle cubiche e si costruisce il duale considerando come vertici i baricentri dei cubi (Cartesiano, Figura 20):

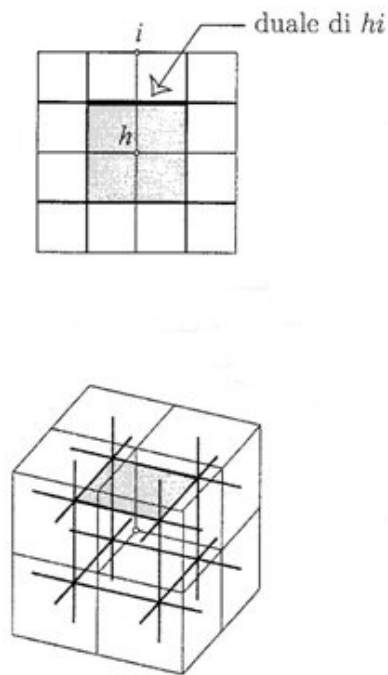


Figura 20: Duale cartesiano

Con riferimento all'elemento generico nello spazio (Figura 21), si è ipotizzato che in ogni cubo la variabile H (carico piezometrico), sia esprimibile da una relazione del tipo:

$$H(x, y, z) = a + g_x x + g_y y + g_z z$$

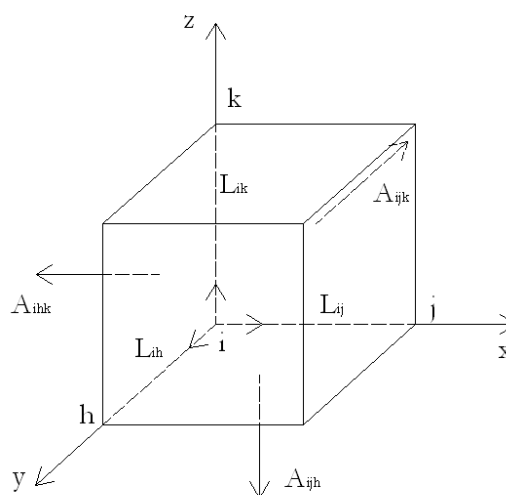


Figura 21: Elemento cubico nello spazio

Nella quale i coefficienti g_x , g_y e g_z sono le componenti del vettore gradiente. Con riferimento all'elemento spaziale, ed indicando con h, i, j e k i vertici del tetraedro e con L_{ij} , L_{ih} e L_{ik} i tre lati uscenti dal vertice h , si può scrivere:

$$H_i - H_j = g_x(x_i - x_j) + g_y(y_i - y_j) + g_z(z_i - z_j)$$

$$H_i - H_h = g_x(x_i - x_h) + g_y(y_i - y_h) + g_z(z_i - z_h)$$

$$H_i - H_k = g_x(x_i - x_k) + g_y(y_i - y_k) + g_z(z_i - z_k)$$

$$H_i - H_j = g_x(x_i - x_j) + 0 + 0$$

$$H_i - H_h = 0 + g_y(y_i - y_h) + 0$$

$$H_i - H_k = 0 + 0 + g_z(z_i - z_k)$$

In forma matriciale assume la forma:

$$\begin{bmatrix} -L_{ij} & 0 & 0 \\ 0 & -L_{ih} & 0 \\ 0 & 0 & -L_{ik} \end{bmatrix}_c \begin{Bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{Bmatrix}_c = \begin{Bmatrix} H_i - H_j \\ H_i - H_h \\ H_i - H_k \end{Bmatrix}_c$$

La soluzione del sistema fornisce:

$$g_x = -\frac{(H_i - H_j)}{L_{ij}}$$

$$g_y = -\frac{(H_i - H_h)}{L_{ih}}$$

$$g_z = -\frac{(H_i - H_k)}{L_{ik}}$$

L'equazione di Darcy esprime il legame tra il flusso q ed il gradiente g :

$$q_x = -k \left[-\frac{(H_i - H_j)}{L_{ij}} \right] = -k \frac{(H_j - H_i)}{L_{ij}}$$

$$q_y = -k \left[-\frac{(H_i - H_h)}{L_{ih}} \right] = -k \frac{(H_h - H_i)}{L_{ih}}$$

$$q_z = -k \left[-\frac{(H_i - H_k)}{L_{ik}} \right] = -k \frac{(H_k - H_i)}{L_{ik}}$$

Generalizzando la soluzione ottenuta per la cella cubica, con riferimento alla notazione riportata in Figura 22, potremo scrivere:

$$q_\alpha = -k \frac{(H_\alpha - H_h)}{L_\alpha}$$

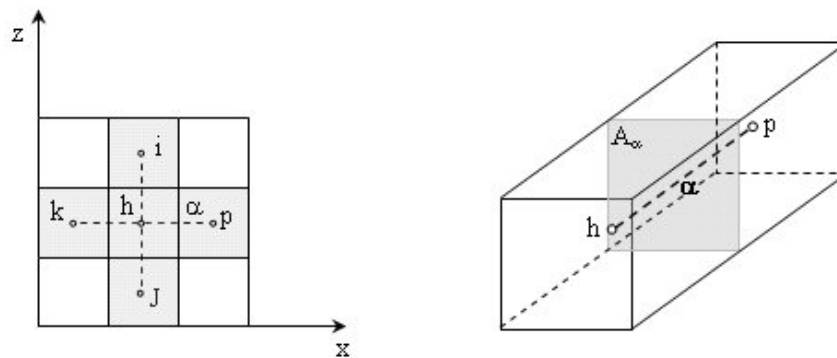


Figura 22: Riferimenti spaziali per cella cubica

2.2 Formulazione discreta del flusso idrico sotterraneo

Partendo dall'equazione di bilancio di massa in un mezzo poroso, applicato ad una cella cubica, si può valutare l'espressione in termini finiti dell'equazione del moto in acquifero non confinato. Quest'ultima esprime la relazione che permette di valutare il carico in tutte le celle in cui esso non è assegnato (interne o di bordo).

In condizioni di saturazione, si impone il bilancio di massa in ogni cella del complesso in cui si suddivide il dominio di moto, che in questo caso corrispondono ad elementi cubici (Figura 21).

Sia in condizioni sature che insature si può scrivere il bilancio di massa come:

$$\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^c + \frac{1}{\rho_c} \frac{\Delta m_c}{\Delta t} = S_c$$

dove c è la cella rispetto alla quale è calcolato il bilancio di massa, α è la direzione generica ottenuta congiungendo il centro di massa della cella c con le celle adiacenti, Φ_{α}^c è il flusso di massa [L^3T^{-1}], ρ_c è la densità del fluido [ML^{-3}], m_c è la massa contenuta nella cella c [M], Δt è il passo temporale [T], $\Delta m_c / \Delta t$ [MT^{-1}] è la variazione della massa nel tempo nella cella c , e S_c è il termine sorgente [L^3T^{-1}].

Questa equazione indica che, in un volume chiuso, la variazione per unità di tempo della massa è uguale alla somma algebrica del flusso di massa attraverso le facce del duale, a meno di un termine sorgente. L'equazione è valida sia per le celle interne sia per quelle di bordo.

Il flusso di massa è pari a:

$$\phi_{\alpha}^c = -K_{c\alpha} \left(\frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}} \right) \cdot A_{\alpha} = -K_{c\alpha} g_{\alpha} A_{\alpha}$$

con h_c e h_{α} carichi totali nella cella c e nella sua adiacente lungo la direzione α [L], l_{α} lato della cella [L], g_{α} gradiente idraulico [-], A_{α} superficie della cella ortogonale alla direzione α [L^2] attraverso cui passa il flusso Φ_{α}^c , e $\overline{K_{c\alpha}}$ valor medio della permeabilità tra

la cella c e la sua adiacente i lungo la direzione α (Figura 22), calcolata nel modo seguente (Indelman and Dagan, 1993; Straface, 1998):

$$\overline{\mathbf{K}}_{ci} = \frac{V_c + V_i}{\frac{V_c}{\mathbf{K}_{c\alpha}} + \frac{V_i}{\mathbf{K}_{i\alpha}}}$$

dove V_c e V_i [L^3] sono i volumi delle celle, mentre $\mathbf{K}_{c\alpha}$ e $\mathbf{K}_{i\alpha}$ sono gli elementi sulla diagonale del tensore di permeabilità corrispondente alla direzione α nelle celle c e i .

La differenza nelle equazioni di bilancio discreto tra terreno saturo ed insaturo sta nella formulazione della variazione di massa nel tempo.

Nel caso di flusso insaturo, assumendo il fluido incompressibile ed a densità costante, tale variazione è data da:

$$\frac{\Delta m_c}{\Delta t} = V_c \rho_c \frac{\Delta \theta_c}{\Delta t}$$

Se sono considerati il carico piezometrico ψ_c [L], dato dal rapporto tra la pressione capillare p_c [$ML^{-1}T^{-2}$] ed il peso specifico del liquido γ_w [$ML^{-2}T^{-2}$] (ponendo quindi $b = \psi + \varphi$), e la capacità di ritenzione specifica $C_c(\psi)$ [L^{-1}] (Bear, 1972), allora la variazione del contenuto idrico θ_c nella cella c può essere calcolata nel modo seguente:

$$\frac{\Delta \theta_c}{\Delta t} = \frac{\Delta \theta_c}{\Delta h_c} \frac{\Delta h_c}{\Delta t} = C_c \frac{\Delta h_c}{\Delta t}$$

da cui si ottiene la forma completa dell'equazione del flusso insaturo:

$$\sum_{\alpha} -\overline{\mathbf{K}}_{c\alpha} \left(\frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}} \right) \mathbf{A}_{\alpha} + V_c C_c \frac{\Delta h_c}{\Delta t} = S_c$$

Nel caso di flusso saturo, la variazione di massa nel tempo è invece espressa da (de Marsily, 1986):

$$\frac{\Delta m_c}{\Delta t} = \rho_c \cdot n_c \cdot \frac{\Delta h_c}{\Delta t} \cdot A_\alpha$$

dove n_c è la porosità cinematica.

In maniera esplicita, quindi, l'espressione del bilancio di massa è pari a:

$$\sum_\alpha -K_{c\alpha} \left(\frac{h_\alpha - h_c}{l_\alpha} \right) \cdot A_\alpha + n_c \cdot \frac{\Delta h_c}{\Delta t} \cdot A_\alpha = S_c$$

Quindi uguagliando i termini si ottiene:

$$V_c \cdot C_c = n_c \cdot A_\alpha \Rightarrow V_c \cdot \frac{\Delta g_c}{\Delta h_c} = n_c \cdot A_\alpha$$

Dall'analisi delle equazioni appare chiaro che esse si uguagliano se:

$$C_c = \frac{n_c}{l}$$

2.3 Formulazione discreta del trasporto di massa

Al fine di valutare il trasporto di massa di soluto in falda, è necessario scrivere l'equazione di bilancio in un mezzo poroso. Si può così determinare la concentrazione di soluto in tutti i nodi in cui essa non è assegnata (nodi interni o di bordo)

Si impone il bilancio di massa in ogni cella del complesso in cui si suddivide il dominio di moto, che in questo caso corrispondono ad elementi cubici (Figura 21).

Si può scrivere il bilancio di massa come:

$$\sum_{\alpha} \phi_{\alpha_c}^s + \frac{1}{\rho_c^s} \frac{\Delta m_c^s}{\Delta t} = 0$$

dove $\phi_{\alpha_c}^s$ è il flusso di massa di soluto e Δm_c^s è la variazione di massa nella cella. Questa equazione indica che, in un volume chiuso, la variazione per unità di tempo della massa di soluto è uguale alla somma algebrica del flusso di massa attraverso le facce del duale. L'equazione è valida sia per i nodi interni sia per i nodi di bordo.

La variazione di massa nel tempo espressa in maniera estesa è:

$$\frac{\Delta m_c^s}{\Delta t} = n_o \cdot V^c \cdot \frac{\Delta C_c^s}{\Delta t}$$

dove C_c^s è la concentrazione di massa di soluto.

Il fenomeno del trasporto di massa in falda è suddiviso in tre meccanismi separati:

- ✓ convezione;
- ✓ diffusione molecolare;
- ✓ dispersione cinematica.

Tenendo conto di queste aliquote, l'equazione di bilancio assume la forma:

$$\sum_{\alpha} \left(\phi_{\alpha_c}^{conv,s} + \phi_{\alpha_c}^{diff,s} + \phi_{\alpha_c}^{disp,s} \right) - \frac{1}{\rho_c^s} \frac{\Delta m_c^s}{\Delta t} = 0$$

nella quale i termini hanno le seguenti espressioni:

$$\begin{aligned}\phi_{\alpha_c}^{conv,s} &= \phi_c^h \cdot C_c^s \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \\ \phi_{\alpha_c}^{diff,s} &= d_0 \cdot A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \mathbf{g}_c \cdot \mathbf{n}_o \\ \phi_{\alpha_c}^{disp,s} &= A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \varphi_{\alpha_c}^{disp,s}\end{aligned}$$

In quest'ultima equazione compare il termine di flusso unitario:

$$\varphi_{\alpha_c}^{disp,s} = -\underline{D}_c \cdot \mathbf{g}_c$$

quindi, in forma esplicita, l'equazione di bilancio assume la forma:

$$\sum_{\alpha} \left(\left(\phi_c^h \cdot C_c^s \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \right) + \left(d_0 \cdot A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \mathbf{g}_c \cdot \mathbf{n}_o \right) - \left(A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \underline{D}_c \cdot \mathbf{g}_c \right) \right) - \frac{1}{\rho_c^s} \frac{\Delta m_c^s}{\Delta t} = 0$$

La funzione \mathbf{g}_c è il gradiente di concentrazione, la cui formulazione dipende dal tipo di interpolazione utilizzata.

Impiegando una interpolazione lineare, si è ipotizzato che in ogni cella la variabile C_{sh}^c (concentrazione di soluto), sia esprimibile da una relazione del tipo:

$$C(x, y, z) = a + g_x x + g_y y + g_z z$$

Nella quale i coefficienti g_x , g_y e g_z sono le componenti del vettore gradiente. Con riferimento all'elemento spaziale, ed indicando con h, i, j e k i vertici dell'elemento e con L_i, L_j e L_k i tre lati uscenti dal vertice h , si può scrivere:

$$C_i - C_h = g_x(x_i - x_h) + g_y(y_i - y_h) + g_z(z_i - z_h)$$

$$C_j - C_h = g_x(x_j - x_h) + g_y(y_j - y_h) + g_z(z_j - z_h)$$

$$C_k - C_h = g_x(x_k - x_h) + g_y(y_k - y_h) + g_z(z_k - z_h)$$

In forma matriciale assume la forma:

$$\begin{bmatrix} L_{ix} & L_{iy} & L_{iz} \\ L_{jx} & L_{jy} & L_{jz} \\ L_{kx} & L_{ky} & L_{kz} \end{bmatrix}_c \begin{Bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{Bmatrix}_c = \begin{Bmatrix} C_i^s - C_h^s \\ C_j^s - C_h^s \\ C_k^s - C_h^s \end{Bmatrix}_c$$

La soluzione del sistema, mediante la regola di Cramer, fornisce:

$$\begin{Bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{Bmatrix}_c = \frac{1}{3V^c} \begin{bmatrix} A_{hx} & A_{ix} & A_{jx} & A_{kx} \\ A_{hy} & A_{iy} & A_{jy} & A_{ky} \\ A_{hz} & A_{iz} & A_{jz} & A_{kz} \end{bmatrix}_c^h = \begin{Bmatrix} C_h^s \\ C_i^s \\ C_j^s \\ C_k^s \end{Bmatrix}$$

Ovvero:

$$g_c = \frac{1}{3V_c} A_c^h C_c^s$$

Come visto in precedenza, passando ad un dominio cubico, il complesso primale è costituito da celle cubiche e si costruisce il duale considerando come vertici i baricentri dei cubi. Sempre con riferimento alla Figura 21, si è ipotizzato che in ogni cella la variabile C (concentrazione di soluto), sia esprimibile dalla relazione del tipo:

$$C^s(x, y, z) = a + g_x x + g_y y + g_z z$$

Nella quale i coefficienti g_x , g_y e g_z sono le componenti del vettore gradiente. Con riferimento all'elemento spaziale, ed indicando con h, i, j e k i vertici del tetraedro e con L_{ij} , L_{ih} e L_{ik} i tre lati uscenti dal vertice h , si può scrivere:

$$C_i^s - C_j^s = g_x(x_i - x_j) + g_y(y_i - y_j) + g_z(z_i - z_j)$$

$$C_i^s - C_h^s = g_x(x_i - x_h) + g_y(y_i - y_h) + g_z(z_i - z_h)$$

$$C_i^s - C_k^s = g_x(x_i - x_k) + g_y(y_i - y_k) + g_z(z_i - z_k)$$

$$C_i^s - C_j^s = g_x(x_i - x_j) + 0 + 0$$

$$C_i^s - C_h^s = 0 + g_y(y_i - y_h) + 0$$

$$C_i^s - C_k^s = 0 + 0 + g_z(z_i - z_k)$$

In forma matriciale diventa:

$$\begin{bmatrix} -L_{ij} & 0 & 0 \\ 0 & -L_{ih} & 0 \\ 0 & 0 & -L_{ik} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_i^s - C_j^s \\ C_i^s - C_h^s \\ C_i^s - C_k^s \end{Bmatrix}$$

La soluzione del sistema fornisce:

$$g_x = -\frac{(C_i^s - C_j^s)}{L_{ij}}$$

$$g_y = -\frac{(C_i^s - C_h^s)}{L_{ih}}$$

$$g_z = -\frac{(C_i^s - C_k^s)}{L_{ik}}$$

In definitiva quindi l'equazione di bilancio assume la forma:

$$\begin{aligned} & \sum_a \left(\left(\phi_c^h \cdot C_c^s \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \right) + \left(d_0 \cdot A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \left(\frac{C_\alpha^s - C_c^s}{l_\alpha} \right) \cdot n_o \right) - \left(A_c^h \cdot \frac{1}{\rho_c^s} \cdot \underline{D}_c \cdot \left(\frac{C_\alpha^s - C_c^s}{l_\alpha} \right) \right) \right) = \\ & = \frac{1}{\rho_c^s} \cdot n_o \cdot V_c \cdot \frac{\Delta C_c^s}{\Delta t} \end{aligned}$$

Bisogna porre l'attenzione sulla condizione che nel riferimento X Y Z rispetto al quale si è valutata l'espressione del gradiente su celle cubiche (direzione di flusso e sue ortogonali, Figura 51), il tensore di dispersività assume la forma:

$$\underline{D}_e = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix}$$

Dove:

$$D_L = n_o d_0 + \alpha_l q_x$$

$$D_T = n_o d_0 + \alpha_l q_y$$

$$D_T = n_o d_0 + \alpha_l q_z$$

Nella equazione di bilancio di massa bisognerà esprimere il tensore secondo le direzioni del sistema di riferimento X' Y' Z' (Figura 23), dove α e β sono gli angoli orizzontale e verticale che esprimono l'inclinazione degli assi del nuovo sistema di riferimento rispetto alle direzioni principali di moto. Si dovrà effettuare quindi il cambio di base:

$$\underline{D}_c^f = \underline{T}^{-1} \underline{D}_c$$

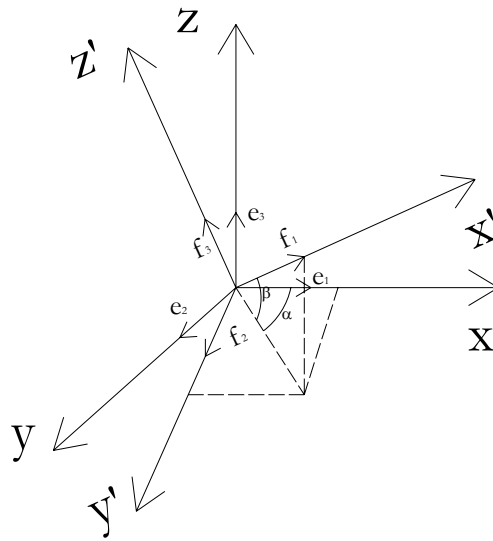


Figura 23: Cambio di base del sistema di riferimento

In relazione al cambio di base del tensore di dispersione cinematica, in Appendice I è riportato un approfondimento sulle relazioni geometriche che intervengono ed i relativi passaggi matematici.

Capitolo III – Automi cellulari

Il calcolo parallelo è l'esecuzione simultanea di un codice di calcolo su più microprocessori o più *core* dello stesso processore allo scopo di aumentare le prestazioni del sistema. Non si deve pensare che si possa ottenere un calcolo parallelo efficiente semplicemente mettendo più processori uno a fianco dell'altro e connettendoli ad una velocità sufficiente. Nella pratica, è molto difficile ottenere uno *speedup* lineare, cioè prestazioni direttamente proporzionali al numero di processori presenti nel sistema: questo perché molti algoritmi sono sequenziali.

Gli automi cellulari rappresentano il modello di calcolo parallelo che meglio si adatta a sfruttare appieno le potenzialità che tale architettura è in grado di fornire.

1. Sistemi di calcolo parallelo

La più famosa ed accettata classificazione delle architetture per i sistemi paralleli è quella proposta da M. J. Flynn, secondo il quale le due più importanti caratteristiche di un elaboratore sono:

- ✓ il numero di flussi di istruzioni che esso può processare ad ogni istante;
- ✓ il numero di flussi di dati su cui esso può operare simultaneamente.

Combinando queste due caratteristiche è possibile ottenere le seguenti quattro classi architetturali (Figura 24):

- SISD (Single Instruction stream – Single Data stream)
- SIMD (Single Instruction stream – Multiple Data stream)
- MISD (Multiple Instruction stream – Single Data stream)
- MIMD (Multiple Instruction stream – Multiple Data stream)

La classe SISD comprende l'architettura tradizionale di von Neumann che è quella usata da tutti i calcolatori convenzionali, dai personal computer ai grandi elaboratori

sequenziali, in cui il singolo processore obbedisce ad un singolo flusso di istruzioni (programma sequenziale) ed esegue queste istruzioni ogni volta su un singolo flusso di dati.

Alla classe SIMD appartengono le architetture composte da molte unità di elaborazione che eseguono contemporaneamente la stessa istruzione ma lavorano su insiemi di dati diversi. Tali architetture utilizzano un modello computazionale in parallelo di tipo *sincrono*.

La classe MISD, in cui più flussi di istruzioni lavorano contemporaneamente su un unico flusso di dati, non è stata finora usata praticamente.

Il modello rappresentato dalla classe MIMD in cui più processi, eventualmente creati dinamicamente, sono in esecuzione contemporaneamente su più processori ed utilizzano dati propri o condivisi, rappresenta una evoluzione della classe SISD. A livello computazionale i sistemi MIMD possono far cooperare i processi sia secondo un modello *sincrono* che *asincrono*.

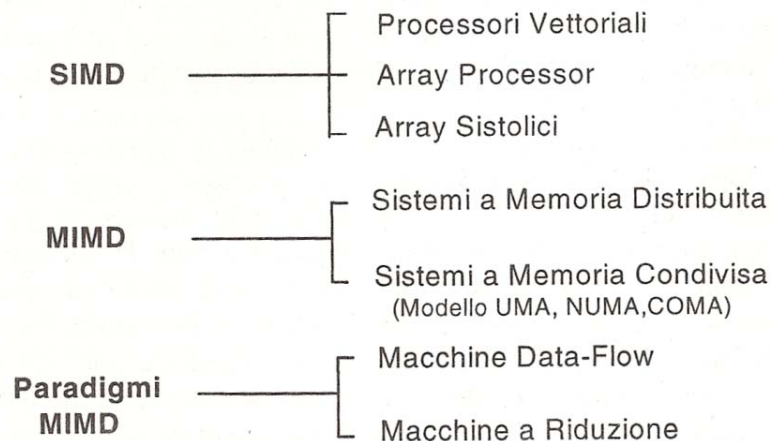


Figura 24: Classificazione delle architetture parallele [Spezzano et al., 1999]

1.1 Metriche per la misura delle prestazioni

Impiegando un modello teorico è possibile valutare i limiti delle prestazioni delle macchine parallele e di effettuare un'analisi della scalabilità e dell'efficienza degli algoritmi paralleli.

Lo sviluppo di un programma parallelo efficiente è un processo complesso che richiede una procedura iterativa che per passi successivi consenta di determinare la struttura ottimale del programma in funzione di una specifica architettura.

Le prestazioni di uno o più moduli che costituiscono un programma parallelo possono essere migliorate aumentando il grado di parallelismo, ovvero il numero di processori che mediamente sono usati durante l'esecuzione del programma. Inoltre è importante curare la ripartizione dei dati fra i diversi processori utilizzando tecniche di partizionamento in modo da favorire una località nelle richieste di accesso ai dati.

Per misurare come variano le prestazioni del programma in funzione delle modifiche apportate, sono utilizzate delle metriche che consentono di analizzare il comportamento dell'algoritmo in funzione della architettura usata. Le principali metriche utilizzate sono lo *speedup* e l'*efficienza*.

Lo speedup è il rapporto fra il tempo di esecuzione sequenziale e quello parallelo di un programma. Indicando con T_s il tempo di esecuzione sequenziale (su un processore) e con T_n quello parallelo (su n processori), lo speedup di un'applicazione su n processori è definito come:

$$S_n = \frac{T_s}{T_n}$$

L'efficienza è una metrica che utilizza lo speedup e il numero di processori. Per un sistema con n processori essa è definita come:

$$E_n = \frac{S_n}{n} = \frac{T_s}{nT_n}$$

L'efficienza dà una indicazione del grado di speedup raggiunto comparato con il valore massimo raggiungibile. Il valore dell'efficienza è:

$$\frac{1}{n} \leq E_n \leq 1$$

poiché lo speedup è generalmente:

$$1 \leq S_n \leq n$$

Il valore più basso corrisponde al caso in cui il codice è eseguito sequenzialmente su un unico processore. La massima efficienza è raggiunta quando tutti gli n processori sono utilizzati pienamente durante l'esecuzione del programma. Un alto grado di parallelismo con un basso grado di accoppiamento consente di ottenere valori di efficienza prossimi ad 1. In generale, se la dimensione del problema è mantenuta invariata e il numero di processori della macchina è incrementato, allora il valore dell'efficienza diminuisce rapidamente. Per ottenere l'efficienza ad un livello desiderato è necessario aumentare il numero dei processori e la dimensione del problema in maniera proporzionale. Questo consente di ottenere sistemi *scalabili*.

2. Automi cellulari

Gli Automi Cellulari (AC) sono modelli di calcolo parallelo la cui evoluzione è regolata da leggi puramente locali.

Col termine *automa* si intende il modello astratto di un dispositivo il quale può assumere certi stati, può ricevere stimoli (input) secondo una scala discreta del tempo dell'ambiente in cui è immerso e reagisce a questi stimoli con una transizione di stato e con una risposta (output), secondo una logica prefissata (Figura 25).

Nella sua definizione essenziale, un AC può essere descritto come uno spazio suddiviso in celle regolari, ognuna delle quali può trovarsi in un numero finito di stati. Ogni cella dell'AC ingloba, infatti, un automa finito, uno dei modelli di calcolo più semplici e noti in informatica. Al tempo $t = 0$ le celle sono in uno stato arbitrario e l'AC evolve cambiando gli stati degli automi finiti a passi discreti di tempo applicando simultaneamente a ognuna la stessa legge, o funzione, di transizione. L'input per ciascuna cella è dato dagli stati delle celle vicine e le condizioni di vicinato sono determinate da una relazione geometrica, invariante nel tempo e nello spazio. Si noti che l'AC, in alternativa, può essere visto come un reticolo regolare i cui nodi contengono l'automa finito.

A discapito della loro semplice definizione, gli AC possono dar luogo a comportamenti estremamente complessi. A livello microscopico, infatti, le leggi che regolano la dinamica del sistema sono perfettamente note, ma questo non significa che da esse si possa dedurre in ogni caso il comportamento del sistema a livello macroscopico. In altri termini, la dinamica del sistema emerge in maniera non banale dalla mutua interazione delle sue componenti elementari e, anche a fronte di leggi d'interazione semplici, il comportamento macroscopico può risultare estremamente complesso.

Nello specifico, gli AC si prestano particolarmente bene alla modellizzazione e simulazione di quei sistemi caratterizzati da numerosi costituenti elementari in mutua interazione quali possono essere i fenomeni di moto e trasporto di massa nel sottosuolo.



Figura 25: Schema di un semplice automa [Spezzano et al., 1999]

2.1 Breve storia degli automi cellulari

Nel '47 John von Neumann, matematico americano di origine ungherese, aveva intrapreso lo studio su quali fossero le caratteristiche e la complessità di un sistema che lo rendano capace di autoriproduzione. von Neumann morì prematuramente nel '57 e non ebbe tempo di completare il suo *Theory of self reproducing automata*, uscito comunque postumo nel '66 a cura di A. W. Burks (VON NEUMANN, 1966). La strada inizialmente intrapresa fu quella di un modello continuo, basato su un sistema di equazioni differenziali, per descrivere uno spazio in cui fluttuavano liberamente una sorta di robot assemblatore e innumerevoli copie dei pezzi di cui egli stesso era composto; il robot era programmato per “agganciare” i pezzi nello spazio ed assemblarli opportunamente per costruire una copia di se stesso.

Le difficoltà a gestire un modello talmente complesso portarono von Neumann nel '51, su suggerimento di Stanislaw Ulam, a cambiare radicalmente approccio: una scacchiera infinita, le cui celle quadrate inglobavano un automa finito (detto poi automa elementare), sostituì lo spazio tridimensionale continuo con uno bidimensionale discreto; il tempo divenne anch'esso discreto nel senso che le celle cambiavano stato in maniera sincrona in un “passo di calcolo”, in relazione al proprio stato e a quello delle celle “vicine”, dove la “vicinanza” era definita da una relazione geometrica fissa nello spazio e nel tempo (una vicinanza a croce fu quella scelta da von Neumann). Lo stato della cella individuava lo stato funzionale di un pezzo dell'assemblatore oppure era “quiescente”, cioè individuava una porzione di spazio inattiva che poteva assumere una funzionalità (passare dallo stato quiescente a uno diverso) solo se “stimolata” da una o più celle vicine non in stato quiescente; le funzioni di transizione degli automi finiti erano le stesse dappertutto nello spazio e non variavano nel tempo. A questo punto l'assemblatore diventava un modificatore degli stati quiescenti delle celle, da cui era circondato, fino a costruire una copia di sé stesso.

Successivamente agli studi di von Neumann sull'autoriproduzione, CODD (1968) e THATCHER (1970) hanno studiato le proprietà computazionali degli AC, dimostrandone, tra l'altro, l'equivalenza con la Macchina di Turing.

Grande interesse intorno agli AC si ebbe negli anni '70 grazie al Gioco della Vita (*Life*) di John Horton Conway (GARDNER, 1970). Si tratta di un AC bidimensionale con celle quadrate e vicinato della cella costituito dalla cella stessa e dalle 8 celle che la

circondano. Ogni cella può assumere solo due stati: lo stato morto (stato 0) e lo stato vivo (stato 1). La funzione di transizione è data dalle seguenti regole:

1) una cella nello stato vivo passa allo stato morto se è in contatto con meno di due celle nello stato vivo (muore per isolamento), oppure se è in contatto con più di tre celle in stato vivo (muore per sovrappopolazione);

2) una cella nello stato morto passa allo stato vivo (nasce) se è in contatto con esattamente tre celle nello stato vivo.

Applicando queste semplici regole la popolazione di celle vive evolve continuamente assumendo configurazioni imprevedibili: in qualche caso la popolazione si estingue, in altri raggiunge configurazioni stabili o oscillanti, in altri ancora dà vita a strutture, i *glider*, in grado di muoversi nello spazio cellulare e interagire, in modo anche molto complesso, con altri *glider* o con altre strutture stabili o oscillanti. L'emergenza di comportamenti tanto complessi e imprevedibili in un sistema estremamente semplice come *Life* misero in luce le enormi potenzialità degli AC.

Alcune tra le ricerche teoriche e applicative più interessanti sugli AC per gli argomenti discussi in questo lavoro sono sinteticamente descritte nel in seguito.

2.2 Definizione informale di automa cellulare

Una prima definizione informale di Automa Cellulare, quale si può dedurre dal primo lavoro di von Neumann, può essere data elencandone le proprietà fondamentali:

- ✓ un Automa Cellulare è formato da uno spazio d-dimensionale suddiviso in celle regolari (triangoli, quadrati, esagoni, cubi, ecc.) o, equivalentemente, da un reticolo regolare d-dimensionale;
- ✓ il numero di stati della cella è finito;
- ✓ l'evoluzione avviene a passi discreti;
- ✓ ogni cella cambia di stato simultaneamente a tutte le altre in accordo alla stessa regola di transizione;
- ✓ la regola di transizione dipende dallo stato della cella stessa e dallo stato delle celle vicine;
- ✓ la relazione di vicinanza è locale, uniforme e invariante nel tempo.

La definizione di Automa Cellulare richiede, dunque, la discretizzazione dello spazio in celle. Per gli Automi Cellulari unidimensionali l'unica possibilità è una sequenza di

celle allineate una a fianco all'altra, ovvero un reticolo unidimensionale. Per Automi Cellulari di dimensioni superiori esistono diverse alternative; per Automi Cellulari bidimensionali, per esempio, si possono adottare spazi cellulari con celle triangolari, quadrate o esagonali, mentre per Automi Cellulari tridimensionali si scelgono, solitamente, celle cubiche. La Figura 26 illustra alcuni esempi di spazi cellulari in una, due e tre dimensioni.

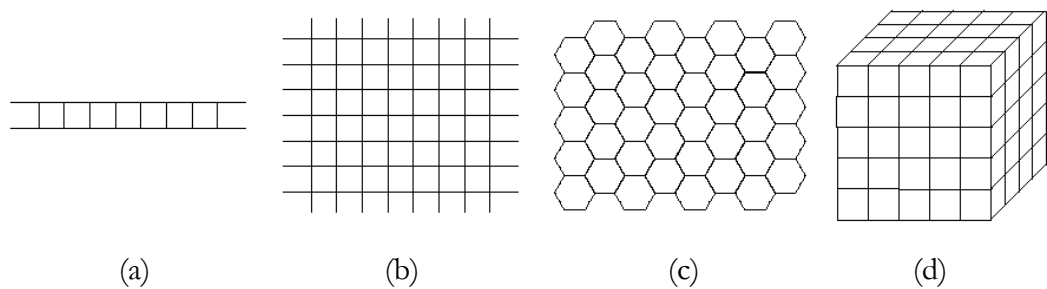


Figura 26: Spazi cellulari (a) unidimensionale, (b) bidimensionale con celle quadrate, (c) bidimensionali con celle esagonali e (d) tridimensionale con celle cubiche [D'AMBROSIO, 2003]

Per quanto riguarda gli Automi Cellulari bidimensionali, sebbene la tassellazione quadrata sia facilmente rappresentabile attraverso una matrice e non presenti problemi nella rappresentazione grafica (per esempio ogni elemento della matrice può essere visualizzato utilizzando un pixel della matrice dello schermo), in alcune applicazioni può presentare problemi di anisotropia. Quando questo si verifica si preferisce adottare una tassellazione esagonale che, per AC bidimensionali, è quella con anisotropia più bassa (WOLFRAM, 1986), può rendere le simulazioni più realistiche e, in alcuni casi, è indispensabile per modellare correttamente alcuni fenomeni (WEIMAR, 1997). Purtroppo non esiste un equivalente tridimensionale dello spazio cellulare esagonale.

Il numero di stati della cella deve essere finito ed è determinato in relazione al particolare contesto di studio o d'applicazione. Nei primi studi teorici successivi a von Neumann che hanno visto gli AC come modelli computazionali astratti (CODD, 1968; THATCHER, 1970) il numero di stati della cella era, solitamente, abbastanza piccolo. Con soli due stati, per esempio, è possibile rappresentare, nella configurazione iniziale (specificazione dello stato, in questo caso 0 o 1, di tutte le celle dello spazio cellulare al tempo $t = 0$), l'informazione che l'AC deve elaborare.

Anche quando l'Automa Cellulare è utilizzato per descrivere sistemi di particelle e modellarne le interazioni, il numero di stati è abbastanza contenuto (SUCCI, 1991; WEIMAR, 1997).

Al contrario, quando si studiano sistemi che possono trovarsi in un continuum di possibili stati, può essere necessario un numero di stati della cella abbastanza grande perché il modello sia significativo (DI GREGORIO & SERRA, 1999).

La relazione di vicinanza della cella, cui ci si riferirà con il nome di cella centrale, dipende dalla geometria delle celle. Secondo la definizione data, deve godere delle seguenti proprietà:

- 1) deve essere locale, cioè deve coinvolgere solo un numero limitato di celle in prossimità della cella centrale;
- 2) deve essere omogenea, cioè la stessa per ogni cella dello spazio cellulare;
- 3) deve essere invariante nel tempo.

Per AC unidimensionali si è soliti riferirsi al vicinato in termini di raggio, r , che definisce un vicinato composto da $n = 2r + 1$ celle (WOLFRAM, 1983). Per esempio, un raggio $r = 1$ identifica un vicinato di $n = 2r + 1 = 3$ celle: la cella centrale, la cella adiacente a sinistra e la cella adiacente a destra. La Figura 27 illustra due esempi di vicinato con raggio $r = 1$ ed $r = 2$ per un Automa Cellulare unidimensionale.



Figura 27: Vicinato per un Automa Cellulare uni-dimensionale [D'AMBROSIO, 2003]

Nel caso di AC bidimensionali con tassellazione quadrata i vicinati più utilizzati sono quello di von Neumann e quello di Moore. Il primo è composto dalla cella centrale e dalle celle a nord, est, ovest e sud, mentre il secondo contiene anche quelle di nord-ovest, nord-est, sud-ovest e sud-est. Un tipico vicinato per Automi Cellulari bidimensionali esagonali è, invece, composto dalle celle a nord, nord-est, sud-est, sud, sud-ovest e nord-ovest.

La Figura 28 illustra il vicinato di von Neumann e quello di Moore per Automi Cellulari con tassellazione quadrata e il tipico vicinato per Automi Cellulari con

tassellazione esagonale. Ovviamente è possibile definire relazioni di vicinanza differenti da quelle illustrate.

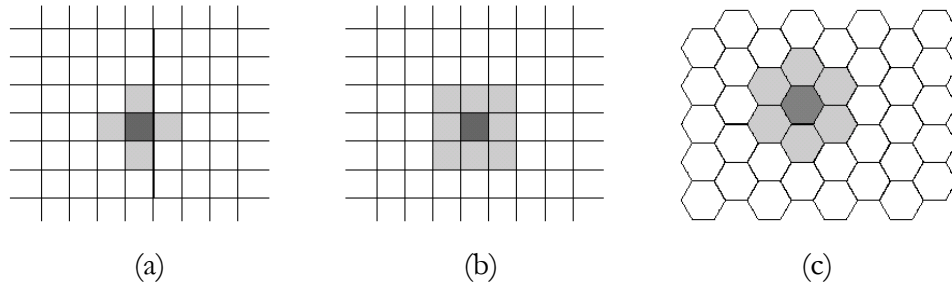


Figura 28: Vicinati di von Neumann (a) e di Moore (b) per un Automa Cellulare bidimensionale con tassellazione quadrata e vicinato esagonale (c) per un Automa Cellulare bidimensionale con tassellazione esagonale [D'AMBROSIO, 2003]

2.3 Definizione formale di automa cellulare

In letteratura è possibile incontrare numerose definizioni di AC, ognuna delle quali si adatta meglio delle altre ai particolari contesti d'applicazione. La definizione formale presentata in questo paragrafo coincide con la definizione di AC omogeneo deterministico. Questo, del resto, non è limitativo poiché la maggior parte delle altre definizioni possono essere a essa ricondotte.

Come accennato in precedenza, ogni cella dell'AC ingloba un identico automa finito. Nel caso specifico dell'AC omogeneo deterministico, si tratta di un automa finito anch'esso omogeneo e deterministico. E' opportuno, quindi, premetterne la definizione.

2.3.1 L'automata finito e l'automata elementare

L'automata finito (*af*), o automa a stati finiti, è probabilmente il modello di calcolo più semplice in informatica. Intuitivamente, un *af* è un sistema che può trovarsi in un numero finito di stati differenti e, come conseguenza di qualche ingresso, può effettuare una transizione da uno stato a un altro.

Come nel caso degli AC, in letteratura è possibile incontrare numerose definizioni di *af*. L'*af* presentato di seguito corrisponde alla definizione di *af* come riconoscitore (accettore) di linguaggi (GHEZZI & MANDRIOLI, 1989). Il modello di *af* utilizzato negli AC, presentato subito dopo, è un modello ulteriormente semplificato che prende il nome di automa elementare.

Un automa finito deterministico come riconoscitore di linguaggi è formalmente definito come una quintupla:

$$af = \langle Q, I, \sigma, q_0, F \rangle$$

dove Q è l'insieme finito degli stati dell'*af*;

I è l'insieme finito dei simboli d'ingresso (input);

$\sigma : I \times Q \rightarrow Q$ è la funzione di transizione che modifica gli stati in funzione dell'input;

$q_0 \in Q$ è lo stato iniziale dell'*af*;

$F \subset Q$ è l'insieme degli stati finali dell'*af*.

L'automata elementare è invece formalmente definito come una tripla:

$$ae = \langle Q, I, \sigma \rangle$$

dove Q è l'insieme finito degli stati dell' ae ;

$I \equiv Q^n$ è l'insieme finito dei simboli d'ingresso, essendo n il numero di celle del vicinato;

$\sigma: I \rightarrow Q$ è la funzione di transizione che modifica gli stati in funzione dell'input.

2.3.2 L'automata cellulare omogeneo deterministico

A questo punto, dopo aver premesso le definizioni di automata finito e di automata elementare, si può definire formalmente l'AC omogeneo deterministico come una quadrupla:

$$AC = \langle Z^d, Q, X, \sigma \rangle$$

dove:

$Z^d = \{i \equiv (i_1, i_2, \dots, i_d) \mid i_k \in Z \forall k = 1, 2, \dots, d\}$ è l'insieme dei punti del reticolo d -dimensionale che definisce lo spazio cellulare dell'AC;

Z è l'insieme dei numeri interi;

Q è l'insieme finito degli stati dell'automata elementare;

$X = \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_{m-1}\}$ è l'insieme finito degli m vettori d -dimensionali $\xi_j = \{\xi_{j1}, \xi_{j2}, \dots, \xi_{jd}\}$ che definiscono $V(X, i) = \{i + \xi_0, i + \xi_1, \dots, i + \xi_{m-1}\}$, l'insieme delle coordinate delle celle vicine alla generica cella i di coordinate (i_1, i_2, \dots, i_d) ; X è detto indice o relazione di vicinanza;

$\sigma: Q^m \rightarrow Q$ è la funzione di transizione deterministica dell'automata elementare.

È opportuno esplicitare il concetto di vicinato attraverso un esempio. Si consideri un Automata Cellulare bidimensionale con vicinato di von Neumann (Figura 28a) e la cella i di coordinate $(7,7)$. La relazione di vicinanza che definisce il vicinato di von Neumann è:

$$X = \{\xi_0, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4\} = \{(0,0), (0,-1), (1,0), (0,1), (-1,0)\}$$

Pertanto, l'insieme delle coordinate delle celle vicine alla cella i è definito dall'insieme:

$$\begin{aligned} V(X, i) &= \{i + \xi_0, i + \xi_1, i + \xi_2, i + \xi_3, i + \xi_4\} \\ &= \{(7,7) + (0,0), (7,7) + (0,-1), (7,7) + (1,0), (7,7) + (0,1), (7,7) + (-1,0)\} \\ &= \{(7,7), (7,6), (8,7), (7,8), (6,7)\} \end{aligned}$$

3. Applicazioni degli Automi Cellulari nella fluidodinamica

In campo applicativo, gli AC si prestano particolarmente bene alla modellazione e simulazione di alcune classi di sistemi complessi, caratterizzati dall'interazione di numerosi componenti "elementari". L'ipotesi, largamente diffusa nella scienza tradizionale, secondo cui se il comportamento di un sistema è complesso il modello che lo descrive deve essere necessariamente di pari complessità, lascia il posto all'idea secondo cui il suo comportamento possa essere descritto, almeno in certi casi, in termini estremamente semplici, attraverso la specificazione delle leggi che definiscono le interazioni locali tra le componenti base del sistema (WOLFRAM, 2002).

In alcuni settori l'applicazione degli AC ha dato risultati paragonabili, se non superiori, a quelli ottenuti tramite approcci più tradizionali. L'esempio più noto è forse dato dalla cosiddetta "Vita Artificiale", disciplina che si occupa dello studio della vita e del comportamento nei sistemi naturali e artificiali, che ha prodotto ipotesi di lavoro e risultati originali e di estremo interesse, sia dal punto di vista teorico che da quello delle possibili applicazioni. La Vita Artificiale può essere definita come la disciplina che si occupa della vita e del comportamento di sistemi artificiali che "vivono" in ambienti artificiali. Chris Langton, uno dei suoi padri fondatori, definisce il nuovo settore di ricerca come: "[...] lo studio di sistemi manufatti che esibiscono comportamenti caratteristici dei sistemi viventi. La Vita Artificiale amplia la Biologia classica, che si occupa dell'analisi degli organismi viventi, tentando di sintetizzare comportamenti simili alla vita (*like-life behaviors*) nei computer o in altri media artificiali. [...] la Vita Artificiale può contribuire in Biologia Teorica nell'inquadrare la vita così come la conosciamo nel più ampio contesto della vita come potrebbe essere" (LANGTON, 1998).

Un altro esempio, forse non altrettanto famoso come la Vita Artificiale ma particolarmente significativo per chi si occupa di fluidodinamica, è l'applicazione degli AC alla modellazione del comportamento dei fluidi turbolenti attraverso modelli noti con il nome di Gas Reticolari e di modelli di Boltzmann su reticolo, di seguito brevemente descritti.

3.1 Gas Reticolari

La fluidodinamica classica si fonda sulle equazioni di Navier-Stokes che formalizzano le leggi di conservazione della massa e dell'impulso. Considerando la forma bidimensionale:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= -\frac{\partial \rho u u}{\partial x} - \frac{\partial \rho u v}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} &= -\frac{\partial \rho u v}{\partial x} - \frac{\partial \rho v v}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)\end{aligned}$$

Nell'equazione u e v sono le velocità del fluido nelle direzioni x e y di un sistema di riferimento cartesiano ortogonale, ρ la densità del fluido, p la pressione esercitata sul fluido e t il tempo. Il primo membro rappresenta la variazione rispetto al tempo della quantità di moto per unità di volume. Tale variazione è dovuta a tre effetti: il flusso dovuto al campo di moto del fluido (i primi due termini al secondo membro), detto termine di convezione, le forze di pressione (terzo termine) e la dissipazione (quarto e quinto termine). La non linearità (dovuta al termine di convezione), causa principale della difficoltà di risoluzione per casi non idealizzati, ha spinto alcuni ricercatori a tentare un approccio alternativo allo studio della fluidodinamica basato sugli AC che ha preso il nome di Gas Reticolari.

L'idea base dei Gas Reticolari è modellare un fluido attraverso un sistema di particelle, ognuna delle quali è vincolata a muoversi, con velocità costante, solo lungo le direzioni di un reticolo discreto. Le leggi locali sono definite in modo da garantire l'invarianza del numero di particelle (conservazione della massa) e la conservazione della quantità di moto.

I primi a proporre un approccio di questo tipo sono stati HARDY, POMEAU & DE PAZZIS (1976). Il modello HPP (dalle iniziali dei tre ricercatori) è basato su una griglia quadrata in cui ciascun nodo è collegato a quattro vicini (vicinato di von Neumann, Figura 28a). Ogni nodo può contenere da un minimo di zero a un massimo di quattro particelle di massa unitaria, ognuna delle quali può spostarsi soltanto lungo una delle direzioni del reticolo con velocità costante, pari a 1 (cioè, ogni particella può spostarsi in un passo dell'AC dalla cella in cui si trova in una cella adiacente). Poiché si sono supposte sia la massa che la velocità unitarie, la quantità di moto di una particella può essere definita semplicemente dal verso (i versi consentiti sono Sud, Ovest, Nord ed Est). Pertanto, le

possibili configurazioni per ogni nodo dell'HPP sono $2^4=16$. Per esempio la configurazione 0000 indica l'assenza di particelle, la configurazione 0001 indica la presenza di una particella che si sta spostando verso Est, la configurazione 0010 indica la presenza di una particella che si sta spostando verso Nord, e così via.

Quando due particelle con velocità opposte si trovano nella stessa cella (configurazioni 0101 e 1010), avviene un urto e le particelle sono deviate di un angolo retto. In tutti gli altri casi, compresi i casi in cui i cammini si incrociano (per esempio nella configurazione 1111), le particelle proseguono il loro cammino senza deviazioni.

Quando il numero di particelle è sufficientemente grande, su scala macroscopica l'impressione è quella di un fluido continuo. L'AC HPP si è dimostrato capace di modellare correttamente fenomeni fluidodinamici come la propagazione di un'onda, ma il suo comportamento risulta poco realistico nella simulazione di fluidi turbolenti. Il problema principale è dovuto al vincolo reticolare. Quest'ultimo è, infatti, responsabile dei cosiddetti invarianti spuri (SUCCI, 1991), cioè invarianti che non hanno corrispondenti nel continuo. In pratica l'HPP, oltre a conservare la massa e la quantità di moto, conserva anche la quantità di moto lungo le righe e le colonne del reticolo, come si può dedurre facilmente dall'analisi delle regole di transizione. A causa di questo eccesso d'invarianti, il moto delle particelle risulta fortemente anisotropo e il fluido non è sufficientemente libero di muoversi e diffondere la sua quantità di moto in tutte le direzioni.

In seguito però FRISH, HASSLACHER & POMEAU (1986), intuirono che l'impiego di un reticolo a maglia esagonale regolare (Figura 26c), in sostituzione di quello a maglia quadrata, potesse bastare a ristabilire l'isotropia perduta. Nel modello FHP (ancora dalle iniziali dei tre ricercatori), ogni cella è collegata alle sei celle vicine secondo angoli di 60 gradi (Figura 28c). Potendo le particelle muoversi lungo tre direzioni invece che due, il numero di possibili stati della cella passa da 2^4 a 2^6 , pur rimanendo le leggi di transizione sostanzialmente equivalenti a quelle del modello HPP, con la differenza però che nel modello FHP sono possibili anche urti che coinvolgono contemporaneamente tre particelle.

Sia $n_i(\vec{r}, t)$ il numero di particelle (0 o 1) entranti nella cella, individuata dal vettore \vec{r} al passo t lungo la direzione \vec{c}_i ($i = 1, 2, \dots, 6$) (Figura 29). Sia, inoltre, τ il tempo corrispondente a un passo di calcolo del modello FHP e λ la distanza tra due celle vicine del reticolo esagonale. Le velocità \vec{v}_i delle particelle lungo le direzioni \vec{c}_i sono definite nel seguente modo:

$$\vec{v}_i = \frac{\lambda}{\tau} \vec{c}_i$$

La funzione di transizione della cella può essere dedotta dalle regole di collisione, illustrate in Figura 29, considerando il caso in cui non si verificano urti e i due casi in cui, invece, hanno luogo collisioni tra due o tre particelle:

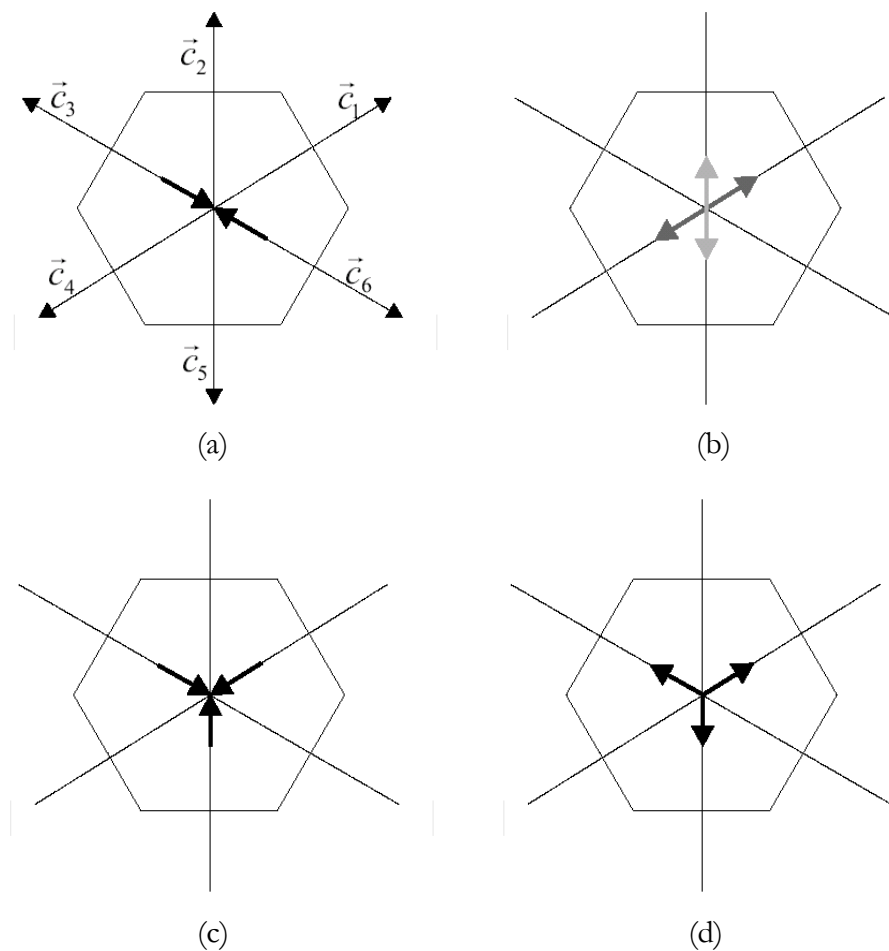


Figura 29: Regole di collisione del modello FHP. (a) e (b) descrivono, rispettivamente, la configurazione della cella prima e dopo l'urto nel caso di due particelle; (c) e (d) descrivono, rispettivamente, la configurazione della cella prima e dopo l'urto nel caso di tre particelle [D'AMBROSIO, 2003]

Nessuna collisione. Se non si verifica alcuna collisione le particelle proseguono il loro cammino lungo l'originaria direzione reticolare, senza alcuna deviazione.

Pertanto vale la seguente regola d'aggiornamento:

$$n_i(\vec{r} + \lambda \vec{c}_i, t + \tau) = n_i(\vec{r}, t)$$

cioè, ogni particella che al tempo t si trovi nella cella individuata dal vettore \vec{r} , al passo successivo, $t + \tau$, sarà nella cella adiacente, lungo la stessa direzione, individuata dal vettore $\vec{r} + \lambda \vec{c}_i$.

Collisione tra due particelle. Se solo n_i ed n_{i+3} valgono 1 nella cella \vec{r} , come illustrato in figura 3.6a-b, si verifica una collisione. La condizione:

$$D_i = n_i n_{i+3} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+2}) (1 - n_{i+4}) (1 - n_{i+5}) = 1$$

identifica tale urto. Pertanto il numero di particelle che permangono lungo la direzione \vec{c}_i dopo l'urto è dato da:

$$n_i - D_i$$

Tuttavia, una nuova particella può comparire nella direzione \vec{c}_i per effetto delle collisioni tra n_{i+1} ed n_{i+2} oppure tra n_{i+1} ed n_{i+4} . Il numero di particelle create nella direzione \vec{c}_i può essere, pertanto, dedotto dalla seguente formula:

$$qD_{i-1} + (1 - q)D_{i+1}$$

essendo $q = q(\vec{r}, t)$ una variabile booleana random che vale 0 se dopo l'urto le particelle deviano verso sinistra, 1 se deviano verso destra. Pertanto, il numero complessivo di particelle lungo \vec{c}_i è dato da:

$$n_i - D_i + qD_{i-1} + (1 - q)D_{i+1}$$

Collisione tra tre particelle. La condizione:

$$T_i = n_i n_{i+2} n_{i+4} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+3}) (1 - n_{i+5}) = 1$$

identifica un urto tra tre particelle (Figura 29c-d). L'effetto è quello di deviare le particelle di un angolo di 180 gradi. Pertanto il numero di particelle che rimangono lungo la direzione \vec{c}_i dopo l'urto è dato da:

$$n_i - T_i$$

Tuttavia, un urto tra le particelle n_{i+1} , n_{i+3} ed n_{i+5} determina la comparsa di una nuova particella lungo la direzione \vec{c}_i , condizione che si esprime nel seguente modo:

$$T_{i+3}$$

Il numero complessivo di particelle nella direzione \vec{c}_i per effetto di collisioni tra tre particelle è dato, dunque, da:

$$n_i - T_i + T_{i+3}$$

Pertanto la dinamica del modello FHP lungo ogni direzione del reticolo è definita dalla seguente legge:

$$n_i(\vec{r} + \lambda \vec{c}_i, t + \tau) = n_i(\vec{r}, t) + \Omega_i(\vec{r}, t)$$

in cui il termine $\Omega_i(\vec{r}, t) = -D_i + qD_{i-1} + (1-q)D_{i+1} - T_i + T_{i+3}$ rappresenta gli effetti delle collisioni tra le particelle; Ω_i è detto, infatti, termine di collisione.

Con queste poche e, tutto sommato, semplici modifiche (l'introduzione del reticolo esagonale e le nuove regole di collisione), l'FHP ha risolto il problema degli invarianti spuri e si è dimostrato capace di riprodurre correttamente fenomeni fluidodinamici complessi. Inoltre, CHOPARD & DROZ (1998) hanno dimostrato che l'introduzione di particelle con velocità nulla nelle versioni successive del modello FHP (DOOLEN, 1990) consente di derivare dalle regole di collisione le equazioni di Navier-Stokes per fluidi non comprimibili.

La Figura 30 illustra un'applicazione del modello FHP.

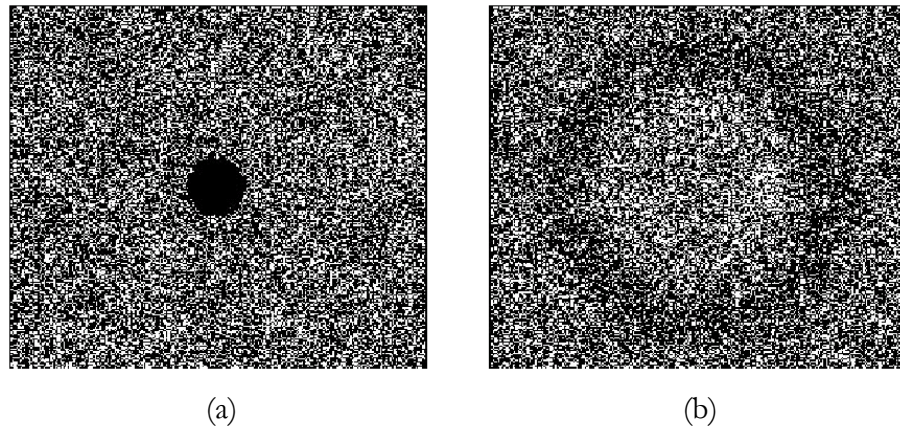


Figura 30: Dinamica di un'onda (b) nel modello FHP dovuta alla diffusione di una concentrazione di particelle nella zona centrale del reticolo (a).

L'isotropia, cioè l'equivalenza di tutte le direzioni del reticolo, gioca dunque un ruolo estremamente importante nella modellazione del comportamento delle particelle del fluido. Questo aspetto costituì un problema apparentemente insormontabile nel passaggio alla terza dimensione, che maggiormente interessa sul piano delle applicazioni pratiche. Infatti non esiste alcun solido elementare in grado di riempire in maniera congruente (cioè senza buchi) lo spazio, garantendo al tempo stesso l'isotropia. FRISH, D'HUMIÈRES & LALLEMAND (1987) notarono però che nello spazio a quattro dimensioni un solido con le proprietà richieste esiste. Si tratta di un ipercubo (la generalizzazione di un cubo) a facce centrate, su cui si è basata la costruzione del reticolo FCHC (*Face Centered Hyper Cube*). Il passaggio alla terza dimensione, benché ineccepibile dal punto di vista teorico, pose tuttavia pesanti problemi in termini computazionali. Nell'FCHC si hanno 12 possibili direzioni e, di conseguenza, il numero di possibili stati diventa 2^{24} (oltre 16 milioni). Così, la tabella di transizione che definisce l'esito di tutte le possibili configurazioni della cella veniva a essere di ben 48 Mbyte. Pur non considerando il fatto che nel 1987 una tale quantità era considerata decisamente alta, il problema più pesante era che una tabella di transizione così grande richiedeva tempi d'accesso inaccettabili e, per questo, molti studi si occuparono di ridurre le dimensioni.

3.1.1 Modelli di Boltzmann su reticolo

Contemporaneamente alla ricerca di tavole di collisione ridotte, si è sviluppata una soluzione alternativa, oggi nota come metodo di Boltzmann su reticolo, proposta per la prima volta da MCNAMARA & ZANETTI (1988) dell'Università di Chicago e, contemporaneamente, da HIGUERA & JIMENEZ del Politecnico di Madrid (1989).

Un vantaggio non trascurabile dei modelli di Boltzmann su reticolo, rispetto ai Gas Reticolari, è la più elevata efficienza computazionale, visto che le quantità d'interesse non sono più le singole particelle ma la loro densità. Così, il numero di componenti del sistema si riduce sensibilmente e non è più necessaria la fase del calcolo di medie spazio-temporali per la determinazione delle quantità fisiche d'interesse del sistema: la densità del fluido ρ e la quantità di moto $\rho\vec{u}$ sono note in ogni cella del reticolo.

Nella sua forma più semplice (QIAN ET AL., 1992; CHEN ET AL., 1992), la dinamica di un modello di Boltzmann su reticolo può essere descritta nel seguente modo:

$$f_i(\vec{r} + \tau\vec{v}_i, t + \tau) - f_i(\vec{r}, t) = \Omega_i(f_i(\vec{r}, t)) = \frac{1}{\xi} \left(f_i^{(eq)}(\vec{r}, t) - f_i(\vec{r}, t) \right)$$

dove $f_i(\vec{r}, t)$ rappresenta la densità di particelle che al tempo t si trovano nella cella \vec{r} con velocità \vec{v}_i ; $f_i^{(eq)}(\vec{r}, t)$ rappresenta la cosiddetta distribuzione d'equilibrio locale; ξ , detto termine di rilassamento, rappresenta il numero di passi di calcolo necessari affinché si raggiunga l'equilibrio nel contesto locale del vicinato.

Le leggi che determinano la dinamica nei modelli di Boltzmann su reticolo riducono, dunque, le condizioni di non equilibrio nel contesto locale del vicinato. La funzione $f_i^{(eq)}(\vec{r}, t)$ specifica le condizioni d'equilibrio locale del sistema in funzione della densità, $\rho = \sum f_i$, e della quantità di moto, $\rho\vec{u} = \sum f_i\vec{v}_i$, del fluido nella cella. Il parametro ξ esprime, invece, la dipendenza del sistema dalla viscosità, ν , del fluido. Vale infatti la seguente relazione: $\nu = K(\xi - 1/2)$, dove K è una costante che dipende dalla geometria del reticolo (CHOPARD ET AL., 2002). In tal modo la viscosità diviene un parametro esplicito del modello, a differenza di quanto accade nei Gas Reticolari in cui essa dipende implicitamente dalla specificazione delle leggi che regolano gli urti tra le particelle.

I modelli di Boltzmann su reticolo coinvolgono, dunque, quantità esprimibili non più come numeri interi (come nel caso delle singole particelle nei Gas Reticolari) ma come numeri reali. Se da una parte questo può rappresentare un problema dal punto di vista della stabilità numerica (intesa come propagazione dell'errore, tipica dei modelli basati sull'elaborazione di valori in virgola mobile), dall'altra offre una maggiore flessibilità nella calibratura del modello dato che è possibile esplicitare, come nel caso della viscosità, alcuni importanti parametri del sistema. Inoltre, come per il modello FHP, anche per i modelli di Boltzmann su reticolo è stata dimostrata l'equivalenza con le equazioni di Navier-Stokes per fluidi incomprimibili (CHOPARD & DROZ, 1998). La Figura 31 illustra la dinamica del modello BKG (QIAN ET AL., 1992) nella simulazione di un flusso intorno a una lamina.

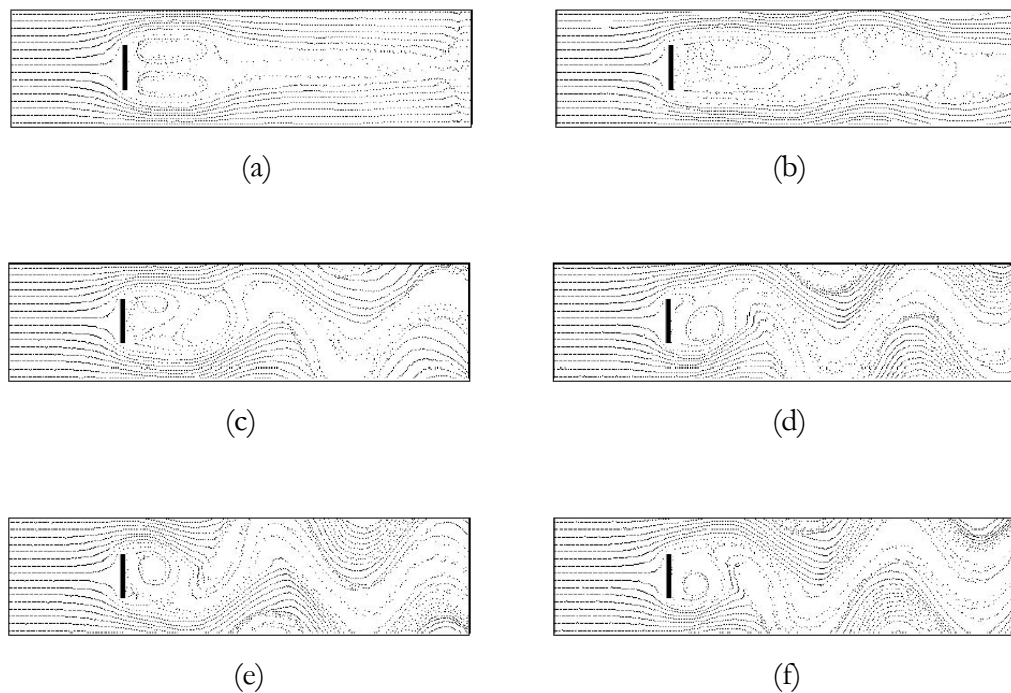


Figura 31: Simulazione di un flusso intorno a una lamina in un modello di Boltzmann. Le figure da (a) ad (f) illustrano l'evoluzione del sistema

4. Automi cellulari e fenomeni macroscopici

Le leggi della fisica sono, in ultima istanza, fondate su principi di conservazione, quali la conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Nel passato, sino all'avvento degli elaboratori elettronici, la possibilità di descrivere i fenomeni in termini di equazioni differenziali, le cui soluzioni analitiche forniscono lo stato del sistema in ogni punto del continuum spazio-temporale, ha segnato la differenza tra scienza forte (altamente predittiva) e scienza debole (puramente descrittiva). Purtroppo, però, come nel caso delle equazioni di Navier-Stokes in fluidodinamica, è stato possibile risolvere analiticamente solo sistemi semplificati mentre, in generale, è necessario ricorrere a metodi numerici approssimati.

Tentativi di modellazione quantitativa di fenomeni naturali complessi attraverso metodi numerici approssimati (comunemente basati sulla discretizzazione dello spazio e del tempo) si sono principalmente sviluppati grazie alla crescita della potenza dei calcolatori elettronici. Questi metodi hanno permesso di estendere la classe di problemi che possono essere risolti in termini di sistemi di equazioni differenziali. Tuttavia, alcuni di essi risultano ancora difficilmente trattabili, altri addirittura non lo sono affatto.

Per studiare e risolvere tali problemi, la comunità scientifica internazionale ha dovuto superare le difficoltà inerenti la risoluzione dei sistemi di equazioni differenziali tramite varie tecniche alternative (TOFFOLI, 1984). Contemporaneamente allo sviluppo di metodi approssimati per la risoluzione numerica di sistemi di equazioni differenziali (QUARTERONI & VALLI, 1997), si sono infatti sviluppati e consolidati nuovi metodi numerici che si fondano sui principi del calcolo parallelo. Entrambi gli approcci, quello basato sulle equazioni differenziali e quello basato sui nuovi modelli di calcolo parallelo, si fondano, tuttavia, sui concetti comuni di modellazione e simulazione.

4.1 Modellazione con automi cellulari

Gli Automi Cellulari hanno introdotto un approccio radicalmente nuovo nella modellazione di fenomeni complessi che evolvono sulla base di leggi locali. I Gas Reticolari e i modelli di Boltzmann su reticolo per primi hanno evidenziato le potenzialità degli AC nella modellazione e simulazione di sistemi fisici complessi.

Mentre i Gas Reticolari sono stati sempre considerati AC a tutti gli effetti (reticolo discreto, numero finito di stati per la cella, funzione di transizione esprimibile in termini di *look-up table*), i modelli di Boltzmann su reticolo sono stati visti, per un certo periodo, come “quasi automi” (SUCCI, 1991). Infatti, nei modelli di Boltzmann su reticolo lo stato della cella rappresenta la densità delle particelle nella corrispondente regione di spazio e quindi può variare in un intervallo continuo di valori. Tuttavia la continuità è un problema solo dal punto di vista formale; nei casi pratici le variabili reali hanno un numero finito di cifre significative e, di conseguenza, un insieme finito di valori permessi. In altri termini l'insieme dei valori permessi può essere estremamente grande ma in ogni caso è finito. Così i modelli di Boltzmann su reticolo possono essere considerati AC a tutti gli effetti.

Sia i Gas Reticolari che i modelli di Boltzmann su reticolo sono stati applicati alla simulazione della turbolenza dei fluidi. Tuttavia il loro ambito d'applicabilità non include, in generale, fenomeni macroscopici, come l'evoluzione di frane, di colate laviche o detritiche, dei fenomeni di infiltrazione di acqua e/o contaminanti nel suolo, che evolvono in contesti puramente tridimensionali (anche se ROTHMAN, 1988, e DI PIETRO, 1993, hanno mostrato che questi metodi si applicano al flusso macroscopico di tipo Darcy nel saturo).

Negli ultimi decenni sono stati proposti numerosi modelli empirici basati sugli AC per la simulazione di fenomeni macroscopici complessi, ad esempio per la simulazione dell'erosione del suolo (SMITH, 1991; MURRAY & PAOLA, 1994; D'AMBROSIO ET AL., 2001), dei flussi lavici (BARCA ET AL., 1994; MIYAMOTO & SASAKI, 1997; CRISCI ET AL., 2003), dei flussi detritici (SEGRE & DEANGELI, 1995; MALAMUD & TURCOTTE, 1999; DI GREGORIO ET AL., 1999a). Non molti studi sono stati proposti ad oggi per la modellazione a livello macroscopico del flusso d'acqua in mezzi insaturi tramite Automi Cellulari. Dall'analisi di tali studi emerge che le funzioni di transizione che regolano i flussi d'acqua tra le celle non sono espresse tramite schemi riconducibili a concetti classici della fluidodinamica. Ad esempio, DI PIETRO ET AL. (1994) nella descrizione del flusso attraverso strutture caratterizzate dalla presenza di macropori, adottano il classico modello dei Gas Reticolari; AITKENHEAD ET AL. (1999) usano gli Automi Cellulari per definire lo stato di celle

elementari nel suolo (presenza di materia solida, acqua o aria) considerando per le stesse celle dimensioni molto ridotte ($1 \mu\text{m}$) ed applicando una funzione di transizione sotto forma di *look up table*; DI GREGORIO ET AL. (1999b) infine, che si interessano alla diffusione di contaminanti nel suolo, per descrivere il moto dell'acqua ricorrono ad una funzione iterativa di minimizzazione dello stato energetico tra la cella centrale e le sue vicine.

4.1.1 Un metodo empirico per la modellazione di fenomeni macroscopici con AC

In generale, i fenomeni macroscopici si esplicano su scale spaziali decisamente più grandi di quelle che caratterizzano le applicazioni dei Gas Reticolari e dei modelli di Boltzmann su reticolo. In molti casi l'approccio microscopico fallisce banalmente per l'insufficiente qualità dei dati.

Anche se in linea di principio l'AC, così come definito precedentemente, è senz'altro sufficiente alla modellazione e simulazione di fenomeni naturali che evolvono su scala macroscopica, la loro complessità suggerisce un'estensione dell'originario paradigma. Le considerazioni che seguono introducono un'estensione della definizione di AC che meglio si adatta alla modellazione di fenomeni macroscopici complessi.

- *Parametri*

Innanzitutto, deve essere univocamente determinata una corrispondenza spaziale tra le celle dell'AC e la regione in cui evolve il fenomeno; allo stesso modo, deve essere fissato il tempo equivalente a un passo di calcolo dell'AC. Una volta determinati, la dimensione della cella e il clock dell'AC sono definiti come “parametri”, dato che i loro valori sono assunti costanti per tutto l'arco della simulazione. Essi costituiscono, insieme ad altri eventuali parametri solitamente necessari ai fini della simulazione, l'insieme P dei parametri dell'AC.

- *Sottostati*

Lo stato della cella deve tenere in considerazione tutte le caratteristiche che sono ritenute rilevanti per l'evoluzione del sistema. Per comodità e maggior chiarezza, nell'approccio considerato ogni caratteristica corrisponde a un “sottostato”, i cui valori devono formare un insieme finito; $S = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_n\}$ è l'insieme dei sottostati dell'AC.

Come nel caso dei modelli di Boltzmann su reticolo, la necessità di modellare proprietà caratterizzate da valori continui non pone sostanziali problemi. L'insieme Q di tutti i possibili valori dello stato della cella è, dunque, espresso come prodotto cartesiano degli elementi di S :

$$Q = Q_1 \times Q_2 \times \dots \times Q_n$$

Il valore di un sottostato è sempre considerato costante all'interno della cella; tale valore è cioè rappresentativo di tutta la corrispondente porzione di spazio.

- *Processi elementari*

La funzione di transizione σ dell'AC deve tenere in considerazione tutti i processi (fisici, chimici, ecc.) responsabili del cambiamento dei valori dello stato della cella, che sono ritenuti rilevanti per l'evoluzione del sistema. Così come l'insieme degli stati Q è stato decomposto nei sottostati Q_1, Q_2, \dots, Q_n , anche la funzione di transizione σ è decomposta in “processi elementari”. A loro volta, i processi elementari si suddividono in “trasformazioni interne”, T_1, T_2, \dots, T_p , e “interazioni locali”, I_1, I_2, \dots, I_q .

Le trasformazioni interne determinano il cambiamento dei valori dei sottostati della cella dovuti esclusivamente alle interazioni tra i sottostati della cella stessa oppure semplicemente allo scorrere del tempo. In altri termini le trasformazioni interne non dipendono dallo stato delle celle del vicinato ma solo dallo stato della cella centrale. Le interazioni locali determinano, invece, il cambiamento dei valori dei sottostati della cella dovuti all'interazione con le celle del vicinato.

Per ogni trasformazione interna T_i ($i = 1, 2, \dots, p$) è definita una funzione:

$$\sigma_{T_i} : Q_{T_i} \rightarrow Q'_{T_i}$$

dove Q_{T_i} e Q'_{T_i} sono prodotti cartesiani di elementi di S .

Allo stesso modo, per ogni interazione locale I_j ($j = 1, 2, \dots, q$) è definita una funzione

$$\sigma_{I_j} : Q_{I_j}^m \rightarrow Q'_{I_j}$$

dove Q_{I_j} e Q'_{I_j} sono prodotti cartesiani di elementi di S ed m è il numero di celle del vicinato.

L'evoluzione del sistema è ottenuta applicando, secondo un ordine che dipende dalle caratteristiche del fenomeno modellato, le trasformazioni interne e le interazioni locali a ogni cella dell'AC. Questa assunzione, tuttavia, non è giustificabile a priori e deve essere verificata empiricamente nella fase di simulazione.

- *Influenze esterne*

In alcuni casi è necessario considerare qualche tipo di input dal “mondo esterno” che tenga conto di influenze non descrivibili in termini di leggi locali dell'AC. Di conseguenza la definizione del modello può prevedere la definizione di una o più funzioni speciali e/o addizionali. Tipici esempi di influenze esterne sono l'innescò di fenomeni franosi in modelli di simulazione di flussi detritici, o l'afflusso meteorico alla superficie in modelli di infiltrazione nel suolo.

- *Dimensione della cella, passo temporale e relazione di vicinanza*

La scelta del passo temporale e spaziale deve essere fatta in relazione ai processi elementari considerati. Nell'operare tale scelta, a causa dell'elevata complessità dei fenomeni considerati, è possibile incorrere in alcuni problemi: la dimensione più opportuna per la cella potrebbe essere diversa per diversi processi elementari; inoltre alcune interazioni locali potrebbero richiedere clock più piccoli rispetto ad altri processi elementari; infine la relazione di vicinanza potrebbe variare da un'interazione locale all'altra. In questi casi si procede nel seguente modo: la dimensione della cella e il clock dell'AC sono scelti tra i valori più piccoli tra quelli considerati e, nel caso siano definiti più vicini, la loro unione è scelta come vicinato dell'AC.

4.1.2 Estensione della definizione di Automa Cellulare per la modellazione di fenomeni macroscopici

Un Automa Cellulare per la modellazione di fenomeni macroscopici complessi è formalmente definito nel seguente modo (DI GREGORIO & SERRA, 1999, D'AMBROSIO, 2003):

$$AC = \langle Z^d, Q, P, X, \sigma, E, \gamma \rangle$$

dove:

$Z^d = \{i \equiv (i_1, i_2, \dots, i_d) \mid i_k \in Z \forall k = 1, 2, \dots, d\}$ è l'insieme dei punti del reticolo d -dimensionale che definisce lo spazio cellulare dell'AC;

Z è l'insieme dei numeri interi;

$Q = Q_1 \times Q_2 \times \dots \times Q_n$ è l'insieme finito degli stati dell'automa elementare, espresso come prodotto cartesiano dei sottostati Q_1, Q_2, \dots, Q_n ;

$P = \{p_1, p_2, \dots, p_l\}$ è l'insieme finito dei parametri dell'AC;

$X = \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_{m-1}\}$ è l'insieme finito degli m vettori d -dimensionali $\xi_j = \{\xi_{j1}, \xi_{j2}, \dots, \xi_{jd}\}$ che definiscono $V(X, i) = \{i + \xi_0, i + \xi_1, \dots, i + \xi_{m-1}\}$, l'insieme delle coordinate delle celle vicine alla generica cella i di coordinate (i_1, i_2, \dots, i_d) ; X è detto indice o relazione di vicinanza;

$\sigma: Q^m \rightarrow Q$ è la funzione di transizione deterministica dell'automa elementare. Essa è decomposta nelle trasformazioni interne, $\sigma_{T_1}, \sigma_{T_2}, \dots, \sigma_{T_p}$ e nelle interazioni locali, $\sigma_{I_1}, \sigma_{I_2}, \dots, \sigma_{I_q}$.

Per ogni interazione locale σ_{I_k} può essere definita una particolare relazione di vicinanza X_{I_k} ($k = 1, 2, \dots, q$). In tal caso vale $X = X_{I_1} \cup X_{I_2} \cup \dots \cup X_{I_q}$;

$E = E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_s \subseteq \square^d$ è l'insieme delle celle di \square^d soggette a influenze esterne;

$\gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_s\}$ è l'insieme finito delle funzioni che definiscono gli input esterni per l'AC; $\gamma_i : \mathbb{N} \times E_i \times Q \rightarrow Q (i = 1, 2, \dots, s)$, essendo \mathbb{N} l'insieme dei numeri naturali, rappresentanti i passi dell'AC.

Capitolo IV – Un modello matematico di flusso e trasporto agli AC macroscopici

Basandosi sulle equazioni discrete del flusso e del trasporto nei mezzi porosi descritte nel II Capitolo, si procede in questa fase alla definizione del modello matematico basato sugli Automi Cellulari macroscopici, descritti nel capitolo precedente.

Questo consentirà l'implementazione, nell'ambiente di programmazione Camelot, di un codice di calcolo capace di funzionare in ambiente parallelo.

1. Il modello AC per la simulazione del flusso e del trasporto in un mezzo poroso

Il modello AC proposto è costituito da un dominio tridimensionale, partizionato in celle cubiche di ampiezza uniforme, descritte dalla seguente struttura funzionale:

$$AC = \langle E^d, Q, P, X, \sigma \rangle$$

dove:

$E^d = \{(x,y,z) | x,y,z \in N, 0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y, 0 \leq z \leq l_z\}$ è l'insieme delle celle identificate dai punti con coordinate intere dove il fenomeno evolve;

N è l'insieme dei numeri naturali, l_x , l_y e l_z rappresentano i limiti della regione;

Q è l'insieme finito degli stati per una cella, dato dal prodotto cartesiano dell'insieme dei sottostati:

$$Q = Q_h \times Q_\psi \times Q_g \times Q_K \times Q_\delta \times Q_D \times Q_C$$

dove Q_h è il sottostato che descrive il carico totale della cella,

Q_ψ è il sottostato che descrive il carico piezometrico,

Q_θ descrive il contenuto idrico (può indicare quindi il valore del contenuto di umidità in volume θ_0 , a seconda delle equazioni caratteristiche adottate, la *water saturation* S_w o la *effective saturation* S_e),

Q_K descrive il valore della permeabilità,

Q_σ indica, nel caso di analisi in condizioni transitorie, il valore di un parametro necessario alla definizione di un criterio di stabilità del sistema (generalmente associato al termine generale di immagazzinamento),

Q_D è il sottostato che descrive la dispersione cinematica,

Q_C è il sottostato che descrive la concentrazione di soluto;

P è l'insieme dei parametri globali dell'AC, costanti nello spazio (ma passibili di variazione nel tempo), che influiscono nella funzione di transizione, ed è costituito dalle dimensioni del lato dell'automa l_α , dal passo temporale Δt (in condizioni transitorie), dalla permeabilità a saturazione K_s , da una serie di parametri associati alle equazioni caratteristiche del flusso (come il contenuto idrico residuo nella cella, θ_r , il contenuto idrico a saturazione, θ_s , il carico capillare alla saturazione, ψ_s , l'indice di distribuzione dei pori, n , un parametro di continuità relativo al carico capillare, ψ_0 , il carico di gorgogliamento ψ_b) e del trasporto (come il coefficiente di diffusione molecolare, d_0 , la dispersività longitudinale, α_l e trasversale, α_t);

$$X = \{(0,0,0), (-1,0,0), (0,1,0), (0,0,-1), (0,0,1), (0,-1,0), (1,0,0)\}$$

identifica il vicinato di von Neumann tridimensionale (Figura 32), che influenza il cambiamento di stato nella cella centrale;

$\sigma: Q^7 \rightarrow Q$ è la funzione di transizione deterministica dell'automa elementare che, una volta fissate le condizioni iniziali (valori del carico idraulico e piezometrico, della permeabilità, della porosità, del contenuto idrico, della dispersività, del coefficiente di diffusione molecolare e della concentrazione iniziale di soluto delle celle) e le condizioni al contorno del problema in analisi, si basa su due passi elementari:

σ_1 (*trasformazione interna*): l'aggiornamento delle proprietà idrauliche del suolo nel saturo e nel non saturo (ovvero la conducibilità idraulica, K , il contenuto idrico, θ , la capacità specifica di ritenzione, C_r) dipendenti tramite le equazioni caratteristiche dal carico idraulico h , nonché l'aggiornamento delle proprietà idrodispersive (ovvero la dispersività D). Tale aggiornamento non è necessario solo ai fini dell'evoluzione della simulazione, ma anche per la determinazione delle condizioni di stabilità;

σ_2 (*interazione locale*): l'applicazione delle equazioni di bilancio di flusso e trasporto, per la determinazione del nuovo valore del carico idraulico h , del carico capillare ψ e della concentrazione di soluto C^s nella cella.

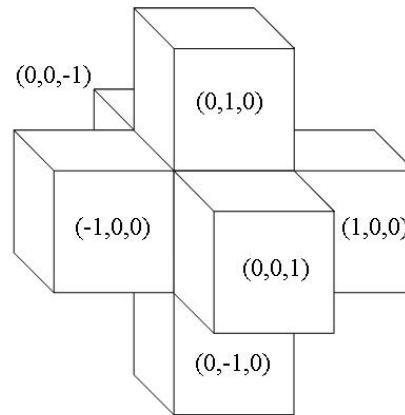


Figura 32: Vicinato di von Neumann tridimensionale

All'inizio della simulazione, le condizioni di tutti gli stati del sistema dipendono dal valore iniziale assegnato al carico idraulico h ed alla concentrazione di soluto C^s , mentre le condizioni al contorno possono essere assegnate sia in termini di flusso idrico entrante o uscente dal sistema (in questo caso si parla di condizioni al contorno di Neuman), ponendo determinati valori di carico idraulico o capillare (e quindi di contenuto idrico) su alcune celle del sistema (condizioni al contorno di Dirichlet) o ponendo le condizioni di tipo misto (condizioni al contorno di Cauchy).

Una volta definite le condizioni iniziali ed al contorno del problema, ed una volta inizializzati i parametri globali, la funzione di transizione può finalmente essere applicata alle celle del sistema. Di seguito saranno analizzati in dettaglio i due passi elementari che consentono l'evoluzione della configurazione del sistema nel tempo, schematizzati in Figura 33.

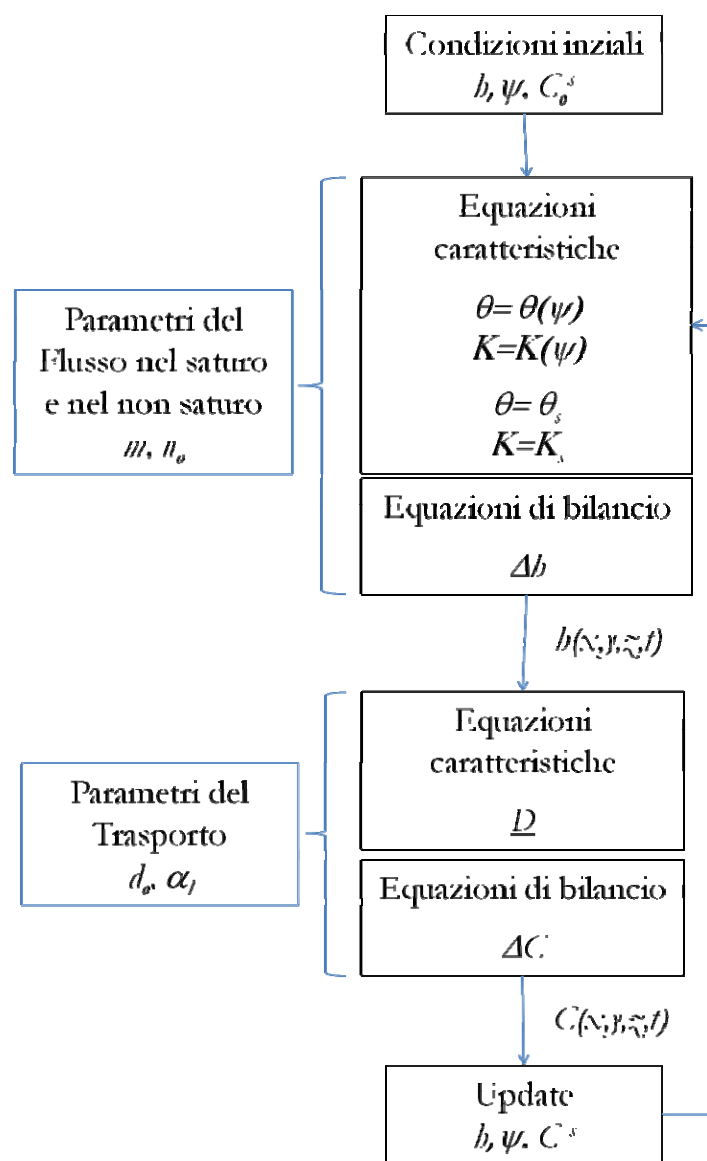


Figura 33: Schematizzazione dei due passi elementari su cui si basa l'evoluzione dell'AC

1.1 Aggiornamento delle proprietà idrauliche del suolo

Come discusso precedentemente, per la soluzione dell'equazione del flusso è necessario specificare le dipendenze non lineari tra la variabile assunta come indipendente, il carico idraulico h , ed i termini che rappresentano le proprietà idrauliche nel del particolare suolo considerato, rispettivamente nel non saturo, ovvero il contenuto idrico, θ , la capacità specifica di ritenzione, C_r , e la conducibilità idraulica, $K(\psi)$ e nel saturo, ovvero la porosità, n_o e la conducibilità idraulica a saturazione K_s .

Nel non saturo tali relazioni possono essere espresse in forma tabulare o, più comunemente, attraverso relazioni empiriche per adattamento del modello teorico con i dati sperimentali ottenuti in laboratorio o sul campo. Tra i numerosi modelli teorici disponibili in letteratura e presentati nel precedente capitolo, nell'applicazione del modello proposto saranno prese a riferimento le equazioni di VAN GENUCHTEN & NIELSEN (1985), comunemente scritte nella forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\psi) &= \mathcal{G}_r + (\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_r)[1 + \beta]^{-m} && \text{non saturo} \\ \mathcal{G}(\psi) &= \mathcal{G}_s && \text{saturo} \\ \\ K_r(\psi) &= (1 + \beta)^{-5m/2} [(1 + \beta)^m - \beta^m]^2 && \text{non saturo} \\ K_r(\psi) &= 1 \Rightarrow K_s && \text{saturo} \end{aligned}$$

dove θ_r è il contenuto idrico residuo, θ_s il contenuto idrico a saturazione,

$\beta = (\psi/\psi_s)^n$, ψ_s il carico capillare alla saturazione ed n un indice di distribuzione della dimensione dei pori, legato al parametro m dalla relazione $m = 1 - 1/n$, con n compreso tra 1.25 e 6.

I modelli teorici proposti non considerano il fenomeno dell'isteresi nelle dipendenze $\theta = \theta(\psi)$ e $K_r = K_r(\psi)$.

Nel saturo invece le variabili necessarie possono essere ricercate in valori di letteratura o direttamente ricavati da prove in situ.

È da sottolineare che l'aggiornamento delle proprietà idrauliche della cella non è necessaria solo ai fini dell'evoluzione della simulazione, ma anche per la determinazione delle condizioni di stabilità, come sarà evidenziato successivamente.

1.2 Applicazione dell'equazione discreta del flusso

Una volta aggiornate le proprietà idrauliche del suolo, si è pronti all'applicazione dell'equazione di bilancio, da cui sarà possibile ottenere per la singola cella il nuovo valore della variabile indipendente, il carico idraulico h , da cui dipendono i valori di tutti gli stati.

Il termine incognito dell'equazione di bilancio è Δh_o , indicante la variazione di carico nella cella in analisi tra l'istante t e l'istante $t+\Delta t$. Tale termine è dato dall'interazione della cella in analisi con tutte le celle del vicinato, per tutte le possibili direzioni. Considerando la generica direzione α , si avrà che la variazione di carico $\Delta h_{\alpha o}$ nella cella in analisi, dovuta solo all'interazione con la cella vicina nella direzione α , è pari a:

$$\Delta h_{\alpha o} = \frac{\Delta t}{V_o C_o} \left[Q_o + K_{\alpha o}(\psi_o) \left(\frac{h_\alpha - h_o}{l_\alpha} \right) A_\alpha \right] \quad \text{nel non saturo}$$

$$\Delta h_{\alpha o} = \frac{\Delta t}{n_o A_\alpha} \left[Q_o + K_{\alpha o} \left(\frac{h_\alpha - h_o}{l_\alpha} \right) A_\alpha \right] \quad \text{nel saturo}$$

La variazione del carico idraulico Δh_o nella cella è però dovuta all'interazione con tutto il vicinato, per cui:

$$\Delta h_o = \sum_{\alpha} \Delta h_{\alpha o}$$

Il nuovo valore del carico idraulico all'istante $t+\Delta t$ nella cella o sarà dunque pari a:

$$h_o = h_o + \Delta h_o = h_o + \sum_{\alpha} \Delta h_{\alpha o}$$

A partire da questo nuovo valore sarà possibile ricavare il carico capillare ($\psi = h - z$), aggiornare nuovamente le proprietà idrauliche del suolo e riapplicare l'equazione di bilancio per un nuovo intervallo temporale.

La procedura per l'applicazione della funzione di transizione è schematizzata in Figura 34 per un semplice caso bidimensionale, dove per semplicità non è stato considerato

alcun termine sorgente ed i termini legati alle dimensioni spaziali sono stati semplificati considerando la struttura cubica delle celle dell'automa.

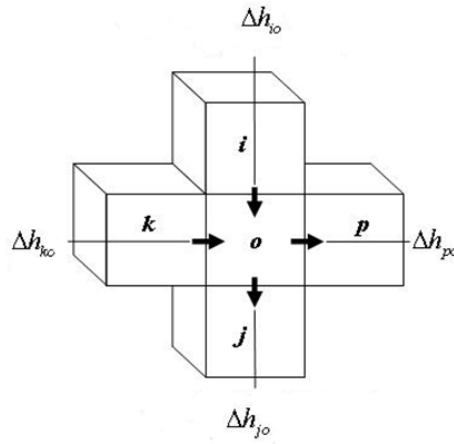


Figura 34: Funzione di transizione applicata alla cella o in un caso di infiltrazione bidimensionale

1.3 Aggiornamento delle proprietà idrodispersive del suolo

Anche per il trasporto, come già discusso per il flusso, per la soluzione dell'equazione è necessario specificare le dipendenze tra la variabile assunta come indipendente, la concentrazione C^s , ed i termini che rappresentano le proprietà idrauliche ed idrodispersive del particolare suolo considerato, ovvero il coefficiente di diffusione molecolare, d_o e la dispersività, α_o .

La relazione che lega i parametri idrodispersivi alle condizioni idrauliche è la seguente:

$$D_\alpha = n_o \cdot d_o + \alpha_l \cdot \left[K_s \left(\frac{h_o - h_\alpha}{l_\alpha} \right) \cdot A_\alpha \right]$$

Anche in questo caso l'aggiornamento delle proprietà idrodispersive della cella non è necessaria solo ai fini dell'evoluzione della simulazione, ma anche per la determinazione delle condizioni di stabilità.

1.4 Applicazione dell'equazione discreta del trasporto

Una volta ricavato il valore di carico idraulica h nella cella, si applica l'equazione di bilancio di massa dove questa volta la variabile indipendente risulta la concentrazione di soluto nella cella C .

$$\Delta C_{\alpha_o}^s = \frac{\Delta t}{n_o V_o} \rho_o^s \cdot \sum_\alpha \left(\left(\phi_o^h \cdot C_o^s \cdot \frac{1}{\rho_o^s} \right) + \left(d_o \cdot A_\alpha^h \cdot \frac{1}{\rho_o^s} \cdot \left(\frac{C_\alpha^s - C_o^s}{l_\alpha} \right) \cdot n_o \right) - \left(A_\alpha^h \cdot \frac{1}{\rho_o^s} \cdot D_\alpha \cdot \left(\frac{C_\alpha^s - C_o^s}{l_\alpha} \right) \right) \right)$$

La variazione di concentrazione di soluto ΔC_o^s nella cella è però dovuta all'interazione con tutto il vicinato, per cui:

$$\Delta C_o^s = \sum_\alpha \Delta C_{\alpha_o}^s$$

Il nuovo valore della concentrazione all'istante $t+\Delta t$ nella cella o sarà dunque pari a:

$$C_o^s = C_o^s + \Delta C_o^s = C_o^s + \sum_{\alpha} \Delta C_{\alpha_o}^s$$

A partire da questo nuovo valore sarà possibile aggiornare nuovamente le proprietà idrauliche del suolo e riapplicare le equazioni di bilancio per un nuovo intervallo temporale.

2. Quantizzazione dell'AC

Tra le molteplici condizioni che diversificano la natura dell'AC, quella basata sulla teoria dei sistemi quantizzati (ZIEGLER, 1998) è stata applicata al modello proposto al fine di ridurre, tramite il processo denominato “quantizzazione”, lo scambio di messaggi tra i singoli elementi dell'automa, e di ridurre quindi l'onere computazionale della simulazione.

Nella formulazione originale, il processo della quantizzazione a partire dalla discretizzazione degli stati di un processo continuo ne fissa l'evoluzione solo attraverso valori multipli di un definito valore, detto *quantum size*. Più specificatamente, le interazioni con il vicinato, definite dalle funzioni di transizione, determinano le variazioni nel tempo dello stato di una singola cella: se tra un passo temporale ed il successivo l'applicazione delle funzioni di transizione non consente alla cella di evolvere dallo stato D almeno allo stato $D \pm 1$ (dove la differenza tra i due stati è data dal *quantum size*), essa rimane quiescente, e non scambia informazioni con il vicinato. La quantizzazione rende l'Automa Cellulare *asincrono*, poiché ogni cella ad ogni iterazione decide, in base al valore del suo stato e di quello delle celle adiacenti, se essere aggiornata al passo temporale di calcolo oppure se restare “congelata” al passo temporale precedente.

Nel presente lavoro di tesi il concetto di quantizzazione è inteso in modo leggermente diverso rispetto alla formulazione originale. Infatti, mentre in ZIEGLER (1998) la cella può evolvere dallo stato D solo verso gli stati $D \pm 1$, $D \pm 2$, $D \pm 3$, e così via, potendo assumere solo alcuni valori ben definiti (è come se lo stato della cella potesse evolvere solo a scatti, o meglio a gradini), nel nostro caso l'evoluzione della cella è condizionata solo da un valore soglia, che considera per la cella in analisi e per il suo vicinato le differenze tra i sottostati che, attraverso le interazioni locali della funzione di transizione, determinano l'evoluzione della cella stessa. Se le differenze tra questi sottostati sono superiori al valore soglia, le interazioni con il vicinato sono consentite, e lo stato della cella può assumere qualsiasi valore numerico nel campo dei numeri reali.

Dal punto di vista fisico, tramite la quantizzazione si evita di considerare gli scambi di massa meno significativi tra le celle. Dal punto di vista computazionale, si introduce una

tecnica di controllo delle interazioni tra i costituenti elementari in grado di ridurre lo scambio di informazioni tra le celle dell'automa, e quindi di migliorare le prestazioni del modello, al di là dell'implementazione dello stesso in sistemi di calcolo parallelo.

Per il modello in esame la procedura di quantizzazione è stata applicata sul principale parametro che determina il moto, ovvero il gradiente del carico idraulico. Se la differenza di carico tra la cella o e la sua vicina j non è superiore ad una certa soglia, si ipotizza la quiescenza tra le stesse. La soglia (che rappresenta il *quantum size*) può essere di tipo statico, cioè determinata da un parametro costante Q su tutto l'automa, oppure di tipo dinamico, cioè dipendente dallo stato delle celle nel tempo. In quest'ultimo caso, adottando un metodo euristico basato sull'analisi delle curve di ritenzione $\theta = \theta(\psi)$, la soglia può essere considerata inversamente proporzionale al grado di saturazione della cella:

$$quantum = k \frac{\theta_{sat}}{\theta}$$

L'uso della quantizzazione dinamica introduce un'ulteriore estensione del modello AC, che diventa oltre che asincrono *non uniforme*: la funzione di transizione varia infatti da cella a cella, perché in ogni cella la soglia dipende da un fattore locale, rappresentato dal grado di saturazione. In un certo senso si può affermare che sia la cella stessa a decidere di volta in volta, in relazione al suo grado di saturazione, quale deve essere il valore della soglia a lei associato.

All'aumentare del valore della soglia applicata alle differenze di carico tra due celle contigue, si ottengono due effetti contrapposti: da un lato il numero di messaggi scambiati diminuisce, dall'altro aumenta l'errore, inteso come differenza tra la soluzione dello schema quantizzato e quella dello schema non quantizzato.

3. Scalabilità dell'AC

Si è accennato in precedenza alla misura delle prestazioni delle macchine parallele tramite l'analisi della scalabilità. La scalabilità computazionale dell'intero sistema è tanto maggiore quanto più il dominio è grande, poiché minore è in proporzione l'*overhead* dovuto alle comunicazioni remote. La risoluzione della struttura degli automi può essere pertanto ottimizzata rispetto alla esigenza di rendere efficiente il calcolo parallelo o, viceversa, la

dimensione del problema in analisi può essere indicativa del numero di nodi della macchina parallela da utilizzare.

I due parametri impiegati per testare la scalabilità computazionale di un sistema sono lo *speedup* e l'*efficienza*:

$$S_n = \frac{T_s}{T_n} \quad E_n = \frac{S_n}{n} = \frac{T_s}{nT_n}$$

Il caso ideale è quello di uno *speedup* lineare, vale a dire uno speedup di 2 su 2 processori, di 3 su 3 processori e così via. Questa situazione si avrebbe se l'algoritmo parallelo non introducesse *overhead*. In realtà lo *speedup* è limitato soprattutto dai tempi di comunicazione fra i differenti processori. Se il problema non è sufficientemente complesso e i tempi di comunicazione non sono trascurabili rispetto al tempo di computazione, lo *speedup* si riduce notevolmente.

L'*efficienza* è un indice della frazione di tempo utilmente speso dai processori. Naturalmente si avrebbe una *efficienza* ideale del 100% se tutti i processori fossero sfruttati utilmente (tempi di comunicazione ed altri *overhead* pari a zero).

Un sistema parallelo si dice scalabile se l'efficienza può essere mantenuta costante, all'aumentare dei processori, aumentando anche la dimensione del problema. Se variando in modo lineare il numero di processori basta variare in modo lineare anche la dimensione del problema e l'efficienza rimane costante, allora il sistema si dice *altamente scalabile*.

Capitolo V – Validazione del modello matematico agli AC

Il modello matematico di flusso descritto nel precedente capitolo, in questa fase è stato implementato in un codice di calcolo su macchina parallela sfruttando l'ambiente di programmazione Camelot.

Il modello così ottenuto è stato impiegato per riprodurre una prova di emungimento in acquifero non confinato condotta sul sito sperimentale del CNR-IMAA di Marsico Nuovo (PZ).

1. L'ambiente CAMELOT per la simulazione del modello agli AC

La simulazione del modello proposto è avvenuta all'interno di un ambiente ad alte prestazioni appositamente sviluppato per la simulazione di Automi Cellulari denominato CAMELOT (DATTILO & SPEZZANO, 2003). In CAMELOT ogni funzione di transizione generalmente usa la stessa regola locale, ma è possibile definire alcune celle con differenti funzioni di transizione (Automi Cellulari eterogenei). Diversamente dagli approcci cellulari che fanno riferimento al modello di base, in cui lo stato di ogni cella è definito come un singolo bit o un insieme di bit, lo stato di una cella è definito come un insieme di sottostati tipati. Questo permette di estendere il *range* delle applicazioni che possono essere simulate attraverso algoritmi cellulari. È stato introdotto un vicinato logico che può rappresentare un ampio *range* di differenti vicinati all'interno dello stesso raggio e che può essere dipendente dal tempo.

Tra le componenti dell'ambiente di simulazione CAMELOT vi sono procedure di *load balancing* basate sulla tecnica di decomposizione di tipo *scatter* che consente di distribuire in maniera bilanciata la computazione fra i processori di una macchina parallela. Tutte le comunicazioni sono eseguite tramite la libreria *Message Passing Interface* (MPI) standard che consente a CAMELOT di essere eseguito attraverso diverse piattaforme hardware. Più specificatamente, l'ambiente utilizzato è in grado di determinare per un assegnato sistema di AC il numero ottimo di nodi nella macchina parallela che rende minimo l'*overhead* dovuto alle comunicazioni remote tra i singoli processori. Tale processo, che identifica la "scalabilità computazionale" del sistema di AC, diventa sempre più efficiente quanto maggiore è la

dimensione del problema da analizzare. Pertanto, il passaggio dalla micro alla meso-scala avviene senza alterare le regole locali dell'AC e, nel contempo, l'efficienza computazionale è migliorata dall'ambiente di lavoro.

Infine, il linguaggio di programmazione ad alto livello utilizzato per la scrittura degli algoritmi cellulari, denominato CARPET (SPEZZANO & TALIA, 1998), oltre a garantire la possibilità di usare procedure di *steering*, che sovrintendono ad operazioni di tipo globale e non applicate alle singole celle, permette anche di utilizzare l'AC come un sistema quantizzato (ZEIGLER, 1998), al fine di ridurre lo *state update transmission*, cioè il tempo dedicato dal processore a trasmettere le informazioni relative agli stati delle singole celle tra tutti gli elementi dell'AC.

2. L'apparato sperimentale: il Laboratorio Hydrogeosite

Il codice è stato applicato per riprodurre la prova di emungimento condotta sul sito sperimentale *Hydrogeosite*, campo prove sperimentali del Laboratorio di Idrogeofisica dell'IMAA-CNR sito in Marsico Nuovo (PZ). La *facility* è una vasca in cemento armato di circa 250 m³ con dimensioni 12 m x 7 m x 3 m situata all'interno di una struttura in acciaio zincato dotata di una copertura che permette di poter seguire le sperimentazioni in maniera continua. L'*Hydrogeosite* è il primo sito, in territorio nazionale, che permette la realizzazione di esperimenti, in condizioni controllate, in campo idrogeologico, ambientale, ingegneristico-geologico in associazione con studi idrogeofisici. L'*Hydrogeosite* è attualmente utilizzato per lo studio dei processi di infiltrazione dell'acqua e per la simulazione delle dinamiche spazio-temporali dei processi di pompaggio idraulico, per lo sviluppo e la scoperta di nuove relazioni tra parametri geofisici ed idrogeologici e per provare e calibrare nuovi strumenti e tecniche idrogeofisiche.

Tutto ciò viene realizzato utilizzando sia tecniche idrauliche, come le prove di emungimento e di risalita, che geofisiche di tipo passivo (Potenziali Spontanei, SP). In questa fase l'*Hydrogeosite* è stato riempito con un mezzo omogeneo costituito da una sabbia a matrice quarzosa (95% di SiO₂), avente una granulometria con un'alta percentuale (86,4 %) di grani con dimensione tra 0.063 mm e 0.125 mm ed una permeabilità media-alta (ordine del 10⁻⁵ m/s). La vasca, poi, è stata fornita di 17 piezometri (controllati da freatimetri elettronici) ed un pozzo di emungimento (pompaggio con pompa peristaltica), (Figura 35). Inoltre, la vasca è dotata di aperture di ispezione lungo il profilo verticale

tramite le quali è possibile installare le apparecchiature per monitorare le condizioni di filtrazione (Figura 36).

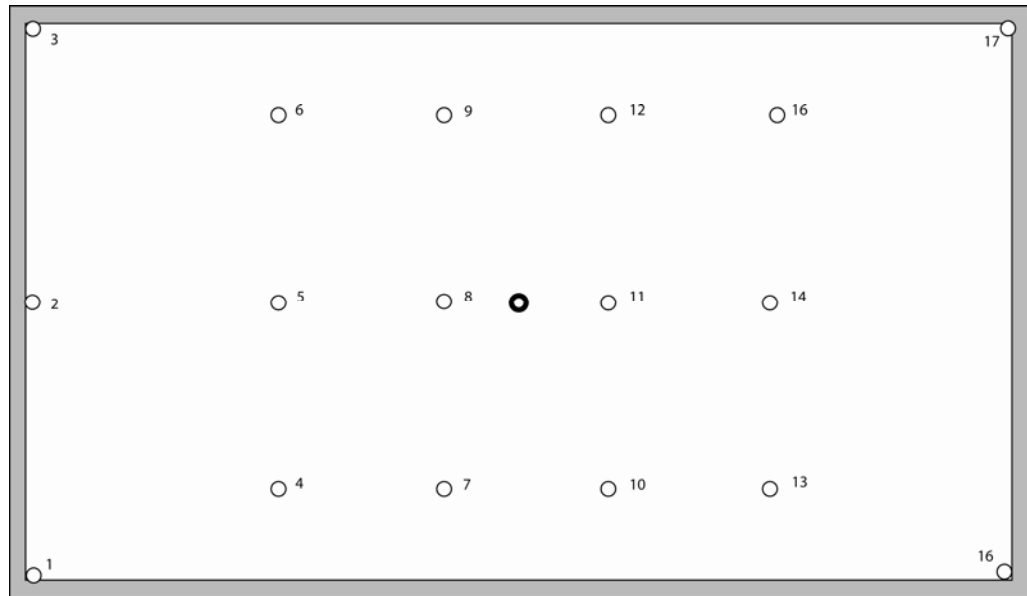


Figura 35: Disposizione dei piezometri e del pozzo dell'Hydrogeosite

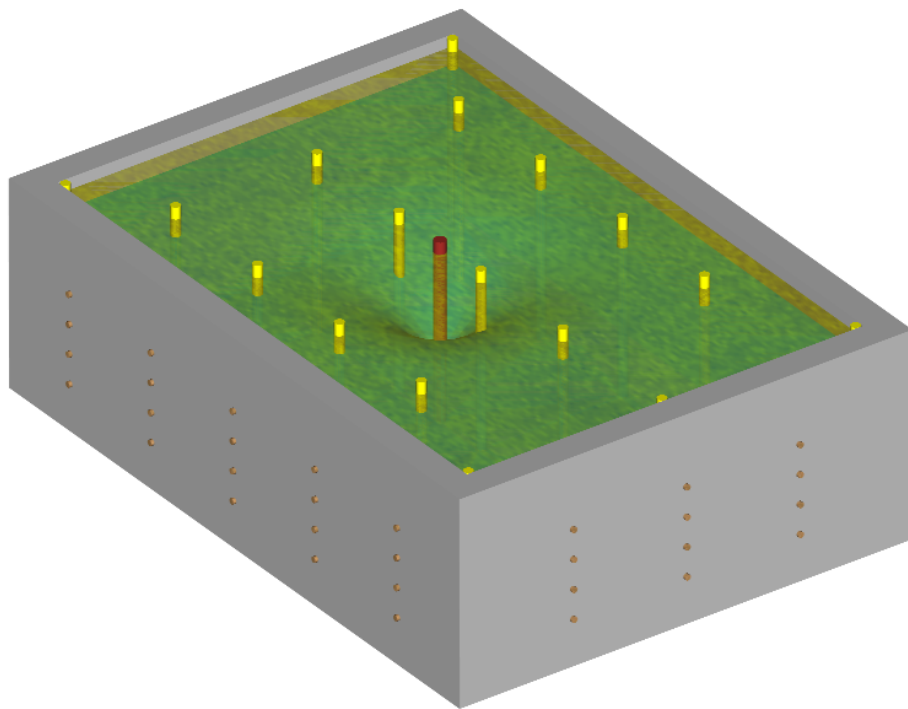


Figura 36: Ricostruzione tridimensionale dell'Hydrogeosite

Infine, per il mantenimento delle condizioni di carico idraulico costante sul contorno della vasca è stato progettato un sistema basato sull'impiego di due serbatoi in grado di assolvere la doppia funzione del carico e dello scarico d'acqua. Questi serbatoi hanno il compito di fissare il livello di saturazione della sabbia ad un'altezza desiderata attraverso il collegamento con un "anello" di tubi drenanti disposto lungo il perimetro interno della vasca (Figura 37).



Figura 37: Vista di insieme dell'apparato sperimentale

Prima di avviare la fase sperimentale, sono state eseguite una serie di simulazioni al computer con il codice ModFlow atte a comprendere il comportamento del sistema (mezzo omogeneo con presenza di falda) in situazioni di stress quali il pompaggio o l'immissione di acqua attraverso i pozzi di cui la vasca è dotata. Pertanto, note le caratteristiche morfologiche della vasca e quelle idrodinamiche del terreno, si è ricavato il valore della portata massima estraibile e si è effettuato un test di pompaggio sintetico, durante il quale si è realizzato un emungimento dal pozzo centrale (Figura 38).

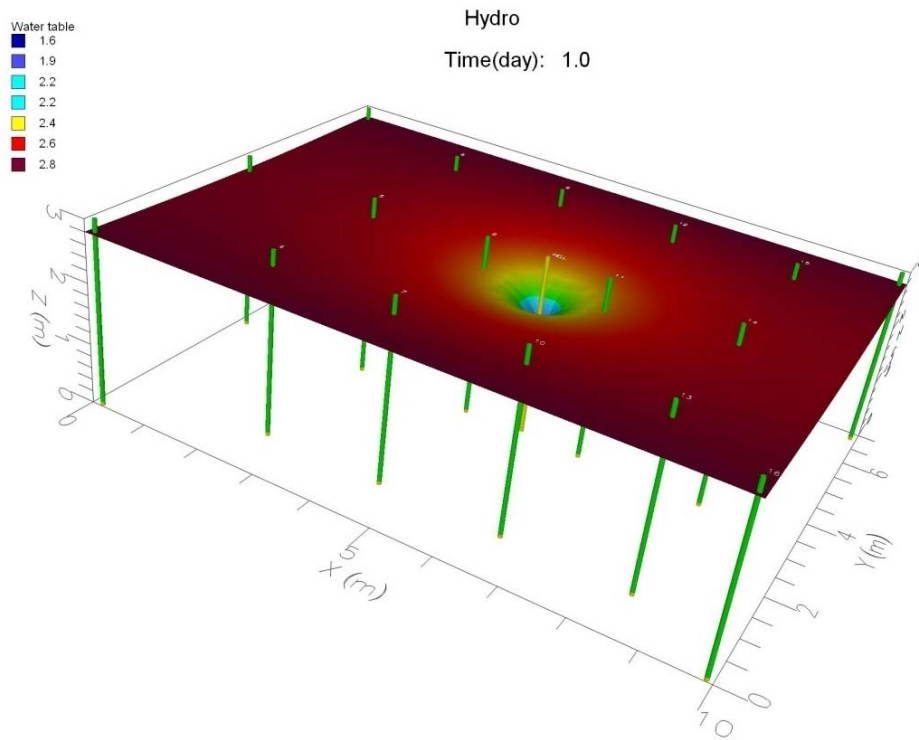


Figura 38: Superficie piezometrica risultante dalla simulazione con ModFlow

2.1 Prova di emungimento nel Laboratorio Hydrogeosite

La prova di emungimento è stata condotta il 15 aprile del 2008 con una pompa peristaltica assegnando una portata di estrazione pari a 0.12 l/s. Durante la prova sono stati registrati, attraverso dei *divers* ad acquisizione automatica, gli abbassamenti di carico idraulico rispetto alle condizioni di carico iniziali, pari a 2.8 m su tutti e quattro i lati. Le condizioni di carico al contorno sono state mantenute costanti per tutta la prova.

Il pompaggio ha avuto una durata di circa 8 ore. In condizioni di stazionarietà, raggiunte abbastanza rapidamente, sono stati ottenuti gli abbassamenti riportati in Tabella 1.

Pozzo	1.15 m
Piez. 1	0.15 m
Piez. 2	0.15 m
Piez. 3	0.15 m
Piez. 4	0.18 m
Piez. 5	0.22 m
Piez. 6	0.20 m
Piez. 7	0.25 m
Piez. 8	0.42 m
Piez. 9	0.26 m
Piez. 10	0.26 m
Piez. 11	0.42 m
Piez. 12	0.27 m
Piez. 13	0.21 m
Piez. 14	0.24 m
Piez. 15	0.20 m
Piez. 16	0.17 m
Piez. 17	0.17 m

Tabella 1: Abbassamenti in stazionario registrati durante la prova di emungimento

I grafici abbassamenti-tempo registrati dalle apparecchiature di monitoraggio nel pozzo (Figura 39), nel piezometro 8 (Figura 40), nel piezometro 15 (Figura 41) ed una sezione schematica delle condizioni di carico durante la prova (Figura 42), sono di seguito riportati.

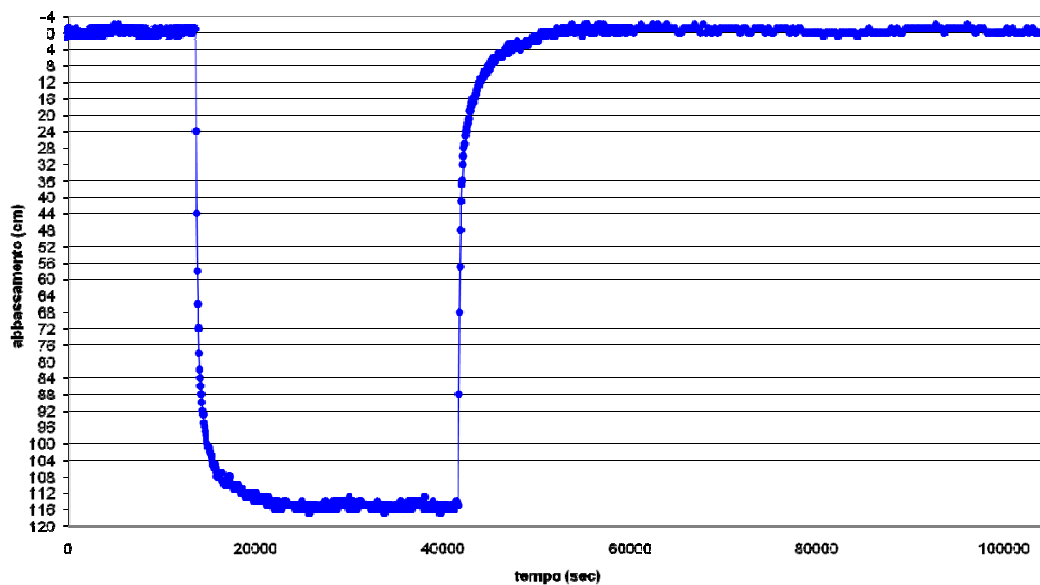


Figura 39: Grafico degli abbassamenti registrati nel pozzo durante la prova di pompaggio

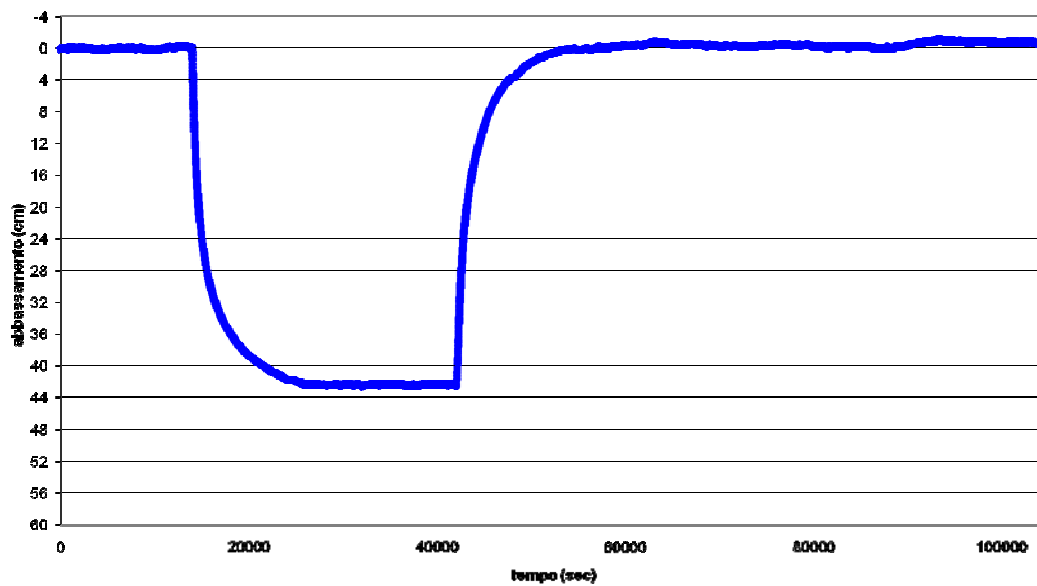


Figura 40: Grafico degli abbassamenti registrati nel piezometro 8 durante la prova di pompaggio

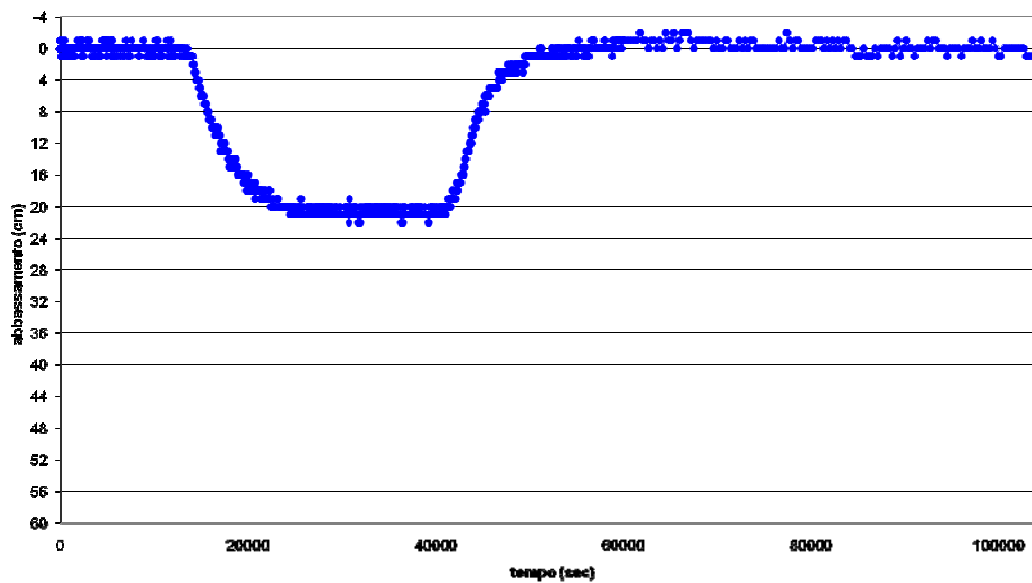


Figura 41: Grafico degli abbassamenti registrati nel piezometro 15 durante la prova di pompaggio

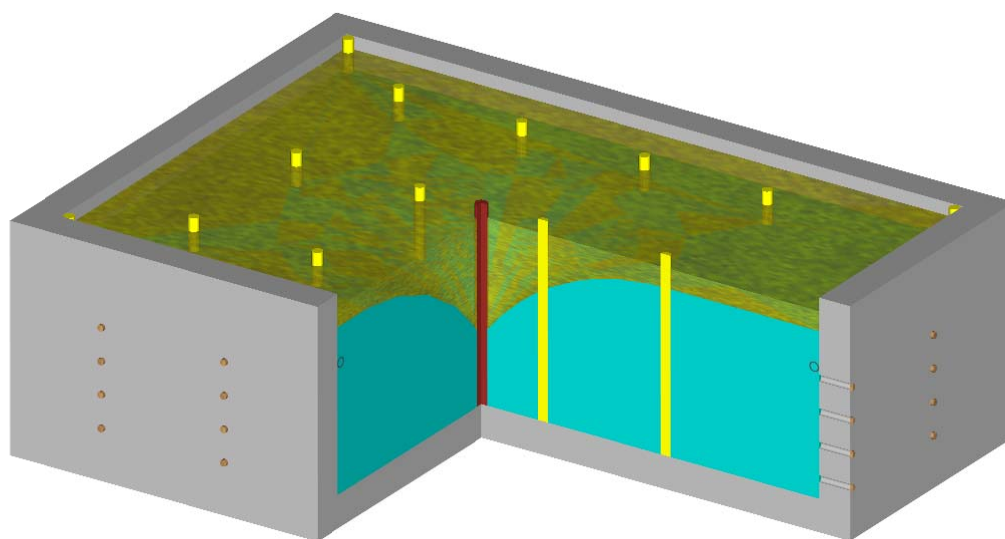


Figura 42: Schema della sezione del sito sperimentale durante la prova di emungimento

2.2 Caratterizzazione del mezzo poroso saturo

Ottenute le serie temporali degli abbassamenti dovuti all'emungimento dal pozzo centrale, si è passati alla determinazione della permeabilità K e della porosità efficace S_y (specific yield) del mezzo poroso. La condizione di acquifero non confinato ha comportato l'utilizzo del metodo delle Type Curve di *Neuman* (1975) che fornisce i due parametri ricercati per un acquifero non confinato, omogeneo e anisotropo, di estensione infinita con pozzo completamente penetrante e con drenaggio ritardato. Secondo tali ipotesi, la curva abbassamenti-tempi adimensionali, è a forma di S (S-shaped curve), costituita da un primo tratto molto ripido corrispondente agli istanti iniziali, un secondo tratto più piatto nei tempi intermedi e di nuovo una parte ripida fino al raggiungimento della condizione di pseudo-stazionarietà. Questo andamento della curva si differenzia dalla soluzione di Theis per acquiferi confinati per la presenza del tratto intermedio che interrompe la monotonicità della curva. Questo tratto è dovuto essenzialmente al drenaggio ritardato della quantità d'acqua immagazzinata nel non saturo. Osservando le curve abbassamenti-tempi adimensionali sperimentali si scopre che esse sono monotoniche ovvero sono prive del tratto intermedio (Figura 43).

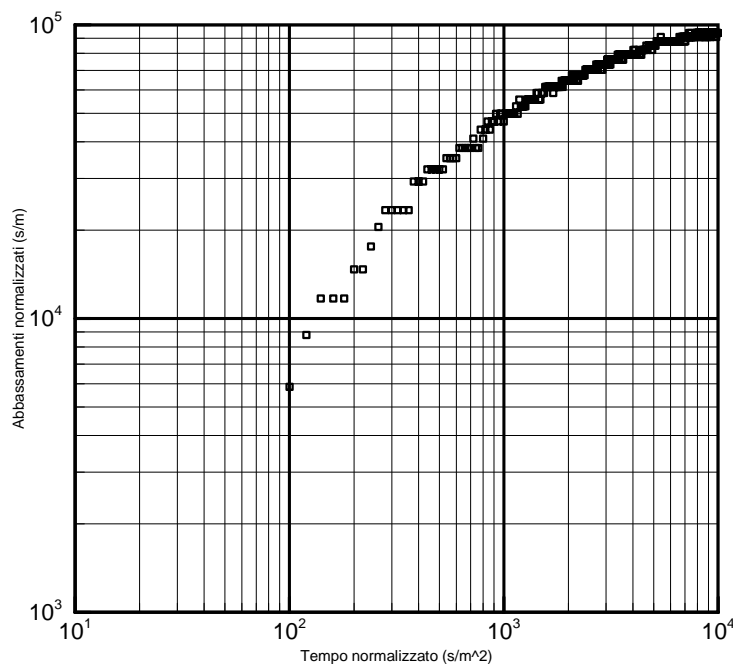


Figura 43: Grafico bi-logaritmico degli abbassamenti normalizzati ($w_n = 4\pi Bw/Q$) rispetto al tempo normalizzato ($t_n = t/r^2$) per il piezometro 11. Uguale comportamento si ha in tutti gli altri piezometri monitorati

La ragione principale di tale comportamento è da ascrivere allo spessore della zona satura (circa 2,80 m) molto più grande rispetto a quello non saturo (circa 0,20 m). Ciò implica che la quantità d'acqua immagazzinata nel non saturo è piccola e pertanto il drenaggio ritardato è trascurabile. Ciò è stato trovato anche da *Tartakovsky* e *Neuman* (2007) analizzando una serie di prove di emungimento realizzate a Cape Code (Massachusetts) e corrisponde ad una condizione in cui il valore del parametro adimensionale k_D è maggiore di 10. Inoltre l'effetto del flusso verticale del non saturo sugli abbassamenti in un piezometro diminuisce all'aumentare del grado di penetrazione del pozzo e del piezometro: nel modello fisico Hydrogeosite sia i piezometri che il pozzo di emungimento sono completamente penetranti.

Ulteriore conferma di tale interpretazione viene dalla applicazione del metodo delle Type Curve di *Neuman* (1975) alla prova di emungimento al fine di determinare la permeabilità K e la porosità efficace S_y . (Figura 44).

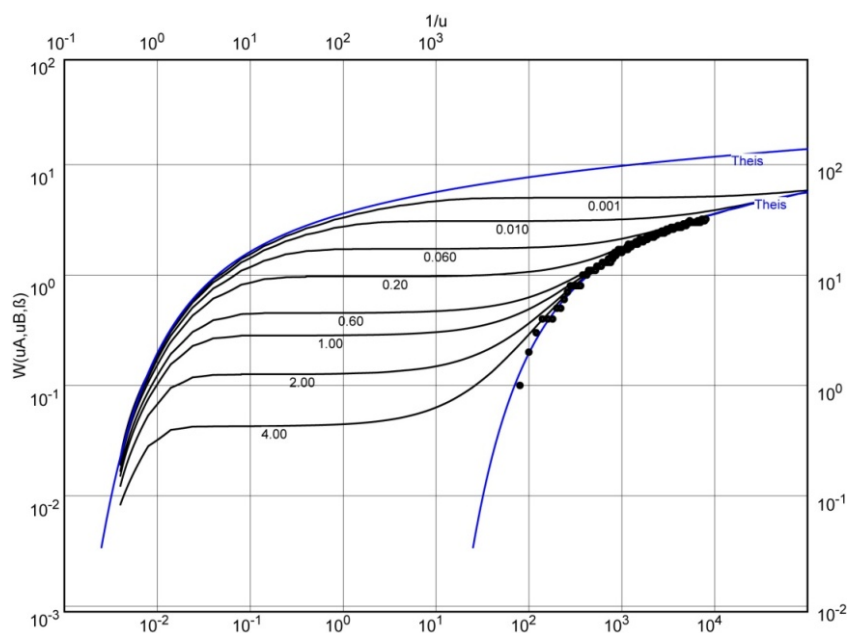


Figura 44: Analisi degli abbassamenti per il piezometro 11 con il metodo di Neuman (1975). Uguale comportamento si ha per tutte le curve abbassamenti-tempo relative agli altri piezometri monitorati

Come si può vedere i punti si allineano sulla Type Curve di Theis confermando quanto precedentemente teorizzato. Applicando tale metodo a tutti i piezometri monitorati si sono ottenuti i risultati riportati in Tabella 2.

Piezometro	Permeabilità K (10^{-5} m/s)	Porosità efficace S_y (10^{-2})
4	3.82	1.86
5	3.41	1.91
8	3.41	1.82
9	3.41	2.4
10	3.41	2.14
11	2.71	3.03
14	3.04	1.89
media	3.31	2.15

Tabella 2: Valori di permeabilità K e di porosità efficace S_y ottenuti con il metodo delle Type Curve di *Neuman* (1975) in tutti i piezometri monitorati

I valori ottenuti della permeabilità ricadono nell'ordine di grandezza suggerito dal fornitore della sabbia e ciò è un'ulteriore conferma della correttezza dell'interpretazione utilizzata in tale studio di caratterizzazione.

2.3 Validazione del codice ad AC

Il modello è stato implementato per riprodurre la prova sperimentale, utilizzando l'ambiente Camelot, con una dimensione dell'automa pari a 3.281.250 celle cubiche.

I valori numerici dei parametri impiegati nella esecuzione del modello sono riportati in Tabella 3. Le equazioni caratteristiche assumono la forma (Paniconi et al., 1991):

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}(\psi) &= \mathcal{G}_r + (\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_r)[1 + \beta]^{-m} & \psi < \psi_o \\
 \mathcal{G}(\psi) &= \mathcal{G}_r + (\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_r)[1 + \beta_o]^{-m} + S_s(\psi - \psi_o) & \psi \geq \psi_o
 \end{aligned}$$

Contenuto idrico residuo	θ_r	0.035
Parametro di Van Genuchten	m	2.199885
Carico capillare a saturazione	ψ_0	-3 cm
Porosità	n_o	0.3941
Passo temporale	Δ_t	0.2 sec
Lato cella cubica	l	4 cm
Condizioni al contorno	H_o	2.80 m

Tabella 3: Parametri utilizzati nella implementazione del codice

Per i valori di permeabilità a saturazione K_s e capacità di campo S_s sono stati eseguiti vari tentativi per ottimizzare il risultato. La parte più delicata della implementazione del modello è stata la schematizzazione del pozzo di emungimento.

2.3.1 Schematizzazione del pozzo

Per simulare l'emungimento di acqua da una colonna di terreno schematizzata con delle celle "pozzo" (colonna verticale, Figura 45) si pone carico (h_{fondo}), inizialmente pari alle condizioni iniziali. Poi, per ogni cella della colonna verticale del pozzo, si fissa la condizione:

- ✓ se la cella si trova ad una quota al di sotto del carico iniziale allora si considera satura;
- ✓ se invece la cella si trova ad una quota superiore a quella del carico iniziale allora si considera vuota.

Si procede determinando quindi il valore del carico delle celle pozzo ponendo la condizione:

- ✓ se le celle del pozzo sono ad una quota minore di h_{fondo} (cioè nella condizione iniziale), allora il loro carico è proprio uguale ad h_{fondo} ;
- ✓ altrimenti il loro carico è uguale a quello della quota.

Porre $h=quota$ per le celle del pozzo al di sopra del carico (e quindi prive di acqua al loro interno) è utile soprattutto per le celle "terreno" nell'intorno alla stessa quota. Infatti, se la cella terreno è satura, per essa si avrà $h > quota$, quindi $h_{cella} "terreno" \geq h_{cella} "pozzo"$ e sarà possibile un afflusso dalla cella "terreno" alla cella "pozzo". Se la cella "terreno" è invece

insatura, si avrà $h_{cella} \text{ "terreno"} < h_{cella} \text{ "pozzo"}$ e non sarà possibile l'afflusso. La Figura 45, che mostra i valori di carico nell'intorno del pozzo al passo di simulazione iniziale ed ad un passo n, dovrebbe aiutare a chiarire meglio quanto espresso.

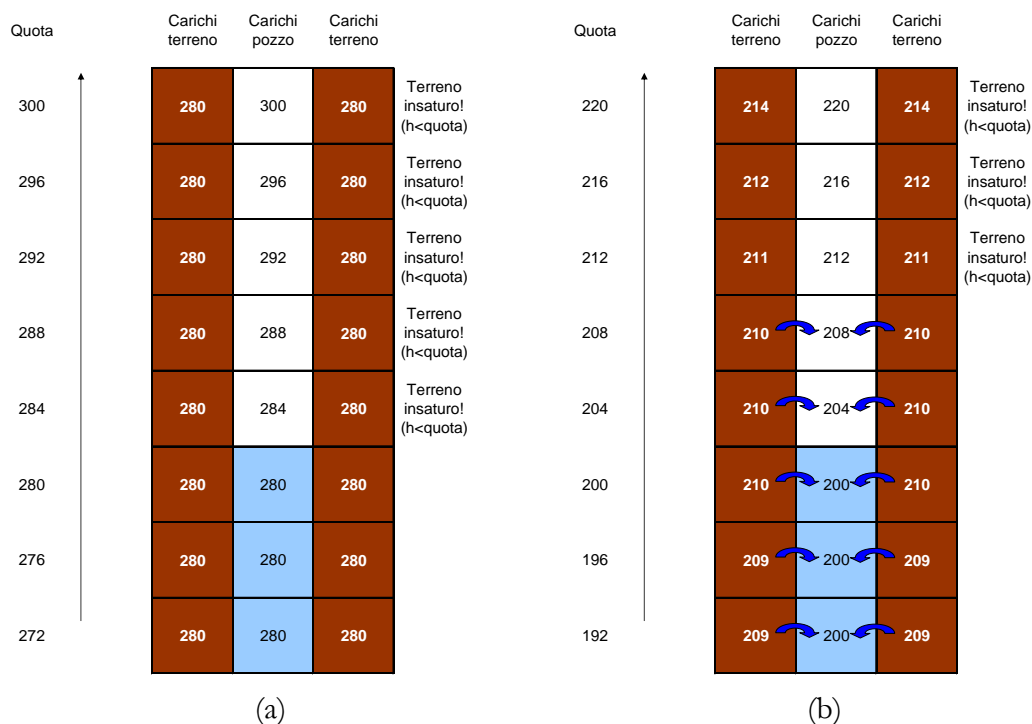


Figura 45: Schematizzazione del pozzo al passo iniziale (a) e ad un generico passo successivo (b)

Ovviamente, nel caso la cella "vuota" nel pozzo abbia un valore di carico maggiore del suo intorno, si impedisce che ci possa essere afflusso da questa cella all'intorno.

L'afflusso idrico nel pozzo è dato dall'equazione di Darcy:

$$\Phi_{\alpha}^c = -K_s \left(\frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}/2} \right) A_{\alpha} = -2K_s (h_{\alpha} - h_c) l_{\alpha}$$

Nell'equazione K_s è la permeabilità a saturazione delle celle dell'intorno (solo le celle sature possono fornire acqua), ed inoltre è stato posto $l_{\alpha}/2$ poiché si considera che il percorso compiuto dall'acqua per giungere al pozzo sia pari non all'intera lunghezza della cella dell'intorno, ma alla sua metà.

Il flusso in ingresso nel pozzo ad ogni passo di calcolo è pari alla sommatoria dei flussi dalle singole celle dell'intorno:

$$\sum_{c'' \text{ pozzo}''} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}^c$$

Il flusso in uscita non è calcolato considerando le celle singolarmente, ma nella fase dello “*steering*”, cioè considerando l'Automa Cellulare nel suo insieme (CAMELOT consente questa possibilità al termine di ogni passo di calcolo).

Il volume in ingresso nel pozzo V_{in} alla fine di ogni passo di calcolo è dato dunque da:

$$V_{in} = \Delta t \cdot \sum_{c'' \text{ pozzo}''} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}^c$$

mentre il volume in uscita V_{out} è dato dall'emungimento. Il bilancio di massa all'interno del pozzo è dato quindi da:

$$V^{t+\Delta t} = V^t + V_{in} - V_{out}$$

Dividendo infine $V^{t+\Delta t}$ per l'area di base del pozzo (pari ad A_{α}) si ottiene il valore del carico sul pozzo (h_{fondo}) per il successivo passo temporale.

In quanto descritto non si è posto che il volume in ingresso al pozzo sia in ogni istante pari al volume in uscita, altrimenti non si avrebbe alcun abbassamento del carico (fase transitoria), è necessario invece considerare il flusso darciano. La modalità descritta per la simulazione della variazione del carico all'interno del pozzo consente di gestire la fase transitoria, in cui il livello del carico si abbassa formando il cono di depressione, ed è consistente con la condizione al contorno di Neuman che deve essere fissata per le celle terreno dell'intorno. De Marsily mostra che per un acquifero anisotropo non confinato, se la superficie libera rimane costante ad una quota e , la condizione al contorno su questa superficie è data da:

$$K_z \frac{\partial s}{\partial z} = -\omega_c \frac{\partial s}{\partial t}, \quad z = e, \quad \forall r, t$$

dove s è il “drawdown” nell'acquifero ($h_0 - h$), K la conducibilità lungo la direzione z ed r la distanza dal centro del pozzo in coordinate polari.

La condizione al contorno, relativa alle celle del terreno che si interfacciano col pozzo, è data dall'equazione seguente:

$$\frac{\Delta h_c}{\Delta t} = \frac{1}{\omega_c l/2} \sum_{\alpha} K_s (h_{\alpha} - h_c)$$

L'equazione precedente è coerente con l'equazione di Darcy, solo che invece di considerare il flusso idrico in ingresso al pozzo, si considera la perdita di carico nelle celle dell'interfaccia terreno-pozzo dovuta a tale flusso idrico.

In Appendice II è riportato un approfondimento sulla implementazione in ambiente Camelot dei passi appena descritti.

2.3.2 Implementazione del modello

Il modello è stato implementato eseguendo il codice ad AC in ambiente CAMELOT, considerando inizialmente alcuni valori di tentativo di permeabilità a saturazione e di capacità di campo (Tabella 4), per verificarne il comportamento.

Prova	K_s [cm/s]	S_s [-]
1	0.0003	0.005
2	0.0003	0.0005
3	0.003	0.005
4	0.003	0.0005
5	0.001	0.0005

Tabella 4: Valori di tentativo dei parametri a saturazione

Il grafico in Figura 46 riporta il confronto tra l'andamento temporale del carico idraulico osservato e simulato, nel pozzo di emungimento. Dall'analisi si nota che per le simulazioni 3 e 4 la prova è stata interrotta nelle fasi iniziali in quanto i risultati ottenuti si discostavano di molto dal comportamento osservato.

Per le simulazioni 2 e 5 invece i risultati rispettivamente sovrastimavano e sottostimavano gli abbassamenti della falda osservati nel pozzo.

Per la simulazione 1 infine, pur ottenendo un soddisfacente risultato sul carico in stazionario nel pozzo, il comportamento nei primi istanti del transitorio evidenzia un pendenza della curva inferiore a quella osservata. Inoltre il cono di depressione che si forma durante la prova non consente di ottenere i valori di carico osservati nei piezometri di controllo.

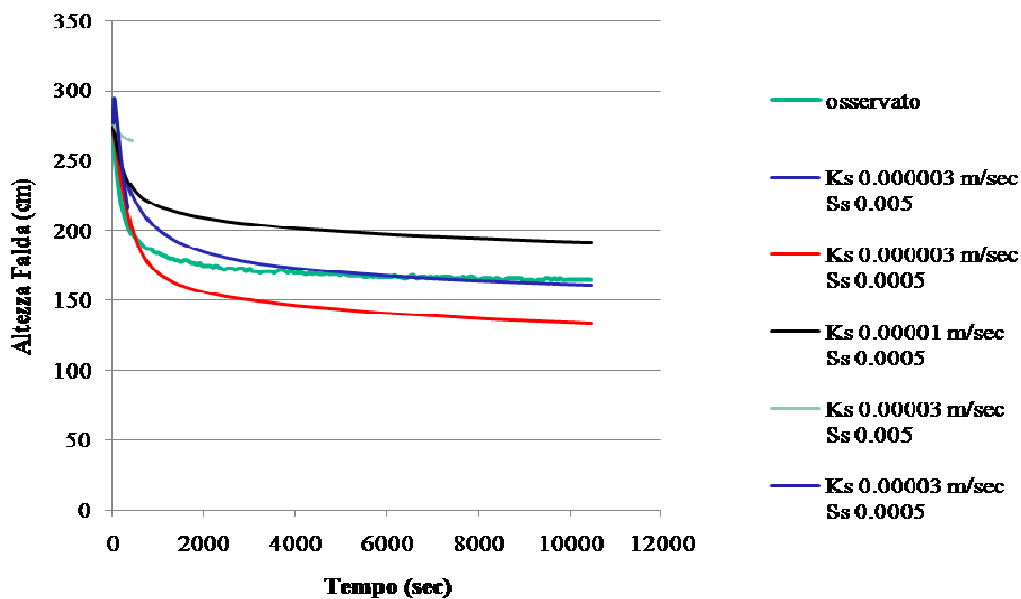


Figura 46: Grafico dell'andamento del carico idraulico nel tempo, ottenuto nel pozzo di emungimento con il codice ad AC (parametri di tentativo)

3. Risultati

Tra i diversi tentativi effettuati, il risultato che meglio ha riprodotto sull'intero sito sperimentale il comportamento osservato durante la prova di emungimento è stato ottenuto considerando i parametri in Tabella 5.

Il grafico carico idraulico-tempo simulato all'interno del pozzo di emungimento, in scala naturale ed in scala semi-logaritmica, è riportato in Figura 47.

K_s [cm/s]	S_s [-]
0.001	0.0001

Tabella 5: Valori di conducibilità idraulica a saturazione e capacità di campo, ottenuti da prove di laboratorio eseguite su campioni di terreno prelevate dall'*Hydrogeosite*

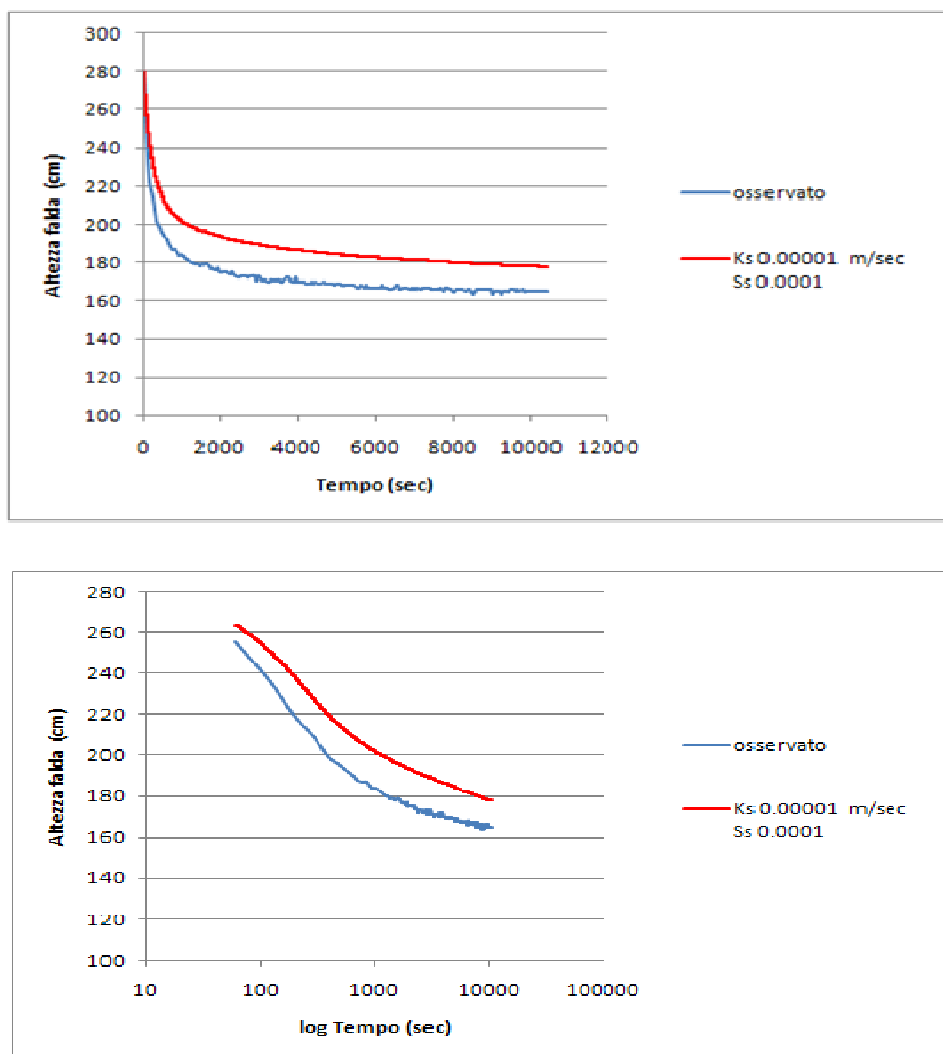


Figura 47: Grafico dell'andamento del carico idraulico nel tempo, ottenuto nel pozzo di emungimento con il codice ad AC (parametri di laboratorio)

L'applicazione del modello ad AC ha riprodotto in maniera soddisfacente la prova, tenendo presente che la il comportamento del modello rispecchia l'andamento della prova sperimentale sia nella fase transitoria (pendenza iniziale della curva), sia al raggiungimento delle condizioni di stazionarietà.

Anche il cono di depressione ottenuto in condizioni di stazionarietà (Figura 48) riproduce l'andamento spaziale dei carichi misurati durante la prova sperimentale, riscontrando che gli abbassamenti simulati nei piezometri di controllo (Figura 49, Tabella 6) riproducono in modo soddisfacente i valori attesi.

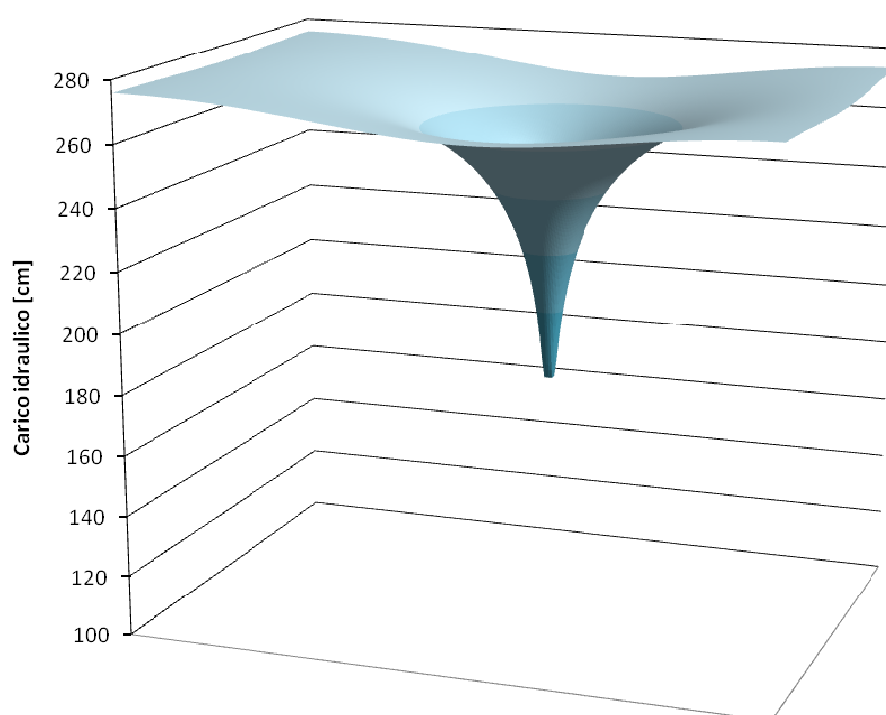


Figura 48: Cono di depressione, in condizioni di stazionarietà, ottenuto con il modello ad AC

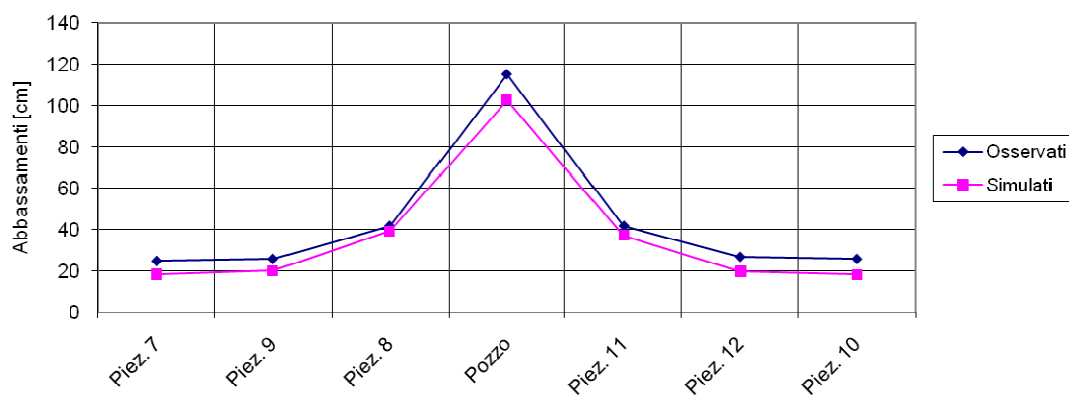


Figura 49: Confronto tra gli abbassamenti di carico, in condizioni di stazionarietà, simulati e misurati durante la prova sperimentale nei punti di controllo

<i>Punti di controllo</i>	<i>osservati</i>	<i>simulati</i>
Pozzo	1.15 m	1.03 m
Piez. 1	0.15 m	0.04 m
Piez. 2	0.15 m	0.05 m
Piez. 3	0.15 m	0.04 m
Piez. 4	0.18 m	0.09 m
Piez. 5	0.22 m	0.12 m
Piez. 6	0.20 m	0.10 m
Piez. 7	0.25 m	0.19 m
Piez. 8	0.42 m	0.39 m
Piez. 9	0.26 m	0.20 m
Piez. 10	0.26 m	0.18 m
Piez. 11	0.42 m	0.37 m
Piez. 12	0.27 m	0.20 m
Piez. 13	0.21 m	0.10 m
Piez. 14	0.24 m	0.12 m
Piez. 15	0.20 m	0.10 m
Piez. 16	0.17 m	0.06 m
Piez. 17	0.17 m	0.07 m

Tabella 6: Confronto tra gli abbassamenti di carico, in condizioni di stazionarietà, simulati e misurati durante la prova sperimentale nei punti di controllo

Conclusioni

Lo sforzo intrapreso nel presente lavoro di tesi è stato quello di ottenere una forma discreta delle equazioni che governano il flusso idrico ed il trasporto di massa nel sottosuolo, in modo da poter essere impiegate per l'implementazione di un codice agli Automi Cellulari macroscopici basato su architetture di calcolo parallelo.

Rispetto ad un approccio differenziale, un approccio discreto permette di giungere direttamente ad un sistema algebrico dal quale ottenere la soluzione approssimata del problema esaminato. Questa alternativa è basata su una formulazione del problema fisico in termini discreti, in modo da preservare il contenuto fisico e geometrico del problema originario. Lo scopo di tale approccio è essenzialmente quello di conservare l'attenzione sull'aspetto fisico del problema, pensare cioè ad un metodo numerico per descrivere un problema fisico, e non ad una particolare formulazione matematica.

Impiegando le equazioni così ottenute come funzioni di transizione dell'AC macroscopico, si riesce ad ottenere un modello che, al contrario dei modelli attualmente disponibili in letteratura, mantiene il significato fisico dei parametri che lo costituiscono.

Il vantaggio principale dell'impiego di un codice basato sugli AC macroscopici è la quantizzazione. Dal punto di vista fisico, tramite la quantizzazione si evita di considerare gli scambi di massa meno significativi tra le celle che costituiscono l'AC. Dal punto di vista computazionale, si introduce una tecnica di controllo delle interazioni tra i costituenti elementari in grado di ridurre lo scambio di informazioni tra le celle dell'automa, e quindi di migliorare le prestazioni del modello, al di là dell'implementazione dello stesso in sistemi di calcolo parallelo.

Implementando in ambiente parallelo CAMELOT il modulo del flusso è stato ottenuto un codice di calcolo, il quale è stato testato sui dati monitorati durante la prova di emungimento condotta sul sito sperimentale del CNR-IMAA di Marsico Nuovo (Potenza) nell'aprile del 2008.

Il confronto degli abbassamenti simulati con quelli registrati evidenzia che il modello fornisce valori attendibili. L'applicazione del modello ad AC ha riprodotto in maniera soddisfacente la prova, tenendo presente che il comportamento del modello rispecchia l'andamento della prova sperimentale sia nella fase transitoria (pendenza iniziale della curva), sia al raggiungimento delle condizioni di stazionarietà.

Anche il cono di depressione ottenuto in condizioni di stazionarietà riproduce l'andamento spaziale dei carichi misurati durante la prova sperimentale, riscontrando che gli abbassamenti simulati nei piezometri di controllo riproducono in modo soddisfacente i valori attesi.

La fase di sviluppo successivo del lavoro è quella di implementare in ambiente CAMELOT il modulo di trasporto di massa in modo da poter stimare il trasporto di un contaminante in falda e di realizzare nel sito sperimentale una prova di tracciamento che, da una parte fornisca i parametri idrodispersivi necessari alla soluzione dell'equazione di trasporto e, dall'altra, permetta di confrontare le concentrazioni misurate con quelle simulate.

Appendice I – Il tensore di Dispersione cinematica

Nella equazione di bilancio di massa bisognerà esprimere il tensore secondo le direzioni del sistema di riferimento $X' Y' Z'$ (Figura 50), dove α e β sono gli angoli orizzontale e verticale che esprimono l'inclinazione degli assi del nuovo sistema di riferimento rispetto alle direzioni principali di moto. Si dovrà effettuare quindi il cambio di base:

$$\underline{D}_c^f = \underline{T}^{-1} \underline{D}_c$$

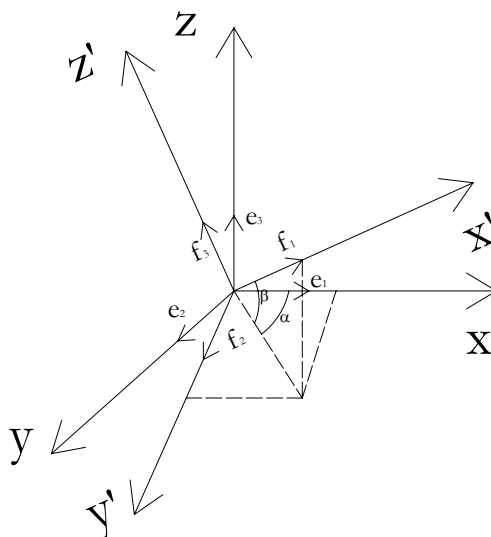


Figura 50: Cambio di base del sistema di riferimento

Dove con f si indica la base del nuovo riferimento, nella quale il tensore assumerà la forma:

$$\underline{D}_c^f = \begin{bmatrix} D_{x'x'} & D_{x'y'} & D_{x'z'} \\ D_{y'x'} & D_{y'y'} & D_{y'z'} \\ D_{z'x'} & D_{z'y'} & D_{z'z'} \end{bmatrix}$$

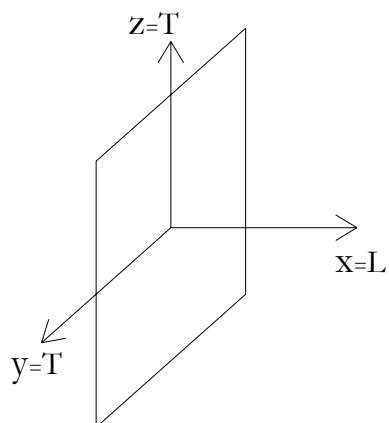


Figura 51: Direzioni principali di moto

Indichiamo con $\beta_1=(e_1, e_2, e_3)$ la base (Figura 52) secondo la quale il tensore di dispersione cinematica assume la forma diagonale. I versori avranno componenti:

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

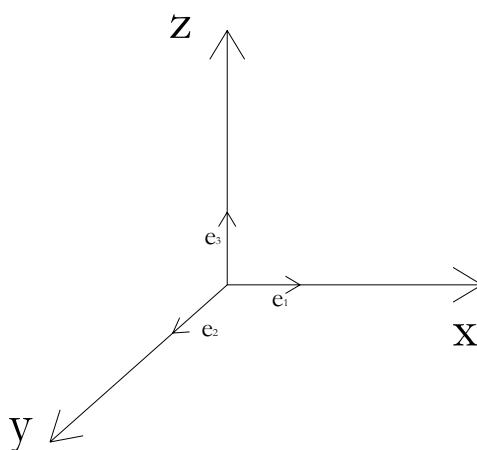


Figura 52: Base delle direzioni principali di moto

Ricordando che X coincide con la direzione longitudinale al moto del fluido ed Y e Z sono contenuti nel piano ad esso ortogonale, lungo le quali si hanno le componenti trasversali di moto.

Indichiamo con $\beta_2=(f_1, f_2, f_3)$ la base del sistema di riferimento con assi coincidenti con le direzioni principali di isotropia del mezzo, secondo la quale il tensore di dispersione cinematica comprende i termini misti:

$$\underline{D}_f = \begin{bmatrix} D_{x'x'} & D_{x'y'} & D_{x'z'} \\ D_{y'x'} & D_{y'y'} & D_{y'z'} \\ D_{z'x'} & D_{z'y'} & D_{z'z'} \end{bmatrix}$$

Ricordiamo che la matrice si mantiene simmetrica.

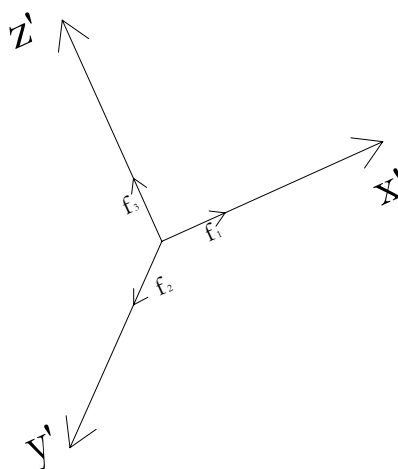


Figura 53: Base delle direzioni principali di isotropia

I versori f_1, f_2, f_3 hanno componenti:

$$f_1 = \begin{bmatrix} \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ \sin(\beta) \end{bmatrix}; f_2 = \begin{bmatrix} -\cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ \sin(\beta) \end{bmatrix}; f_3 = \begin{bmatrix} \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ -\sin(\beta) \end{bmatrix}$$

Il cambio di cercato sarà:

$$\underline{D}_f = \underline{T}^{-1} \underline{D}_e$$

dove la matrice del cambio di base assume la forma:

$$\underline{T} = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & X_3 \\ Y_1 & Y_2 & Y_3 \\ Z_1 & Z_2 & Z_3 \end{bmatrix} \Rightarrow \underline{T}^{-1} = \frac{1}{\det \underline{T}}$$

in cui i coefficienti della matrice sono soluzione del seguente sistema:

$$\begin{cases} f_1 = X_1 e_1 + Y_1 e_2 + Z_1 e_3 \\ f_2 = X_2 e_1 + Y_2 e_2 + Z_2 e_3 \\ f_3 = X_3 e_1 + Y_3 e_2 + Z_3 e_3 \end{cases}$$

il quale assume la forma di un sistema lineare di 9 equazioni nelle 9 incognite $X_1, Y_1, Z_1, X_2, Y_2, Z_2, X_3, Y_3, Z_3$:

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ \sin(\beta) \end{bmatrix} = X_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + Y_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + Z_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -\cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ \sin(\beta) \end{bmatrix} = X_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + Y_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + Z_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ -\sin(\beta) \end{bmatrix} = X_3 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + Y_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + Z_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{cases}$$

La cui soluzione è:

$$\left. \begin{array}{l} X_1 = \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ Y_1 = \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ Z_1 = \sin(\beta) \\ X_2 = -\cos(\beta) \cos(\alpha) \\ Y_2 = \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ Z_2 = \sin(\beta) \\ X_3 = \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ Y_3 = \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ Z_3 = -\sin(\beta) \end{array} \right\} \Rightarrow \underline{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \cos(\beta) \cos(\alpha) & -\cos(\beta) \cos(\alpha) & \cos(\beta) \cos(\alpha) \\ \cos(\beta) \sin(\alpha) & \cos(\beta) \sin(\alpha) & \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ \sin(\beta) & \sin(\beta) & -\sin(\beta) \end{bmatrix}$$

Appendice II – Schematizzazione del pozzo in ambiente Camelot

Ai fini della scrittura dell'equazione di bilancio nel codice di calcolo, per valori di ψ prossimi alla saturazione, invece di derivare il termine C_c dalle equazioni caratteristiche bisogna porre l'uguaglianza:

$$C_c = \frac{\omega_c}{l}$$

Di seguito la riga del codice in cui è scritta l'equazione di bilancio:

```
h=h-
((Delta_h/(lato*lato))*delta_t*((2*cell_Qk*news[i]_Qk)/(cell_Qk+news
[i]_Qk))
*cell_Qdqdh);
```

dove:

```
update(cell_Qdqdh, uno_su_dqdh);
```

e, utilizzando la solita equazione caratteristica alla van Genuchten:

```
if (psi<psi_zero)
{
    denompow_uno=pow(alfa*(-psi), (1-n));
    denompow_due=pow(alfa*(-psi), n);
    denompow_tre=pow(1/(1+denompow_due), (1/n-2));
    uno_su_dqdh=(denompow_uno/(alfa*(n-1)*(tetas-
tetar)))*denompow_tre;
}
Else
{
    uno_su_dqdh=1/Cc;
}
```

Per la schematizzazione della colonna pozzo, si pone:

```
//Se la cella è tutta sotto il carico, allora e' piena d'acqua
if (quota<=(hfondo-(lato/2)))
    teta=1.0;
//Se la cella e' tutta sopra il carico, allora e' vuota
else if (quota>=(hfondo+(lato/2)))
    teta=0.0;
//cella in parte sopra il carico
Else
    teta=(hfondo-quota+(lato/2))/lato;
```

Si determina quindi il valore del carico delle celle pozzo:

```
//Carico sul pozzo
h=hfondo;
psi=hfondo-quota;
if (psi<0)
{
    h=quota;
    psi=0;
}
```

Nell'equazione:

$$\Phi_{\alpha}^c = -K_s \left(\frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}/2} \right) A_{\alpha} = -2K_s (h_{\alpha} - h_c) l_{\alpha}$$

K_s è la permeabilità a saturazione delle celle dell'intorno (solo le celle sature possono fornire acqua), ed inoltre è stato posto $l_{\alpha}/2$ poiché si considera che il percorso compiuto dall'acqua per giungere al pozzo sia pari non all'intera lunghezza della cella dell'intorno, ma alla sua metà.

Nel codice di calcolo, l'equazione di Darcy relativa alle celle del pozzo è scritta nel modo seguente:

```

for (i=0;i<NUMVICINE;i++) //NUMVICINE è il numero di celle
vicine (6)
{
    if ((i!=1)&&(i!=4)) //No rapporti con alto e basso
    {
        Delta_h=h-news[i]_Qh;
        if (Delta_h<0) //Non è possibile afflusso dal pozzo
        verso terreno
            //Aggiorno valore di teta
            teta=teta-
            2*delta_t*(news[i]_Qk*Delta_h*lato)/volume;
    }
}

```

L'equazione:

$$\frac{\Delta h_c}{\Delta t} = \frac{1}{\omega_c l/2} \sum_{\alpha} K_s (h_{\alpha} - h_c)$$

dovrebbe essere coerente con l'equazione precedente, solo che invece di considerare il flusso idrico in ingresso al pozzo, si considera la perdita di carico nelle celle dell'interfaccia terreno-pozzo dovuta a tale flusso idrico. Nel codice di calcolo l'equazione è scritta nel modo segu

ente:

```

if (Delta_h>=0) //non possibile guadagno di carico dato da maggiore
carico nel pozzo
    h=h-2*((Delta_h/(lato*lato))*delta_t*cell_Qk*cell_Qdqdh);

```

Bibliografia

- Abbott M.B., Bathurst J.C., Cunge J.A., O'Connell P.E., Rasmussen J., *An introduction to the European Hydrological System – Système Hydrologique Européen, "SHE"*, 2: Structure of a physically-based modeling system, *J. Hydrol.*, (1986).
- Aitkenhead M.J., Foster A.R., Fitzpatrick E.A., Townend J., *Modeling water release and absorption in soils using cellular automata*, *J. Hydrol.*, (1999).
- Arnold J.G., Allen P.M., Bernhardt G., *A comprehensive surface groundwater flow model*, *J. Hydrol.*, (1993).
- Bear J., *Dynamic of fluid in porous media*, American Elsevier, New York, (1972).
- Bear J., *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill (1989).
- Bentley L.R., Sykes J.F., Trebbia C., Gray W., Pinder G.F., *Preconditioning Newton-Krylov Methods for Variably Saturated Flow*, *Computational Methods in Water Resources*, vol. 1.
- Brooks R.H., Corey A.T., *Properties of porous media affecting fluid flow*, *J. Irrig. Drain. Div. Amer. Soc. Civil Eng. IR2* (1966).
- Brown D.L., *An analysis of Transient Flow in Upland Watersheds: Interactions between Structure and Process*, Ph.D. Dissertation, Dept. of Soil Science, Univ. of California, Berkeley, California, (1995).
- Celia M.A., Bouloutas E.T., *A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation*, *Water Resour. Res.*, 26 (1990).
- Chase G.C., *Fluvial landsculpting and the fractal dimension of topography*, *Geomorphology*, (1992).
- Comincioli V., *Problemi di analisi numerica*, McGraw-Hill (1991).
- Comincioli V., *Analisi numerica – metodi, modelli, applicazioni*, McGraw-Hill (1995).
- Cooley R.L., *Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems*, *Water Resour. Res.*, 19 (1983).
- Cosmi F., *Applicazione del metodo delle celle con approssimazione quadratica*, *Atti del XXIX Convegno Nazionale Aias 2000*, Lucca, Italia, (6-9/09/2000).
- Cosmi F., *Studio di lastre forate mediante il metodo delle celle*, *Atti del XIII Convegno italiano di Meccanica Computazionale*, Brescia, Italia, (13-15/11/2000).
- Crisci G.M., Di Gregorio S., Pindaro O., Ranieri S.A., *Lava flow simulation by a discrete cellular model: first implementation*, *Int. J. Model. Simul.*, (1986).
- Crutchfeld J.P., Mitchell M., Das R., *The evolutionary design of collective computation in cellular automata*, in Crutchfeld, J.P., and Schuster, P.K., editors, *Evolutionary Dynamics-Exploring the Interplay of Selection, Neutrality, Accident, and Function*, Oxford University Press, New York, (2002).
- D'Ambrosio D., Di Gregorio S., Iovine G., *Simulating debris flows through a hexagonal cellular automata model: Sciddica S3-hex*, *Natural Hazards and Earth System Sciences*, (2003).
- De Marsily G., *Quantitative Hydrogeology*. Academic Press. Inc., (1986).
- Di Gregorio S., Serra R., Villani M., *Applying cellular automata to complex environmental problems: the simulation of the bioremediation of contaminated soils*, *Theor. Comp. Science*, (1999).

- Di Pietro L.B., Melayah A., Zaleski S., *Modeling water infiltration in unsaturated porous media by interacting lattice gas-cellular automata*, Water Resour. Res., 30(10), (1994).
- Diersch H.J.G., *Treatment of free surfaces in 2D and 3D groundwater modeling*, Mathematische Geologie, Vol. 2 (1998).
- Fairbanks J., Panday S., Huyakorn P.S., *Comparisons of linked and fully coupled approaches to simulating conjunctive surface/subsurface flow and their interactions*, in: Seo, Poeter, Zheng, Poeter, editors, MODFLOW 2001 and Other Modeling Odysseys-Conference Proceedings, Golden, CO, (2001).
- Freeze R.A., *Role of subsurface flow in generating surface runoff*. 1. Base flow contributions to channel flow, Water Resour. Res., (1972).
- Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y., *Lattice gas automata for the Navier-Stokes equation*, Phys. Rev. Lett., (1986).
- Gagliardi V., *Un modello matematico per la simulazione del moto variabilmente saturo basato sul metodo delle celle. Applicazione al bacino del torrente Turbolo*, Ph.D. Dissertation, Dept. of Soil Defence, Univ. of Calabria, Rende (CS), Italy, (2002).
- Gambolati G., Putti M., *Simulazione numerica del flusso e trasporto di contaminanti in mezzi porosi a saturazione e densità variabile*, DMMMSA Università di Padova – CRS4 Cagliari.
- Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis G., *Thermodynamics and hydrodynamics for a modeled fluid*. J. Math. Phys. A, 13(5), (1976).
- Hirsch C., *Numerical computations of internal and external flow*, Wiley-Interscience (1992).
- Huang K., Mohanty B.P., van Genuchten M.Th., *A new convergence criterion for the modified Picard iteration method to solve the variably saturated flow equation*, Journal of Hydrology, 178 (1996).
- Huyakorn P.S., Springer E.P., *A Three-Dimensional Finite-Element Model for Simulating WaterFlow in Variably Saturated Porous Media*, Water Resour. Res., 13 (1986).
- Huyakorn P.S., Springer E.P., Guvanasen V., Wadsworth T.D., *A three-dimensional finite element model for simulating water flow in variably saturated porous media*, Water Resour. Res., 22(12), (1986).
- Huyakorn P.S., Thomas S.D., Thompson B.M., *Techniques for making finite elements competitive in modeling flow in variably saturated porous media*, Water Resour. Res., 20(8), (1984).
- McCombie C., McKinley I., *Validation – another perspective*, Ground Water, vol. 31 n.4, (1993).
- McNamara G.R., Zanetti G., *Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata*, Phys. Rev. Lett., 61, (1988).
- Mendicino G., *Idrologia delle perdite*, PÀTRON EDITORE, (1993).
- Mendicino G., Senatore A., Spezzano G., Straface S., *Three-dimensional unsaturated flow modeling using cellular automata*, Water Resour. Res., 42, (2006).
- Mitchell A.R., Griffiths, D.F., *The finite difference method in partial differential equation*, J. Wiley & Sons, Chichester, (1980).
- Morita M., Yen B.C., *Numerical methods for conjunctive two-dimensional surface and three-dimensional sub-surface flows*, Int. J. Numer. Meth. Fluids, (2000).

- Mualem Y., *A conceptual model of hysteresis*, Water Resour. Res., 10 (1974).
- Mualem Y., *A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media*, Water Resour. Res., 12 (1976).
- Muzy A., Wainer G., Innocenti E., Aiello A., Santucci J.F., *Cell-DEVS Quantization techniques in a fire spreading application, proceedings of the Winter Simulation Conference 2002 – Exploring new frontiers*, San Diego, USA, (2002).
- Orlandini S., *Two-layer model of near-surface soil drying for time-continuous hydrologic simulations*, J. Hydrol. Engineer., 4(2), (1999).
- Kirkland M.R., Hills R.G., Wierenga P.J., *Algorithms for solving Richards equation for variably saturated soils*, Water Resour. Res., 28 (1992).
- Konikow L.F., Bredehoeft J.D., *Ground-water models cannot be validated*, Adv. Water Resour., 27 (1992).
- Jenkins E.W., Berger R.C., Hallberg .P., Howington Stacy E., Kelley C.T., Schmidt Joseph H., Stagg A., Tocci M.D., *Newton-Krylov-Schwarz Methods for Richards Equation*, (1999).
- Panday S., Huyakorn P., S., *A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow*, Adv. Water Resour., (2004).
- Paniconi C., Aldama A.A., Wood E.F., *Numerical Evaluation of Iterative and noniterative Methods for the Solution of the Nonlinear Richards Equation*, Water Resour. Res., 27 (1991).
- Paniconi C., Putti M., *A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems*, Water Resour. Res., 30 (1994).
- Perlange J.Y., *Capillary hysteresis and relationship between drying and wetting curves*, Water Resour. Res., 12 (1976).
- Perkins S.P., Kousis A.D., *Stream-aquifer interaction model with diffusion wave routing*, J. Hydraul. Eng., (1996).
- Perkins S.P., Sophocleous M., *Development of a comprehensive watershed model applied to study stream yield under drought conditions*, Ground Water, 37(3), (1999).
- Philip J.R., *Theory of infiltration*, Adv. Hydrosci., 5 (1969).
- Pullan A.J., *The quasi-linear approximation for unsaturated porous media flow*, Water Resour. Res., 26 (1990).
- Raitt R.A., *Or and science*, Journal of the Operational research Society, n. 30, (1979).
- Rathfelder K., Abriola L.M., *Mass conservative numerical solutions of the head-based Richards equation*, Water Resour. Res., 30 (1994).
- Revil, A., V. Naudet, J. Nouzaret, and M. Pessel, *Principles of electrography applied to self-potential electrokinetic sources and hydrogeological applications*, Water Resour. Res., 39(5), 1114, doi:10.1029/2001WR000916 (2003).
- Richards L.A., *Capillary conduction of liquids through porous media*, Physics 1 (1931).
- Rizzo, E., B. Suski., A. Revil, S. Straface, and S. Troisi, *Self-potential signals associated with pumping-tests experiments. Geophysical research*, JGR, journal of, Vol. 109, n. B10, pp. 1-14 (2004).
- Senatore A., *Processi di trasferimento di energia e massa tra suolo, vegetazione ed atmosfera*, Ph.D. Dissertation, Dept. of Soil Defence, Univ. of Calabria, Rende (CS), Italy, (2005).

- Shamsa A., Narasmhan T.N., *A Numerical Investigation of Free Surface-Seepage Face Relationship Under Steady State Flow Conditions*, Water Resour. Res., 3 (1991).
- Singh V., Bhallamudi S.M., *Conjunctive surface-subsurface modelling of overland flow*, Adv. Water Resour., (1998).
- Smith R.E., Hebbert R.H.B., *Mathematical simulation of interdependent surface and subsurface hydrologic processes*, Water Resour. Res., 19(4), (1983).
- Straface S., *Un modello numerico per il moto ed il trasporto basato sul metodo delle Celle*, Ph.D. Dissertation, Dept. of Soil Defence, Univ. of Calabria, Rende (CS), Italy, (1998).
- Toffoli T., Margolus N., *Cellular Automata Machines*, MIT Press, Cambridge, MA, (1987).
- Tonti E., *Finite formulation of the electromagnetic field*, Progress in Electromagnetic Research, vol. 32 (2001).
- Troisi S., *La protezione delle acque sotterranee – Modelli matematici*, Editoriale BIOS, (1989).
- Troisi S., *Problems of mathematical model validation in groundwater hydrology*, Excerpta, vol. 9 (1995).
- Troisi S., Del Re G.G., *About the validation of prediction models*, Quaderno IRIS, n. 7 (2002).
- Troisi S., S. Straface S., Gambolati G., Putti M., Paniconi C., *Guidelines for validation and verification of groundwater mathematical studies (Gulliver): a case study*, in Risk Analysis II, (2000).
- Van Genuchten M., *A close-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils*, Soil Sci. Am. J., 44 (1980).
- Van Genuchten M., Nielsen D.R., *On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils*, Ann. Geophys., 3 (1985).
- VanderKwaak J.E., Loague K., *Hydrologic-response simulations for the R-5 catchment with a comprehensive physics-based model*, Water Resour. Res., 37(4), (2001).
- VanderKwaak J.E., *Numerical simulation of flow and chemical transport in integrated surface-subsurface hydrologic systems*, Doctorate Thesis, Department of Earth Sciences, University of Waterloo, Ontario, Canada, (1999).
- Venutelli M., *Un modello numerico analitico per la soluzione dell'equazione di Richards*, XXVII Convegno di Idraulica e Costruzioni Idrauliche, (2000).
- Venutelli M., *Un modello non iterativo per la soluzione dell'equazione di Richards*, L'Acqua, n. 5 (1999).
- Von Neumann J., *Theory of self-reproducing automata*, University of Illinois Press, Urbana, Illinois, (1966).
- Wigmosta M.S., Vail L.W., Lettenmaier D.P., *A distributed hydrology-vegetation model for complex terrain*, Water Resour. Res., 30(6), (1994).
- Wolfram S., *Cellular automata and complexity*, Addison-Wesley, Reading, Mass, (1994).
- Yu Z., Schwartz F.W., *Application of an integrated basin-scale hydrologic model to simulate surface-water and ground-water interactions*, J. Amer. Water Res. Assoc., 34(2), (1998).
- Ziegler B.P., *DEVS theory of quantized systems, Advanced simulation technology thrust DARPA contract*, (1998).