Simulazione numerica del flusso e trasporto di contaminanti in mezzi porosi a saturazione e densità variabile

Giuseppe Gambolati e Mario Putti

DMMMSA, Università di Padova

Claudio Paniconi

CRS4, Cagliari

SOMMARIO La legislazione riguardante la salvaguardia e la tutela delle risorse idriche, e tra queste le acque sotterranee, e' in continua crescita in tutti i paesi industrializzati. La protezione delle acque di falda dal sovrasfruttamento e dalla contaminazione di origine diversa (rifiuti urbani e industriali, pesticidi e fertilizzanti, scorie nucleari, ecc...) richiede la previsione degli effetti indotti dalle attivita' umane sulla quantita' e qualita' delle risorse sotterranee, previsione che si puo' conseguire solo attraverso l'impiego di idonei modelli matematico-numerici. Un problema di stringente attualita' in tutti i paesi che si affacciano sul Mediterraneo e' l'inquinamento degli acquiferi costieri per intrusione di acqua di mare. La simulazione della penetrazione del cuneo salino comporta lo sviluppo di modelli accoppiati di flusso e trasporto che possono essere accuratamente ed efficientemente risolti col metodo degli elementi finiti (FEM) che viene qui implementato in un mezzo poroso tridimensionale a saturazione variabile, e che e' quindi in grado di simulare sia la zona insatura (suoli superficiali) che quella satura (falde in pressione). Le non linearita' che scaturiscono dall'accoppiamento e dalle leggi costitutive della permeabilita' e del coefficiente di immagazzinamento nella zona insatura sono risolte con le tecniche di Picard e di Newton parziale. I modelli discreti finali linearizzati sono trattati col metodo dei gradienti coniugati opportunamente precondizionati per le matrici simmetriche di flusso (PGC) e quelle non simmetriche di trasporto (GMRES, Bi-CGSTAB, TFQMR). Le procedure descritte sono implementate nel codice FEM CODESA-3D (COupled variable DEnsity and SAturation) di cui e' offerto un esempio applicativo.

ABSTRACT

In the industrialized countries subsurface water resources are increasingly subject to regulations for protection from over-exploitation and from contamination arising from urban, industrial, nuclear, military, and agricultural activities. Prediction of the effects of anthropogenic impacts on water quantity and quality is an important part of proper aquifer management, and can be achieved through the use of mathematical models. As an example, seawater intrusion in coastal aquifers represents a serious environmental problem, especially in the countries of the

Mediterranean basin, and can be simulated using coupled models of water flow and solute transport. Sophisticated groundwater models such as these can be accurately and efficiently solved numerically via finite element discretizations of the three-dimensional porous medium. Both saturated (groundwater) and unsaturated (soil water) zones can be represented, and nonlinearities arising from storage-pressure head and conductivity-pressure head dependencies in the unsaturated zone and from coupling of the two equations can be resolved using Picard, Newton, or partial Newton methods. The resulting linearized systems of equations can be solved using a variety of preconditioned conjugate gradient-like methods applicable to symmetric and nonsymmetric systems. The mathematical formulation and numerical procedures to be described form the basis of the CODESA-3D (COupled variable DEnsity and SAturation) model.

Introduzione

Negli ultimi anni è aumentato in Italia e in molti paesi industrializzati il numero di leggi sempre più restrittive riguardanti la tutela e la protezione dell'ambiente, ed in particolare delle risorse idriche sotterranee. E' prevedibile che in futuro aumenterà la richiesta di studi di impatto ambientale, condotti con l'ausilio di strumenti di simulazione robusti ed affidabili, e finalizzati all'attuazione pratica delle leggi di salvaguardia dell'ambiente. Strumenti di questo genere devono necessariamente ricorrere a tecniche numeriche, che attraverso codici di calcolo potranno essere efficacemente utilizzato per l'analisi di siti contaminati e la gestione dei conseguenti interventi di protezione e recupero. Tali codici devono essere in grado di descrivere accuratamente il flusso e il trasporto dei contaminanti nella zona interessata, in modo da rendere possibile la localizzazione attuale e futura della nuvola di inquinante, e sono di grande aiuto nella valutazione, sia qualitativa che quantitativa, del rischio di inquinamento degli acquiferi.

I contaminanti presenti nel sottosuolo possono essere classificati secondo vari criteri [*Freeze and Cherry* 1979; *Domenico and Schwartz* 1990]: localizzazione spaziale (sorgenti puntuali che producono una ben definita nuvola d'inquinante, quali per esempio discariche, e sorgenti diffuse che causano una contaminazione a grande scala, quali per esempio i pesticidi applicati in agricoltura); proprietà chimico-biologiche (sostanze radioattive, metalli pesanti, nutrienti, composti organici e microorganismi); origine (industriale, agricola, urbana e naturale). In alcuni casi l'origine della contaminazione può può derivare da più attività collegate. Per esempio, l'eccessivo sfruttamento di acquiferi costieri può causare intrusione di acqua marina con conseguente estrazione di acque salmastre e salinizzazione dei suoli.

In questo contributo vengono presentate le equazioni fondamentali che reggono i fenomeni di flusso e trasporto in mezzi porosi insieme ad alcuni dei più comuni metodi numerici utilizzati per la soluzione di tali equazioni. I modelli matematici che ne derivano sono basati su equazioni differenziali a derivate parziali che impongono il bilancio di massa sia per il fluido che per il soluto (inquinante disciolto in acqua). Queste equazioni vengono scritte in forma generale per un mezzo poroso tridimensionale; in dipendenza dal tipo di applicazione è possibile adottare modelli mono o bidimensionali che portano a semplificazioni notevoli. L'equazione di flusso è sviluppata per il caso di mezzi porosi a saturazione variabile e può essere quindi utilizzata contemporaneamente nella zona insatura (suoli superficiali) e satura (falde freatiche e artesiane). Nell'equazione di trasporto si considerano i processi di dispersione, diffusione e avvezione, insieme ad alcuni tipi di interaazioni chimico-fisiche tra il soluto e la matrice porosa.

Le equazioni presentate sono il punto di partenza per la formulazione di modelli matematici più elaborati che permettono la simulazione di fenomeni più complessi (flusso multifase, trasporto multicomponente, reazioni cinetiche nonlineari, ecc.) [*Parker* 1989; *Mangold and Tsang* 1991; *Ségol* 1993]. Una classe di problematiche più complesse, che verrà trattata in dettaglio nelle pagine seguenti, riguarda il cosiddetto flusso a densità variabile per il quale le equazioni di flusso e trasporto sono matematicamente accoppiate in maniera non lineare. L'esempio classico di tale fenomeno è costituito dall'intrusione salina negli acquiferi costieri, ma si possono trovare altri esempi importanti nel campo dell'inquinamento da origini industriali o agricole.

In questa nota dapprima verranno descritte le formulazione matematiche del flusso e trasporto di soluti per il modello di base e per il modello accoppiato e la loro discretizzazione numerica tramite il metodo agli elementi finiti. Le tecniche di soluzione dei termini non lineari e di accoppiamento verranno quindi discusse assieme agli schemi utilizzati per risolvere i sistemi algebrici lineari che ne scaturiscono. Infine saranno inclusi alcuni esempi bi e tridimensionali che dimostrano l'applicabilità di questi strumenti alla simulazione della contaminazione negli acquiferi. La formulazione e le procedure numeriche descritte di seguito formano la base teorica del codice di calcolo CODESA-3D (COupled variable DEnsity and SAturation) [*Gambolati et al.* 1999].

Il modello matematico

Equazione di flusso

L'equazione di flusso in mezzi porosi a saturazione variabile, nota anche come equazione di Richards, si scrive [*Philip* 1969]

$$\sigma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot [K_s K_r (\nabla \psi + \eta_z)] + q \tag{1}$$

dove si è indicato con $\sigma(\psi)$ il coefficiente globale di immagazzinamento, ψ la pressione in termini di colonna d'acqua, t il tempo, ∇ l'operatore di gradiente, K_s il tensore di conducibilità in condizioni sature, $K_r(\psi)$ il coefficiente di conducibilità relativa, η_z il vettore unità definito da $\eta_z = (0, 0, 1)^T$, z la coordinata cartesiana verticale con il verso positivo verso l'alto, q la portata iniettata od estratta per unit'ị volume (densità di portata), positiva se iniettata.

L'equazione (1) è altamente non lineare per la dipendenza da ψ dei coefficienti di immagazzinamento e di conducibilità relativa. Questa dipendenza non lineare è stata oggetto di numerosi studi e può essere espressa attraverso relazioni costitutive di natura semi empirica, dette anche relazioni caratteristiche, che descrivono le proprietà idrauliche del mezzo poroso. Un esempio di tali relazioni sono le equazioni di *van Genuchten e Nielsen* [*1985*]:

$$\begin{array}{rcll} \theta(\psi) & = & \theta_r + (\theta_s - \theta_r)[1+\beta]^{-\gamma} & \psi < 0 \\ \theta(\psi) & = & \theta_s & \psi \geq 0 \end{array} \tag{2}$$

$$\begin{array}{rcll} K_r(\psi) & = & (1+\beta)^{-5\gamma/2} [(1+\beta)^{\gamma} - \beta^{\gamma}]^2 & \psi < 0 \\ K_r(\psi) & = & 1 & \psi \geq 0 \end{array} \tag{3}$$

dove θ rappresenta il contenuto d'acqua volumetrico, θ_r il contenuto d'acqua residuo, (spesso uguale alla porosità ϕ), $\beta = (\psi/\psi_s)^n$, essendo ψ_s la pressione capillare; n è una costante empirica variabile tra 1.25 e 6 e $\gamma = 1 - 1/n$. Il coefficiente globale di immagazzinamento è dato da:

$$\sigma = S_w S_s + \phi \frac{dS_w}{d\psi} \tag{4}$$

dove si sono indicati con $S_w = \theta/\theta_s$ la saturazione e con S_s il cofficiente di immagazzinamento elastico.

Un altro esempio di curve caratteristiche è ottenuto esprimendo la saturazione S_w in termini di saturazione effettiva S_e nella forma $S_w(\psi) = (1 - S_{wr})S_e(\psi) + S_{wr}$, dove S_{wr} $(= \theta_r/\theta_s)$ è la saturazione residua. Le corrispondenti equazioni si scrivono [*Huyakorn et al.* 1984]:

$$\begin{array}{rclr} S_e(\psi) & = & \left[1 + \kappa^\beta(\psi_s - \psi)^\beta\right]^{-\gamma} & \psi < \psi_s \\ S_e(\psi) & = & 1 & \psi \geq \psi_s \end{array} \tag{5}$$

$$K_r(\psi) = K_r\left(S_e(\psi)\right) = 10^{G(S_e)} \tag{6}$$

dove $G(S_e) = aS_e^2 + (b - 2a)S_e + a - b$ e κ, β, γ, a e b sono determinate empiricamente. Il coefficiente globale di immagazzinamento è ancora dato dalla (4).

Equazione di trasporto

L'equazione che regge il trasporto di un contaminante non reattivo completamente disciolto in acqua in un mezzo poroso a saturazione variabile è data da [*Bear* 1979; *Huyakorn and Pinder* 1983]:

$$\phi\frac{\partial S_w c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c) - \nabla \cdot (c\mathbf{v}) + qc^* + f \tag{7}$$

dove c è la concentrazione del contaminante in soluzione, D il tensore di dispersione, $\mathbf{v}$ il vettore velocità di Darcy, c^* concentrazione di soluto nella portata iniettata q, f la portata di soluto per unità di volume immessa nel sistema senza che vi induca variazioni del campo di moto (in pratica inquinante immesso senza immettere liquido).

Il tensore di dispersione è dato da $D = \phi S_w \tilde{D}$, dove $\tilde{D}$ è definito da *Bear* [*1979*], e può essere scritto come:

$$D_{ij} = \phi S_w \tilde{D}_{ij} = \alpha_T \mid \mathbf{v} \mid \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T)\frac{v_i v_j}{\mid \mathbf{v} \mid} + \phi S_w D_o \tau \delta_{ij} \qquad i,j = x,y,z \tag{8}$$

dove α_L e α_T sono i coefficienti di dispersività longitudinale e trasversale, $\mid \mathbf{v} \mid = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$, δ_{ij} è il delta di Kronecker, D_o indica il coefficiente di diffusione molecolare, e τ è il coefficiente di toruosità (di solito si assume $\tau = 1$). Nell'equazione (7) il termine di avvezione è rappresentato da $\nabla \cdot (c\mathbf{v})$ mentre la diffusione molecolare e la dispersione idrodinamica sono contenute nel termine $\nabla \cdot (D\nabla c)$.

Spesso è più conveniente scrivere l'equazione di trasporto nella forma alternativa:

$$\phi S_w \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c) - \mathbf{v} \cdot \nabla c + q(c^* - c) + f \tag{9}$$

ottenuta espandendo le derivate nel termine dipendente dal tempo e nel termine di avvezione e sostituendo la velocità di Darcy e il termine di immagazzinamento globale dell'equazione (1) [*Gambolati et al.* 1994].

Adsorbimento lineare e decadimento (radioattivo o biologico) sono due esempi di reazioni semplici che possoono essere facilmente introdotte nell'equazione (9), che in diventa:

$$\phi S_w R_d \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \lambda c\right) = \nabla \cdot (D\nabla c) - \mathbf{v} \cdot \nabla c + q(c^* - c) + f \tag{10}$$

dove λ è la costante di decadimento, $R_d = 1 + (\rho_b k_d)/(\phi S_w)$ il coefficiente di ritardo, $\rho_b = (1 - \phi)\gamma_s$ la densità della matrice porosa, γ_s la densità dei grani e k_d il coefficiente di distribuzione, che descrive la relazione di partizionamento tra la concentrazione del composto adsorbito S nella fase solida e la concentrazione del soluto c, tramite un'isoterma di Freundlich $S = k_d c^\kappa$, con $\kappa = 1$ nel caso di adsorbimento lineare.

Condizioni iniziali ed al contorno

Il modello matematico deve essere completato dalle condizioni iniziale e al contorno. Queste ultime possono essere condizioni di Dirichlet, di Neumann e, nel caso dell'qeuazione di trasporto, anche miste o di Cauchy.

Per il problema del flusso tali condizioni possono scriversi:

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_o(\mathbf{x}) \tag{11}$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_p(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_1 \tag{12}$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = -q_n(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_2 \tag{13}$$

dove $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$ è il vettore delle coordinate spaziali, ψ_o rappresenta la pressione al tempo 0, ψ_p la pressione imposto nel contorno di Dirichlet Γ_1, $\mathbf{n}$ è la normale esterna al contorno e q_n è il flusso imposto attraverso il contorno di Neumann Γ_2. Viene qui usata la convenzione per cui il flusso q_n è positivo se entrante nel dominio e negativo altrimenti, in maniera consistente con i termini q e f dell'equazioni di flusso e trasporto scritte in precedenza.

Per l'equazione di trasporto le condizioni iniziali ed al contorno sono:

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_o(\mathbf{x}) \tag{14}$$

$$c(\mathbf{x}, t) = c_p(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_3 \tag{15}$$

$$D\nabla c \cdot \mathbf{n} = q_d(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_4 \tag{16}$$

$$(\mathbf{v}c - D\nabla c) \cdot \mathbf{n} = -q_c(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_5 \tag{17}$$

dove c_o è la concentrazione iniziale, c_p la concentrazione imposta nel contorno di Dirichlet Γ_3, q_d il flusso dispersivo imposto nel contorno di Neumann Γ_4 e q_c il flusso totale imposto nel contorno di Cauchy Γ_5. La convenzione sul segno per q_d and q_c è la stessa di quella usata per q_n, q, and f.

Modello a densità variabile

Il flusso sotterraneo a densità variabile è caratterizzato dal fatto che differenze di densità nella fase fluida hanno una grande influenza sulla dinamica [*Kolditz et al.* 1998]. L'intrusione salina in acquiferi costieri può essere considerata come un caso particolare di questa classe di problemi.

La presenza di acqua salata non è considerata un fattore di rischio sanitario per l'uomo, ma è comunque un fattore inquinante per la qualità delle acque di uso industriale, agricolo e domestico e può dare luogo a gravi conseguenze economiche. Anche una concentrazione pari al due o tre percento di sale può rendere l'acqua dolce inutilizzabile per consumi domestici, mentre una percentuale del cinque percento può essere considerata troppo elevata per l'irrigazione di molte colture. Oltre alla sua presenza nei corpi marini, l'acqua salmastra si trova in natura anche negli strati profondi di bacini sedimentari e più in superficie in corrispondenza a formazioni geologiche localizzate. L'eccessivo sfruttamento di acquiferi costieri può essere causa di uno spostamento della zona di mescolamento tra acqua dolce e acqua salmastra (interfaccia) con possibilità di intrusione salina e di contemporanea risalita di acqua inquinata verso le opere di presa [*Sherif and Singh* 1996; *Bear et al.* 1999].

Il sale presente nel sottosuolo non reagisce chimicamente con la matrice porosa e per questo motivo non aggiunge complicazioni nella descrizione di fenomeni di trasformazione chimica o biologica. D'altra parte, gli effetti della densità variabile aumentano notevolmente la complessità del modello matematico e le difficoltà per la sua risoluzione.

Negli acquiferi sotterranei l'acqua dolce e quella salata sono separate da un'interfaccia più o meno ben definita in dipendenza dai fenomeni di dispersione del soluto [*Bear* 1979]. In molti modelli matematici questa zona di mescolamento viene simulata come un'interfaccia netta [*Collins and Gelhar* 1971; *Taigbenu et al.* 1984; *Wirojanagud and Charbeneau* 1985; *Essaid* 1990]. Nel caso di flusso verticale non trascurabile o quando la dispersione è importante questo approccio può produrre risultati non accurati [*Henry* 1964], e di consequenza alcuni modelli bi o tridimensionali introducono la dispersione dell'interfaccia [*Ségol et al.* 1975; *Frind* 1982; *Huyakorn et al.* 1987; *Voss and Souza* 1987; *Hill* 1988]. Tutti questi modelli considerano il caso di flusso in zona satura, e non possono quindi simulare fenomeni importanti in molte applicazioni reali. Per esempio, un modello che prenda in considerazione anche la zona insatura potrebbe essere usato per studiare gli effetti della presenza di sale disciolto in falda in corrispondenza a fluttuazioni della superficie freatica nella zona radicale per diverse pratiche di irrigazione oppure negli studi di gestione delle acque per verificare nel lungo periodo la possibilità di accumulo di sale nella zona insatura dovuta a infiltrazione di acque anche a bassa concentrazione di sale.

Il modello matematico del flusso a densità variabile può scriversi in termini di carico piezometrico equivalente h, definito da [*Huyakorn et al.* 1987; *Frind* 1982; *Gambolati et al.* 1993]:

$$h = \psi + z \tag{18}$$

dove $\psi = p/\rho_o g$ è la pressione in termini di colonna d'acqua riferita all'acqua dolce, p è la pressione del fluido, ρ_o rappresenta la densità dell'acqua dolce e g è la costante gravitazionale. La densità ρ della soluzione è funzione della densità di riferimento ρ_o e della concentrazione salina normalizzata c:

$$\rho = \rho_o(1 + \epsilon c) \tag{19}$$

dove $\epsilon = (\rho_s - \rho_o)/\rho_o$ è il rapporto di densità tipicamente $\ll 1$ e ρ_s la densità del fluido alla concentrazione massima $c = 1$. A seconda del tipo di applicazione, ρ_s può rappresentare per esempio la densità dell'acqua marina oppure la densità della soluzione in corrispondenza all'ammasso salino. Anche la viscosità dinamica della soluzione è funzione di c e dalla viscosità di riferimento μ_o secondo l'espressione:

$$\mu = \mu_o(1 + \epsilon' c) \tag{20}$$

dove $\epsilon' = (\mu_s - \mu_o)/\mu_o$ è il rapporto di viscosità e μ_s è la viscosità del fluido a concentrazione $c = 1$. Il modello matematico è dunque formato dalla equazione del flusso a saturazione variabile accoppiata all'equazione di trasporto per il sale, e può essere scritto come [*Gambolati et al.* 1999]

$$\sigma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[K_s \frac{1 + \epsilon c}{1 + \epsilon' c} K_r \left(\nabla \psi + (1 + \epsilon c) \eta_z \right) \right] - \phi S_w \epsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_o} q \tag{21}$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{v} &= -K_s \frac{1+\epsilon c}{1+\epsilon' c} K_r \ (\nabla\psi + (1+\epsilon c)\eta_z) && (22)\\
\phi\frac{\partial S_w c}{\partial t} &= \nabla\cdot(D\nabla c) - \nabla\cdot(c\mathbf{v}) + qc^* + f && (23)
\end{aligned}
$$

dove tutte le costanti e variabili sono già state definite in precedenza eccetto il termine di immagazzinamento globale σ che è ora funzione anche della concentrazione c e può esprimersi come (cofr. eq. (4))

$$
\sigma = S_w S_s(1+\epsilon c) + \phi(1+\epsilon c)\frac{dS_w}{d\psi} \tag{24}
$$

L'accoppiamento nel sistema (21)–(23) è riconducibile al termine di concentrazione presente nell'equazione di flusso (21) e al termine di pressione che appare implicitamente nell'equazione di trasporto (23) attraverso i vettori velocità di Darcy. Si noti che per il problema più semplice di densità costante, l'accoppiamento è dato solamente dalla presenza delle velocità di Darcy nell'equazione di trasporto. In questo caso c'è comunque accoppiamento fisico tra i due fenomeni, ma il sistema può essere ridotto ("disaccoppiato") matematicamente a due equazioni da risolvere separatamente (prima il flusso e poi il trasporto). Nel caso invece di densità variabile il sistema è matematicamente irriducibile e deve essere risolto tramite una procedura iterativa.

La nonlinearità del sistema insita nel modello accoppiato è dovuta essenzialmente alla dipendenza della densità del fluido dalla concentrazione (eq. (19)) e riguarda, per l'equazione di flusso (21), il termine di conducibilità satura $(K_s(1+\epsilon c)/(1+\epsilon' c))$, quello contenente la gravità e il carico piezometrico e i termini di derivata temporale. La dipendenza dalla concentrazione dell'equazione di flusso trasferisce la nonlinearità anche nei termini convettivo e dispersivo dell'equazione di trasporto (23). Nel caso di mezzo poroso saturo, l'equazione di flusso risulta moderatamente nonlineare e ci si può aspettare che l'importanza dell'accoppiamento e il grado di nonlinearità dell'equazione di trasporto diminuiscano al diminuire di ϵ e quando la dispersione è dominante [*Putti and Paniconi* 1995b].

Una nonlinearità di natura diversa riguarda l'equazione di flusso nel caso si includa anche la zona insatura nel modello. Questa nonlinearità scaturisce dalla dipendenza delle curve di risalita capillare dalla pressione, come già visto in precedenza.

Soluzione numerica del modello accoppiato a densità variabile

Per la discretizzazione numerica del modello accoppiato si utilizza la tecnica degli elementi finiti nella formulazione di Galerkin, con elementi tetraedrici a funzioni di base lineari e un metodo alle differenze finite pesate per la discretizzazione temporale. Per un'introduzione al metodo degli elementi finiti nell'ingegneria e sue applicazioni alle acque sotterranee si rimanda a *Zienkiewicz* [*1986*] e *Huyakorn e Pinder* [*1983*].

Secondo la tecnica agli elementi finiti, si discretizza il dominio Ω in un insieme di E tetraedri e N nodi, e si approssima la soluzione esatta (ψ, c) tramite funzioni di base lineari:

$$
\begin{aligned}
\psi \approx \hat{\psi} &= \sum_{j=1}^{N} \hat{\psi}_j(t) W_j(\mathbf{x}) \\
c \approx \hat{c} &= \sum_{j=1}^{N} \hat{c}_j(t) W_j(\mathbf{x})
\end{aligned} \tag{25}
$$

dove $\hat{\psi}_j$ e $\hat{c}_j$ sono le componenti del vettore soluzione $\hat{\mathbf{\Psi}}$ e $\hat{\mathbf{c}}$ e rappresentano la soluzione approssimata sugli N nodi della griglia computazionale.

Di seguito verrà presentato lo sviluppo delle equazioni agli elementi finiti per l'equazione di flusso seguito da uno sviluppo analogo per l'equazione di trasporto.

Equazione di flusso

Sostituendo le equazioni (25) nell'equazione (21) otteniamo il residuo:

$$L(\hat{\psi},\hat{c}) = \nabla \cdot \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} K_r \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \right] - \sigma\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t} - \phi S_w \epsilon \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_o} q = 0 \qquad (26)$$

Le cosidette equazioni di Galerkin si ottengono imponendo l'ortogonalità del residua alle N funzioni di base W_i:

$$\int_\Omega L(\hat{\psi},\hat{c}) W_i(\mathbf{x}) d\Omega = 0 \qquad i = 1,\ldots,N \qquad (27)$$

Nello scrivere queste equazioni è stato assunto che le componenti principali di anisotropia idraulica sono parallele agli assi coordinati in modo tale da rendere diagonale il tensore di conducibilità satura. Espandendo l'equazione (27) e applicando il lemma di Green alle derivate spaziali si ottiene per $i = 1,\ldots,N$:

$$\begin{aligned}
-\int_\Omega K_r \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \cdot \nabla W_i \right] d\Omega \\
+ \int_\Gamma K_r \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \cdot \mathbf{n} \right] W_i d\Gamma \\
- \int_\Omega \sigma \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t} W_i d\Omega - \int_\Omega \phi S_w \epsilon \frac{\partial\hat{c}}{\partial t} W_i d\Omega + \int_\Omega \frac{\rho}{\rho_o} q W_i d\Omega = 0
\end{aligned} \qquad (28)$$

Sostituendo l'espressione di $(\hat{\psi},\hat{c})$ data dalla (25), cambiando di segno, e imponendo le condizioni al contorno (13) si ottiene il seguente sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$H(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})\hat{\mathbf{\Psi}} + P(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})\frac{d\hat{\mathbf{\Psi}}}{dt} + \mathbf{q}^*(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}}) = \mathbf{0} \qquad (29)$$

dove

$$\begin{aligned}
h_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} K_r^e \frac{1+\epsilon\overline{c}}{1+\epsilon'\overline{c}} \left(K_s^e \nabla W_j^e \cdot \nabla W_i^e \right) dV \\
p_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} \sigma^e W_j^e W_i^e dV \\
q_i^* &= \sum_{e=1}^{E} \left[\int_{V^e} K_r^e K_{sz}^e \frac{(1+\epsilon\overline{c}^e)^2}{1+\epsilon'\overline{c}} \frac{\partial W_i^e}{\partial z} dV + \int_{V^e} \phi^e S_w^e \epsilon \frac{\partial \overline{c}^e}{\partial t} W_i^e dV \right. \\
&\qquad \left. - \int_{V^e} \frac{\rho^e}{\rho_o} q^e W_i^e dV - \int_{\Gamma_2^e} q_n^e W_i^e d\Gamma \right]
\end{aligned} \qquad (30)$$

Nelle equazioni precedenti $H = \{h_{ij}\}$ rappresenta la matrice di rigidezza del flusso e $P = \{p_{ij}\}$ la matrice di capacità (o delle masse) del flusso. Il vettore $\mathbf{q}^* = \{q_i^*\}$ contiene le condizioni al contorno di Dirichlet e Neumann, i termini di sorgente, il termine gravitazionale e il termine contenente la derivata temporale della concentrazione. Il coefficiente K_{sz} è la componente lungo z del tensore di permeabilità satura e $\overline{c}^e$ rappresenta la concentrazione mediata sul volume dell'elemento V^e. I parametri del modello variabili nello spazio sono considerati costanti all'interno di ciascun tetraedro, mentre quelli che sono funzione della pressione o della concentrazione sono calcolati tramite i valorei di ψ o c mediati su ciascun elemento, e su di esso sono considerati costanti. Le condizioni al contorno di Dirichlet sono imposte sul sistema finale.

Il sistema (29) viene integrato nel tempo con uno schema alle differenze finite pesate:

$$\left(\nu_f H^{k+\nu_f} + \frac{P^{k+\nu_f}}{\Delta t_k}\right)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} = \left(\frac{P^{k+\nu_f}}{\Delta t_k} - (1-\nu_f)H^{k+\nu_f}\right)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k} - \mathbf{q^*}^{k+\nu_f} \qquad (31)$$

dove k e $k+1$ indicano i livelli temporali precedente e corrente, Δt_k è il passo di integrazione temporale e H, P e $\mathbf{q}^*$ sono calcolati utilizzando $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+\nu_f} = \nu_f\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} + (1-\nu_f)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k}$ and at concentration $\hat{\mathbf{c}}^{k+\nu_f} = \nu_f\hat{\mathbf{c}}^{k+1} + (1-\nu_f)\hat{\mathbf{c}}^{k}$. La stabilità di tale schema è assicurata se $0.5 \leq \nu_f \leq 1$.

Il vettore delle velocità di Darcy sono calcolate dall'equazione (22) come

$$\mathbf{v}_\ell^{k+1} = U_\ell\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1} \qquad \ell = x, y, z \qquad (32)$$

dove $\mathbf{v}_\ell$ è un vettore di dimensione E contenente per ciascun elemento la componente del vettore velocità lungo la direzione ℓ, U_ℓ è una matrice di dimensione $E\times N$ che discretizza la componente del gradiente presente in (22), e $\mathbf{g}_\ell$ contiene i termini di gravità sempre dell'equazione (22).

Una dettagliata descrizione delle matrici e dei vettori nelle equazioni (30) e (32) si può trovare in *Gambolati et al.* [*1999*].

Equazione di trasporto

Applicando la stessa procedura di Galerkin utilizzata per il problema del flusso alla equazione di trasporto si ottiene, in analogia all'equazione (28):

$$\begin{aligned}-\int_\Omega (D\,\nabla\hat{c})\cdot\nabla W_i d\Omega - \int_\Omega \nabla\cdot(\mathbf{v}\hat{c})W_i d\Omega + \int_\Gamma (D\,\nabla\hat{c})\cdot\mathbf{n}W_i d\Gamma \\ - \int_\Omega \phi\frac{\partial S_w\hat{c}}{\partial t}W_i d\Omega + \int_\Omega (qc^* + f)W_i d\Omega = 0 \qquad i = 1,\ldots,N\end{aligned} \qquad (33)$$

In questo caso il Lemma di Green è stato applicato solamente alla componente dispersiva in quanto la sua applicazione anche al termine di convezione avrebbe portato a instabilità numeriche [*Huyakorn et al.* 1985; *Galeati and Gambolati* 1989].

Dopo aver sostituito la soluzione approssimata (25) nella (33), cambiato di segno e imposto le condizioni al contorno (16) e (17), si ottiene il sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$\left[A(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}}) + B(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}}) + C(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})\right]\hat{\mathbf{c}} + \frac{d}{dt}\left[M(\hat{\mathbf{\Psi}})\hat{\mathbf{c}}\right] + \mathbf{r}^* = \mathbf{0} \qquad (34)$$

dove le matrici A, B, C discretizzano rispettivamente i termini dispersivi, avvettivi e le componenti avvettive delle condizioni al contorno di Cauchy, e formano la matrice di rigidezza del trasporto, mentre M indica la matrice di capacità del trasporto e nel vettore $\mathbf{r}^*$ sono contenuti i termini di sorgente e le componenti dispersive delle condizioni al contorno di Neumann e di Cauchy. Gli elementi di queste matrici e vettori sono dati da:

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} (D^e \nabla W_j^e) \cdot \nabla W_i^e dV \\
b_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} \nabla \cdot \left(\tilde{\mathbf{v}}^e W_j^e\right) W_i^e dV \\
c_{ij} &= -\sum_{e=1}^{E} \int_{\Gamma_5^e} \tilde{\mathbf{v}}^e \cdot \mathbf{n} W_j^e W_i^e d\Gamma \\
m_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} \phi^e S_w^e W_j^e W_i^e dV \\
r_i^* &= \sum_{e=1}^{E} \left[-\int_{V^e} (q^e c^* + f^e) W_i^e dV - \int_{\Gamma_4^e} q_d^e W_i^e d\Gamma - \int_{\Gamma_5^e} q_c^e W_i^e d\Gamma \right]
\end{aligned} \tag{35}$$

dove $\tilde{\mathbf{v}}^e = \left(v_x^e, v_y^e, v_z^e\right)^T$. Le loro epressioni complete sono riportate in *Gambolati et al.* [*1999*]. Come per l'equazione di flusso (29), le condizioni al contorno di Dirichlet vengono imposte sul sistema completo.

L'integrazione temporale viene ottenuta tramite uno schema del tutto analogo a quello usato in precedenza:

$$\left[\nu_c (A + B + C)^{k+\nu_c} + \frac{M^{k+1}}{\Delta t_k}\right] \hat{\mathbf{c}}^{k+1} = \left[\frac{M^k}{\Delta t_k} - (1-\nu_c)(A + B + C)^{k+\nu_c}\right] \hat{\mathbf{c}}^k - \mathbf{r}^{*^{k+\nu_c}} \tag{36}$$

con $0.5 \leq \nu_c \leq 1$. Per questa equazione un valore di ν vicino a 0.5 può portare instabilità numeriche, anche se in alcuni casi l'accuratezza è elevata. Un valore vicini all'unità garantisce la stabilità al prezzo di una minore accuratezza e un aumento della diffusione numerica [*Peyret and Taylor* 1983]. Un'altra fonte di instabilità è presente nel caso di flussi avvettivi dominanti. Per questi casi sono preferibili tecniche di discretizzazione spaziale alternative, quali ad esempio metodi upwind ai volumi finiti [*van Leer* 1977; *Putti et al.* 1990; *Cox and Nishikawa* 1991]. Altre tecniche alternative utilizzate principalmente per aumentare l'accuratezza nel calcolo delle velocità di Darcy considerano metodi agli elementi finiti misti [*Brezzi and Fortin* 1991; *Durlofsky* 1993; *Bergamaschi and Putti* 1999] o variazioni del metodo di Galerkin [*Putti and Cordes* 1998].

Metodi per la risoluzione delle nonlinearità

Il metodo classico per la soluzione dei sistemi non lineari, il metodo di Newton-Raphson, è uno schema iterativo che ha proprietà di convergenza ottimali una volta conosciuta una soluzione iniziale sufficientemente accurata. In generale, comunque, non esiste un metodo ideale che possa risolvere un qualsiasi sistema non lineare. Per questo motivo e per motivi di efficienza computazionale, sono stati sviluppati molti schemi basati su variazioni del metodo di Newton [*Ortega and Rheinboldt* 1970].

Uno degli schemi alternativi più utilizzati è il metodo di Picard, noto anche sotto il nome di schema di Richardon non lineare o delle approssimazioni successive. Tale schema, di facile implementazione in un codice, è efficiente in termini di costo per iterazione, ma la sua velocità di convergenza è inferiore a quella di Newton.

La procedura di soluzione iterativa implementata nel modello accoppiato è formata da uno schema iterativo interno per la soluzione dell'equazione di flusso e da un esterno per la risoluzione dell'accoppiamento. Come verrà descritto in un paragrafo successivo, anche per la soluzione dei sistemi lineari che scaturiscono dall'integrazione agli elementi finiti, si utilizzano tecniche iterative che costituiscono un ulteriore livello di iterazione interna. Questi tre livelli di iterazione possono essere indipendenti tra di loro, nel senso che, per esempio, ad ogni iterazione di accoppiamento si applica all'equazione di flusso un metodo alla Newton che viene iterato fino a convergenza. A sua volta, ad ogni iterazione di Newton il sistema lineare che ne deriva viene risolto ancora fino a convergenza con un diverso schema iterativo, ad esempio utilizzando un metodo di tipo gradiente coniugato. D'altra parte, potrebbe essere più conveniente in alcuni casi non arrivare a completa convergenza in uno o più di questi livelli. Per esempio, nella fase iniziale dell'iterazioni di accoppiamento la soluzione del problema di flusso non ha bisogno di un'accuratezza elevata, per cui sarebbe possibile in questa fase impiegare un numero di iterazioni inferiore a quelle che sarebbero necessarie per la convergenza completa.

Solutori iterativi per il problema di flusso a saturazione variabile

Per l'equazione di flusso (31) riscritta nella forma

$$\mathbf{g}\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1}\right) = H^{k+\nu_f}\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+\nu_f} + \frac{1}{\Delta t_k}P^{k+\nu_f}\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} - \hat{\mathbf{\Psi}}^{k}\right) + \mathbf{q^*}^{k+\nu_f} = \mathbf{0} \tag{37}$$

il metodo di Newton risulta

$$J(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m})\mathbf{s}^m = -\mathbf{g}(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}) \tag{38}$$

dove $\mathbf{s}^m = \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} - \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}$ e gli elementi della matrice Jacobiana J sono dati da

$$J_{ij} = \nu_f H_{ij} + \frac{1}{\Delta t_k}P_{ij} + \sum_s \frac{\partial H_{is}}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}}\hat{\psi}_s^{k+\nu_f} + \frac{1}{\Delta t_k}\sum_s \frac{\partial P_{is}}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}}(\hat{\psi}_s^{k+1} - \hat{\psi}_s^{k}) + \frac{\partial q_i^*}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}} \tag{39}$$

L'equazione (38) rappresenta un sistema lineare non simmetrico che deve essere rissolto ad ogni iterazione di Newton.

Il metodo di Picard si ricava direttamente dall'equazione (31) congelando gli elementi delle matrici contenenti l'incognita e del vettore dei termini noti all'iterazione precedente m e risolvendo per l'incognita alla nuova iterazione $m+1$, ottenendo

$$\begin{aligned}&\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k}P^{k+\nu_f,m}\right)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} \\ &= \left(\frac{1}{\Delta t_k}P^{k+\nu_f,m} - (1-\nu_f)H^{k+\nu_f,m}\right)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k} - \mathbf{q^*}^{k+\nu_f,m}\end{aligned} \tag{40}$$

Questo sistema lineare simmetrico può essere scritto in maniera alternativa come

$$\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k}P^{k+\nu_f,m}\right)\mathbf{s}^m = -\mathbf{g}(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}) \tag{41}$$

Dal confronto delle equazioni (38) e (41) si può vedere che lo schema di Picard utilizza come Jacobiano un'approssimazione di quello di Newton. Una differenza importante tra i due sta nel fatto che il sistema di Newton è non simmetrico mentre la tecnica di Picard preserva la simmetria del sistema originale.

E' stato osservato sperimentalmente che il metodo di Newton è più sensibile di quello di Picard all'accuratezza della soluzione iniziale. Questo suggerisce che il metodo di Picard può essere efficaciemente utilizzato per calcolare una soluzione iniziale sufficientemente accurata per un'applicazione successiva del più veloce schema di Newton [*Paniconi and Putti* 1994].

La convergenza iniziale di schemi iterativi può essere migliorata introducendo un parametro di sottorilassamento. Per i metodi di Newton e Picard applicati alla soluzione dell'equazione di Richards si sono studiate opportune tecniche di rilassamento [*Cooley* 1983; *Paniconi and Putti* 1994] che cercano di stimare empiricamente il valore ottimale del parametro di sottorilassamento. Algoritmi di "line search" e di "trust region", invece, formano la base per lo sviluppo di procedure sistematiche di determinazione di tale parametro [*Dennis and Schnabel* 1983; *Paniconi and Putti* 1996].

Solutori iterativi per il problema accoppiato a densità variabile

L'algoritmo comunemente utilizzato per la soluzione numerica del problema dell'accoppiamento non lineare delle equazioni di flusso e trasporto a densità variabile può essere descritto come segue. All'iterazione $(m+1)$ si risolve l'equazione di flusso per l'incognita $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1}$ utilizzando come soluzione iniziale i valori della pressione e della concentrazione all'iterazione precedente, $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}$ e $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}$. Il campo di velocità dato dall'equazione (32) viene poi calcolato utilizzando $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1}$ e $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}$. I valori di velocità e pressione appena calcolati vengono inseriti nell'equazione di trasporto che viene cosìlinearizzata e può quindi essere risolta per $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1}$. Questa procedura, che viene ripetuta fino a convergenza, viene considerato come un metodo di Picard.

L'algoritmo può essere espresso in formule

$$\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k} P^{k+\nu_f,m}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} = \left(\frac{1}{\Delta t_k} P^{k+\nu_f,m} - (1-\nu_f) H^{k+\nu_f,m}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k} - \mathbf{q}^{*^{k+\nu_f,m}} \tag{42}$$

$$\mathbf{v}_\ell^{k+1,m} = U_\ell^{k+1,m} \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1,m} \qquad \ell = x,y,z \tag{43}$$

$$\left[\nu_c (A+B+C)^{k+\nu_c,m} + \frac{1}{\Delta t_k} M^{k+1,m}\right] \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1} = \left[\frac{1}{\Delta t_k} M^{k} - (1-\nu_c)(A+B+C)^{k+\nu_c,m}\right] \hat{\mathbf{c}}^{k} - \mathbf{r}^{*^{k+\nu_c}} \tag{44}$$

Si noti che l'equazione (42) rappresenta lo schema di Picard (40), e può essere sostituito con un altro metodo di linearizzazione dell'equazione di flusso insaturo, come per esempio il metodo di Newton (38). Inoltre, nell'equazione (43) compare il termine $\mathbf{v}_\ell^{k+1,m}$ al posto di $\mathbf{v}_\ell^{k+1,m+1}$ perché nel calcolo è stata utilizzata la pressione all'iterazione $m+1$, $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1}$, e la concentrazione all'iterazione m, $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}$. In maniera analoga le matrici dell'equazione di trasporto hanno l'indice m e non $m+1$ perché sono state valutate utilizzando $\mathbf{v}_\ell^{k+1,m}$. Ad ogni iterazione di questo schema di Picard si devono risolvere di seguito due sistemi lineari di dimensione $N \times N$, quello derivante dall'equazione di flusso (42) e quello derivante dall'equazione di trasporto (44).

Una procedura alternativa alla precedente consiste nell'implementazione del metodo di Newton per il sistema accoppiato, che porta alla soluzione di un sistema lineare non simmetrico di dimensione $2N \times 2N$. Questo, insieme all'assemblaggio di una matrice Jacobiana di tali dimensioni, rende lo schema di Newton computazionalmente pesante. In molti casi è più conveniente disaccoppiare il sistema di Newton prendendo in considerazione solo le componenti più importanti dello Jacobiano, dando luogo al cosiddetto metodo di Newton parziale [*Putti and Paniconi* 1995b]. Questo metodo, nello spirito di metodi simili utilizzati nelle simulazioni di giacimenti [*Aziz and Settari* 1979], combina l'efficienza computazionale di un approccio disaccoppiato con le proprietà di convergenza del metodo di Newton, sfruttando il fatto che l'accoppiamento tra le due equazioni di flusso e trasporto è debole.

Riscrivendo le equazioni (42)–(44) con il termine di velocità espresso con $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1}$ al posto di $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}$ si ottiene

$$\begin{aligned}
&\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{P^{k+\nu_f,m}}{\Delta t_k}\right)\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} \\
&= -\left[(1-\nu_f)H^{k+\nu_f,m} - \frac{P^{k+\nu_f,m}}{\Delta t_k}\right]\hat{\mathbf{\Psi}}^{k} - \mathbf{q}^{*^{k+\nu_f,m}} \qquad (45)\\
&\left[\nu_c\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c,m+1} + \frac{M^{k+1,m+1}}{\Delta t_k}\right]\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1} \\
&= -\left[(1-\nu_c)\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c,m+1} - \frac{M^{k}}{\Delta t_k}\right]\hat{\mathbf{c}}^{k} - \mathbf{r}^{*^{k+\nu_c}} \qquad (46)
\end{aligned}$$

dove

$$\mathbf{v}_\ell^{k+1,m+1} = U_\ell \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1,m+1} \qquad (47)$$

L'equazione di trasporto, ora non lineare, può essere linearizzata con il metodo di Newton. La matrice Jacobiana che ne deriva è di dimensioni $N \times N$ e comprende le derivate dell'equazione di trasporto fatte rispetto al vettore concentrazione:

$$J\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1}\right) = \nu_c\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c} + \left[\frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{c}}^{k+1}}\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c}\right]\hat{\mathbf{c}}^{k+\nu_c} + \frac{1}{\Delta t_k}M^{k+1} \qquad (48)$$

L'espressione dei diversi elementi di J in (48) nel caso di flusso saturo è riportata in *Putti e Paniconi* [*1995a*]. Il sistema di Newton cosìrisultante è

$$J\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}\right)\Delta\hat{\mathbf{c}} = -\mathbf{f}_2\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}\right) \qquad (49)$$

La procedura di soluzione per un'iterazione del metodo di Newton parziale è simile alla procedura di Picard e può essere descritta dai seguenti due passi:

1. calcolare $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1}$ risolvendo l'equazione di flusso linearizzata con Picard o Newton utilizzando $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}$ e $\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}$ come soluzione iniziale;

2. risolvere l'equazione di Newton (49) ottenendo il nuovo valore del vettore concentrazione $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1}$.

Dal confronto dell'equazione (48) con il termine a sinistra del simbolo di uguaglianza di (44) si verifica che il costo addizionale dello schema di Newton parziale rispetto a quello di Picard è dato da due prodotti matrice-vettori e dall'assemblaggio dei corrispondenti elementi, essendo il resto formalmente identico e notando che il sistema lineare finale è non simmetrico in ambedue i casi.

L'utilizzo di uno schema di Newton a convergenza quadratica per l'equazione di trasporto, pur non garantendo convergenza quadratica per l'iterazione completa, porta comunque a velocità di convergenza superiori rispetto allo schema di Picard in molti casi pratici. Inoltre, in dipendenza dal valore del rapporto di densità e del coefficiente di dispersione, e quindi del grado di nonlinearità, il metodo di Newton può convergere anche in casi in cui lo schema di Picard diverge o stagna. D'altro canto, per ϵ piccolo o dispersione dominante, lo schema di Picard si rivela adeguato.

Solutori proiettivi per sistemi lineari

La discretizzazione e le procedure di linearizzazione descritte nei due paragrafi precedenti producono grandi sistemi sparsi di equazioni lineari che vanno ripetutamente risolte (a ciascuna iterazione non lineare ed ad ogni passo temporale). Questi sistemi discreti linearizzati possono essere sia simmetrici definiti positivi che non simmetrici: sono simmetrici nel caso dell'equazione di flusso linearizzato con il metodo di Picard, sono non simmetrici per l'equazione di trasporto e per il flusso linarizzato con il metodo di Newton.

Metodi proiettivi basati sugli spazi di Krylov sono stati sviluppati recentemente per grandi sistemi sparsi sia simmetrici che non simmetrici. Formiamo nel seguito una breve rassegna delle idee che fanno da fondamento ai metodi proiettivi. Per una descrizione teorica più dettagliata il lettore può fare riferimento a *Saad* [*1990*]. La forma usata per esprimere un sistema lineare o linearizzato di equazioni è la seguente:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{50}$$

dove A è una matrice di dimensione $N \times N$ che rappresenta flusso o trasporto o un Jacobiano. Un metodo proiettivo proietta $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ in sottospazi (chiamati spazi di Krylov) di dimensione crescente ℓ e risolve il sistema ridotto nel sottospazio. Il procedimento converge alla soluzione corretta $\mathbf{x}$ di aritmetica esatto dopo N iterazioni. In pratica, tuttavia, si cerca di ottenere la convergenza ben prima che la dimensione del sottospazio di Krylov raggiunga il suo massimo valore. Per questa ragione, e per via della loro natura ripetitiva, i solutori proiettivi sono considerati a tutti gli effetti metodi iterativi.

Un metodo proiettivo parte da una soluzione iniziale, generalmente arbitraria, $\mathbf{x}_0$ e definisce una nuova approssimazione $\mathbf{x}_\ell$ nel sottospazio $\mathbf{x}_0 + K_\ell$ dove K_ℓ è lo spazio di Krylov di dimensione ℓ:

$$K_\ell = \text{ span } \{\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \ldots, A^{\ell-1}\mathbf{r}_0\} \tag{51}$$

essendo $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ il residuo iniziale corrispondente a $\mathbf{x}_0$. La nuova soluzione $\mathbf{x}_\ell$ è ricavato imponendo le ben note condizioni di ortogonalità di Petrov-Galerkin tra il nuovo residuo $\mathbf{r}_\ell$ ed uno spazio ausiliario L_ℓ della stessa dimensione di K_ℓ, cioè $\mathbf{r}_\ell \perp L_\ell$.

Differenti scelte di L_ℓ producono altrettanti metodi proiettivi. Sotto questo aspetto c'è una perfetta somiglianza concettuale tra un metodo proiettivo del tipo descritto più sopra e l'approccio variazionale classico dei residui pesati, ad esempio gli elementi finiti, usato per risolvere un problema di valori iniziali e/o al contorno.

Le scelte più comuni per L_ℓ sono:

1. $L_\ell = K_\ell$. Questa scelta corrisponde al metodo ortogonale di Galerkin. Il metodo classica del gradiente coniugato (GC) [*Hestenes and Stiefel* 1952] appartiene a questa categoria.

La soluzione $\mathbf{x}_\ell$ esiste certamente ad ogni iterazione ℓ (o spazio di Krylov di dimensione ℓ) se A è simmetrica definita positiva, cioè nel nostro caso solo per il problema di flusso linearizzato con il metodo di Picard. In questa circostanza si può dimostrare che $\mathbf{x}_\ell$ minimizza la norma A^{-1} di $\mathbf{r}_\ell$ [*Freund et al.* 1992], vale a dire il metodo ortogonale di Galerkin è anche un metodo di minimizzazione del residuo (MR) per rapporto ad una opportuna norma di $\mathbf{r}_\ell$. D'altro lato, se A è non simmetrica, o è simmetrica non definita positiva, $\mathbf{x}_\ell$ non soddisfa alcuna proprietà di ottimo e la sua esistenza ad ogni iterazione non è garantita. In quest'ultimo caso il metodo proiettivo di Galerkin può fallire ad una determinata iterazione durate la procedura iterativa. Questo succede effettivamente spesso qualora il metodo GC fosse applicato a matrici non simmetriche o simmetriche non definite positive.

2. $L_\ell = AK_\ell$. Un metodo proiettivo ortogonale in questa categoria è anche un metodo MR che minimizza la norma euclidea del residuo $||\mathbf{r}_\ell||_2$. La soluzione $\mathbf{x}_\ell$ esiste sempre per ogni ℓ e $||\mathbf{r}_\ell||$ non puøcrescere con ℓ. L'algoritmo GMRES ("generalized minimal residual") di *Saad e Schultz* [*1986*] per matrici non simmetriche rientra in questa categoria.

3. L_ℓ viene costruito usando la trasposta A^T di A. Nessuna proprietà di ottimo è soddisfatta da un metodo proiettivo appartenente a quest'ultima categoria (a meno che $A = A^T$ con A definita positiva, nel qual caso il metodo rientra nella categoria nro. 1). Di nuovo $\mathbf{x}_\ell$ non necessariamente esiste in ogni spazio di Krylov e il metodo può fallire ad una certa iterata. Gli algoritmi più robusti in questa categoria sono Bi-CGSTAB ("biconjugate gradient stabilized", [*van der Vorst* 1992]) e TFQMR ("transpose-free quasi-minimal residual", [*Freund* 1993]).

Bi-CGSTAB e TFQMR sono entrambi una variante del metodo del gradiente biconiugato (BCG) di *Lanczos* [*1952*]. Si deve dire che nè Bi-CGSTAB ne TFQMR rimediano il possibile fallimento di BCG. In fatti in aritmetico esatto Bi-CGSTAB e TFQMR falliscono ogni qual volta fallisce BCG. Per contro la convergenza di GMRES troncato dipende dal numero p dello spazio di Krylov nel quale la soluzione viene cercata ma non si può avere divergenza durante il procedimento. Questo non implica che GMRES(p) converga sempre poichè si può avere stallo di $\mathbf{r}_\ell$ dopo una determinata valore di ℓ.

Nella pratica rissolutiva tutti gli algoritmi proiettivi (CG, GMRES, Bi-CGSTAB, TFQMR) devono essere precondizionati per convergere. Precondizionatori efficaci e ampiamente usati sono quelli basati sulla fattorizzazione incompleta di A. Nella cosiddetta fattorizzazione incompleta di Cholesky o di Crout, spessa denominata ILU(0), i fattori triangolari bassi ed alti L ed U, rispettivamente, di A (con $U = L^T$ se $A = A^T$) sono calcolati usando una procedura standard di fattorizzazione con la cancellazione di tutti gli elementi nuovi generati durante il processo [*Kershaw* 1978].

ILU(0) è il precondizionatore meno costoso ricavato con la fattorizzazione incompleta di A. Consentendo, e al tempo stesso controllando, un parziale riempimento di L e U si ottiene un precondizionatore migliore ma più costoso. La fattorizzazione corrispondente è chiamata (ρ, τ) con ρ e τ parametri definiti dall'utente con lo scopo di controllare il processo di riempimento, e quindi la qualità (ed il costo) del precondizionatore [*Saad* 1991]. Il parametro ρ specifiva il massimo numero di elementi nuovi da conservare in ciascuna riga di L ed U mentre τ definisce il valore minimo di ogni nuovo elemento di L ed U (in rapporto alla corrispondente riga di A) sotto il quale l'elemento stesso viene cancellato. Con $\rho = N$ e $\tau = 0$, ILUT(N,0) calcola i fattori triangolari esatti di A ed il metodo proiettivo corrispondente converge in una iterazione.

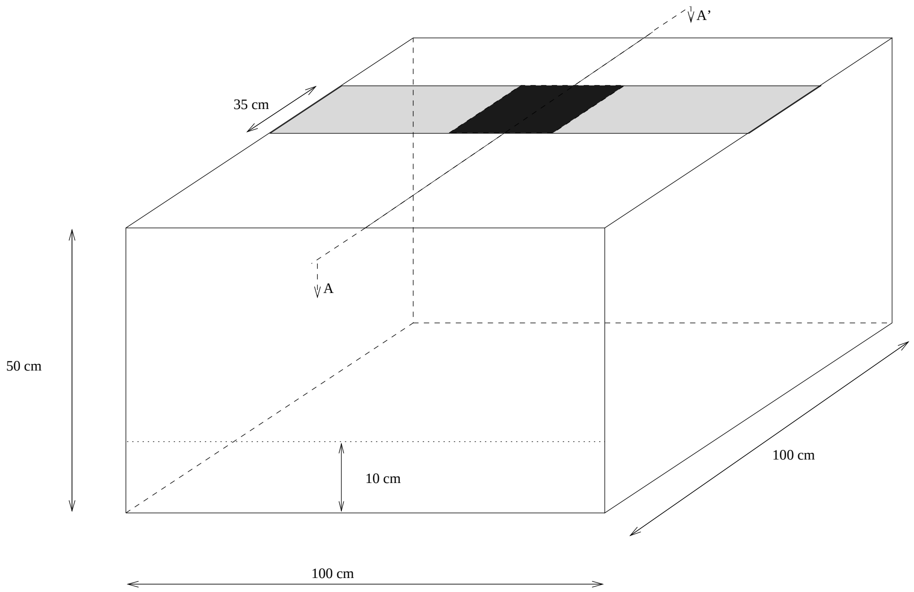

Figura 1: Schematizzazione del problema considerato nell'esempio applicativo.

Questo è un caso speciale privo ovviamente di interesse pratico. Allo stesso modo con $\rho = 0$ (e τ arbitrario) si ottiene ILU(0).

La scelta del precondizionatore più conveniente, in termini di costo complessivo, richiede un compromesso tra due requisiti opposti: accelerazione della convergenza asintotica e costo minimo per il calcolo sia di L che di U e per eseguire ciascuna iterazione. La scelta finale comunque dipenderà in parte anche da A, cioè dal tipo di problema (flusso, trasporto, Jacobiano) da risolvere.

Esperienze reiterate con problemi di flusso [*Gambolati and Perdon* 1984] e di trasporto [*Pini and Putti* 1994; *Gambolati et al.* 1996] suggeriscono che il GC con ILU(0) è molto vantaggioso in problemi simmetrici e che Bi-CGSTAB è il più robusto tra i metodi proiettivi non simmetrici. GMRES(p) con $p = 20$ (nella versione con "restart") è risultato il meno robusto. In parecchi problemi non simmetrici ILU(0) non è stato sufficiente ad assicurare una convergenza accettabile ed è stato necessario usare ILUT(ρ, τ) con valori opportuni di ρ e τ. In termini di costo totale Bi-CGSTAB, GMRES(20) e TFQMR sono grossomodo equivalenti quando tutti e tre convergono, con Bi-CGSTAB leggermente più efficiente degli altri due solutori.

Un esempio applicativo: Infiltrazione in un acquifero freatico di un contaminante salino

In questo esempio si presenta la simulazione tridimensionale della contaminazione dovuta alla presenza localizzata di ioni di sodio in superficie di un acquifero freatico drenato da un canale laterale e ricaricato da precipitazione costante [*Gureghian* 1983; *Gambolati et al.* 1994]. Una schematizzazione della geometria del problema è mostrata in Figura 1. Il dominio è discretizzato superficialmente con 2009 nodi e 3840 triangoli e suddiviso verticalmente in 20 strati, ottenendo cosìuna griglia tridimensionale formata da 42189 nodi e 230400 tetraedri.

L'acquifero è posto inizialmente completamente saturo con pressione uniformemente nulla.

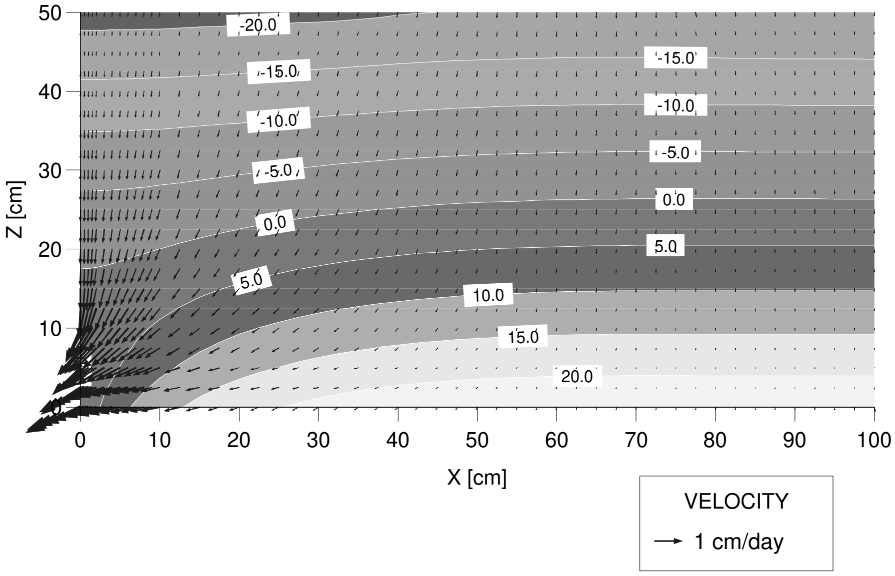

Figura 2: Campo di pressione (cm) e di velocità (cm/giorno) nella sezione AA$'$ a 60 giorni

Sulla parte superficie individuata dal quadrato grigio di figura è imposto un flusso costante di 0.15 cm/d mentre la rimanente parte è soggetta ad un flusso costante di 0.1 cm/d. Sulla faccia verticale frontale, fino ad un'elevazione di 10 cm è imposta una condizione di Dirichlet di pressione nulla, mentre una condizione di flusso nullo è presente per i restanti 40 cm. Ancora flusso nullo è imposto sulle altre tre faccie verticali e sulla base. L'acquifero è omogeneo e isotropo con $K_s = 1$ cm/d e $\phi = 0.3$. Le equazioni (5) e (6) sono utilizzate come curve caratteristiche con parametri $\kappa = 0.015$, $\beta = 2.0$, $\gamma = 3.0$, $\psi_a = -10.0$ cm, $S_{wr} = 0.01$, $a = 2.0$, e $b = 3.5$. L'acquifero è inizialmente non comntaminato e si assume che il sale entri nell'acquifero dalla zona ombreggiata di figura ove sono imposte condizioni al contorno per l'equazione di trasporto $c = 1$. Nella rimanente parte del dominio si impone un flusso dispersivo nullo. Il rapporto di densità è parti a $\epsilon = 0.03$ mentre il rapporto di viscosità e il coefficiente di diffusione sono nulli e i coefficienti di dispersività valgono $\alpha_L = 2$ cm and $\alpha_T = 0.4$ cm.

I risultati della simulazione dopo 60 giorni di infiltrazione per la sezione trasversale AA$'$ sono rappresentati in in termini di pressione e velocità in Figura 2 e in termini di concentrazione in Figura 3. I risultati mostrano che l'acquifero il drenaggio della faccia verticale è più elevato della ricarica superficiale, per cui si generano condizioni insature nella sua parte superiore. In questa simulazione il sistema si comporta come se una fonte sospesa fosse presente nella faccia frontale verticale tra 0 e 10 cm. La superficie libera si abbatte fino a raggiungere lo stazionario, momento in cui essa interseziona la faccia frontale all'altezza di 10 cm. Si noti che a 60 giorni la posizione del punto più alto della fonte sospesa si trova approssimativamente a 17 cm di altezza, com si può vedere dalla Figura 2. La nuvola di contaminante ha una forma praticamente simmetrica nella zona vicina al punto di infiltrazione e comincia a muoversi verso la fonte sospesa nella zona più bassa, dove le velocità sono maggiori.

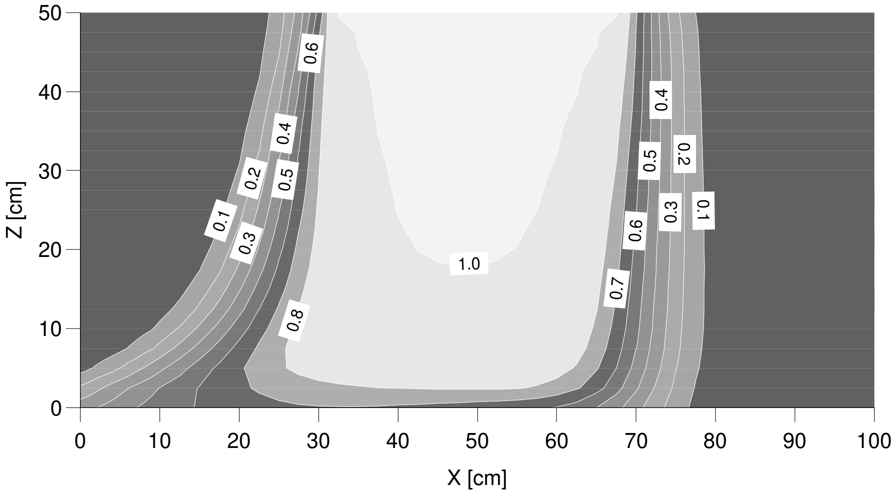

Figura 3: Concentrazione normalizzata nella sezione AA$'$ a 60 giorni

Riferimenti Bibliografici

Aziz, K. and A. Settari, *Petroleum Reservoir Simulation.* Applied Science Publishers, London, UK, 1979.

Bear, J., *Hydraulics of Groundwater.* McGraw-Hill, New York, NY, 1979.

Bear, J., A. H.-D. Cheng, I. Herrera, S. Sorek and D. Ouazar (eds.), *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers: Concepts, Methods, and Practices.* Dordrecht, Holland, 1999. [in press], Kluwer Academic.

Bergamaschi, L. and M. Putti, Mixed finite elements and Newton-like linearization for the solution of Richard's equation, *Int. J. Numer. Methods Eng.* , 1999. (In press).

Brezzi, F. and M. Fortin, *Mixed and Hybrid Finite Element Methods.* Springer-Verlag, Berlin, 1991.

Collins, M. A. and L. W. Gelhar, Seawater intrusion in layered aquifers, *Water Resour. Res.* 7(4), 971–979, 1971.

Cooley, R. L., Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems, *Water Resour. Res.* 19(5), 1271–1285, 1983.

Cox, R. A. and T. Nishikawa, A new total variation diminishing scheme for the solution of advective-dominant solute transport, *Water Resour. Res.* 27(10), 2645–2654, 1991.

Dennis, J. E. and R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1983.

Domenico, P. A. and F. W. Schwartz, *Physical and Chemical Hydrogeology.* John Wiley & Sons, New York, NY, 1990.

Durlofsky, L. J., A triangle based mixed finite element–finite volume technique for modeling two phase flow through porous media, *J. Comput. Phys.* 105, 252–266, 1993.

Essaid, H. I., A multilayered sharp interface model of coupled freshwater and saltwater in coastal systems: Model development and application, *Water Resour. Res.* 26(7), 1431–1454, 1990.

Freeze, R. A. and J. A. Cherry, *Groundwater.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1979.

Freund, R. W., A transpose-free quasi-minimal residual algorithm for non-Hermitian linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.* 14(2), 470–482, 1993.

Freund, R. W., G. H. Golub and N. M. Nachtigal, Iterative solution of linear systems, *Acta Numerica* 57–100, 1992.

Frind, E. O., Simulation of long-term transient density-dependent transport in groundwater, *Adv. Water Resour.* 5, 73–88, 1982.

Galeati, G. and G. Gambolati, On boundary conditions and point sources in the finite element integration of the transport equation, *Water Resour. Res.* 25(5), 847–856, 1989.

Gambolati, G. and A. Perdon, The conjugate gradients in subsurface flow and land subsidence modelling. In: Bear, J. and M. Y. Corapcioglu (eds.) *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media.* Martinus Nijhoff, Dordrecht, Holland, pp 953–984, 1984.

Gambolati, G., C. Paniconi and M. Putti, Numerical modeling of contaminant transport in groundwater. In: Petruzzelli, D. and F. G. Helfferich (eds.) *Migration and Fate of Pollutants in Soils and Subsoils.* Springer-Verlag, Berlin. Volume 32 of *NATO ASI Series G: Ecological Sciences*, pp 381–410, 1993.

Gambolati, G., G. Pini, M. Putti and C. Paniconi, Finite element modeling of the transport of reactive contaminants in variably saturated soils with LEA and non-LEA sorption. In: Zannetti, P. (ed.) *Environmental Modeling, Vol. II: Computer Methods and Software for Simulating Environmental Pollution and its Adverse Effects* chapter 7, 173–212, Computational Mechanics Publications, Southampton, UK, 1994.

Gambolati, G., M. Putti and C. Paniconi, Projection methods for the finite element solution of the dual-porosity model in variably saturated porous media. In: *Advances in Groundwater Pollution Control and Remediation.* Kluwer Academic, Dordrecht, Holland. Volume 9 of *NATO ASI Series 2: Environment*, pp 97–125, 1996.

Gambolati, G., M. Putti and C. Paniconi, Three-dimensional model of coupled density-dependent flow and miscible salt transport in groundwater. In: Bear, J., A. H.-D. Cheng, I. Herrera, S. Sorek and D. Ouazar (eds.) *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers: Concepts, Methods, and Practices*, [in press], Kluwer Academic, Dordrecht, Holland, 1999.

Gureghian, A. B., TRIPM, a two-dimensional finite element model for the simultaneous transport of water and reacting solutes through saturated and unsaturated porous media. Technical Report ONWI-465, Off. of Nuclear Water Isolation, Columbus, Ohio, 1983.

Henry, H. R., Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. In: *Sea Water in Coastal Aquifers.* U.S. Geol. Surv. Water Supply Paper, No. 1613-C, pp 70–84, 1964.

Hestenes, M. R. and E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards* 49(6), 409–436, 1952.

Hill, M. C., A comparison of coupled freshwater sharp interface and convective dispersive models of saltwater intrusion in a layered aquifer system. In: *Proc. VII Int. Conf. on Computational Methods in Water Resources, Vol. 1.* Elsevier, Amsterdam, Holland, pp 211–216, 1988.

Huyakorn, P. S. and G. F. Pinder, *Computational Methods in Subsurface Flow.* Academic Press, New York, NY, 1983.

Huyakorn, P. S., S. D. Thomas and B. M. Thompson, Techniques for making finite elements competitive in modeling flow in variably saturated porous media, *Water Resour. Res.* 20(8), 1099–1115, 1984.

Huyakorn, P. S., J. W. Mercer and D. S. Ward, Finite element matrix and mass balance computational schemes for transport in variably saturated porous media, *Water Resour. Res.* 21(3), 346–358, 1985.

Huyakorn, P. S., P. F. Andersen, J. W. Mercer and H. O. White, Saltwater intrusion in aquifers: Development and testing of a three-dimensional finite element model, *Water Resour. Res.* 23(2), 293–312, 1987.

Kershaw, D. S., The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations, *J. Comput. Phys.* 26, 43–65, 1978.

Kolditz, O., R. Ratke, H.-J. G. Diersch and W. Zielke, Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable density flow and transport models, *Adv. Water Resour.* 21(1), 27–46, 1998.

Lanczos, C., Solution of systems of linear equations by minimized iterations, *J. Res. Nat. Bur. Standard* 49, 33–53, 1952.

Mangold, D. C. and C. F. Tsang, A summary of subsurface hydrological and hydrochemical models, *Rev. Geophys.* 29(1), 51–79, 1991.

Ortega, J. M. and W. C. Rheinboldt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables.* Academic Press, New York, NY, 1970.

Paniconi, C. and M. Putti, A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems, *Water Resour. Res.* 30(12), 3357–3374, 1994.

Paniconi, C. and M. Putti, Newton-type linearization and line search methods for unsaturated flow models. In: *Advances in Groundwater Pollution Control and Remediation.* Kluwer Academic, Dordrecht, Holland. Volume 9 of *NATO ASI Series 2: Environment*, pp 155–172, 1996.

Parker, J. C., Multiphase flow and transport in porous media, *Rev. Geophys.* 27(3), 311–328, 1989.

Peyret, R. and T. D. Taylor, *Computational Methods for Fluid Flow.* Springer-Verlag, New York, NY, 1983.

Philip, J. R., Theory of infiltration, *Adv. Hydrosci.* 5, 215–296, 1969.

Pini, G. and M. Putti, Krylov methods in the finite element solution of groundwater transport problems. In: *Computational Methods in Water Resources X, Volume 1.* Kluwer Academic, Dordrecht, Holland, pp 1431–1438, 1994.

Putti, M., W. W.-G. Yeh and W. A. Mulder, A triangular finite volume approach with high-resolution upwind terms for the solution of groundwater transport equations, *Water Resour. Res.* 26(12), 2865–2880, 1990.

Putti, M. and C. Paniconi, Finite element modeling of saltwater intrusion problems with an application to an Italian aquifer. In: *Advanced Methods for Groundwater Pollution Control.* Springer-Verlag, New York, NY. Volume 364 of *CISM (Int. Centre for Mechanical Sciences) Courses and Lectures*, pp 65–84, 1995.

Putti, M. and C. Paniconi, Picard and Newton linearization for the coupled model of saltwater intrusion in aquifers, *Adv. Water Resour.* 18(3), 159–170, 1995.

Putti, M. and C. Cordes, Finite element approximation of the diffusion operator on tetrahedra, *SIAM J. Sci. Comput.* 19(4), 1154–1168, 1998.

Saad, Y., Krylov subspace methods: Theory, algorithms, and applications. In: *Computing Methods in Applied Sciences and Engineering.* SIAM, Philadelphia, pp 24–41, 1990.

Saad, Y., ILUT: A dual strategy accurate incomplete ILU factorization. Technical Report, Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, 1991.

Saad, Y. and M. H. Schultz, GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 7(3), 856–869, 1986.

Ségol, G., *Classic Groundwater Simulations: Proving and Improving Numerical Models.* PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1993.

Ségol, G., G. F. Pinder and W. G. Gray, A Galerkin finite element technique for calculating the transient position of the saltwater front, *Water Resour. Res.* 11(2), 343–347, 1975.

Sherif, M. M. and V. P. Singh, Saltwater intrusion. In: Singh, V. P. (ed.) *Hydrology of Disasters* chapter 10, 269–316, Kluwer Academic, Dordrecht, Holland, 1996.

Taigbenu, A. E., J. A. Liggett and A. H.-D. Cheng, Boundary integral solution to seawater intrusion into coastal aquifers, *Water Resour. Res.* 20(8), 1150–1158, 1984.

van der Vorst, H., Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 13, 631–644, 1992.

van Genuchten, M. T. and D. R. Nielsen, On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils, *Ann. Geophys.* 3(5), 615–628, 1985.

van Leer, B., Towards the ultimate conservative difference scheme, IV, A new approach to numerical convection, *J. Comp. Phys.* 23, 263–275, 1977.

Voss, C. I. and W. R. Souza, Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone, *Water Resour. Res.* 23(10), 1851–1866, 1987.

Wirojanagud, P. and R. J. Charbeneau, Salt water upconing in unconfined aquifers, *J. Hydraul. Eng. Am. Soc. Civ. Eng.* 111, 417–434, 1985.

Zienkiewicz, O. C., *The Finite Element Method.* McGraw-Hill, New York, NY, 1986.