Progetto PST/MURST "Ambiente e Territorio"
Linea "Tecnologie avanzate per la gestione delle acque"
Parte "Software per la modellistica ambientale"

Contratto tra PST (Parco Scientifico e Tecnologico della Sardegna),
Pratica IMI n. 63481 Progetto n. 97/Ric.,
e CRS4 (Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori in Sardegna)
stipulato in data 15/09/99

Rapporto di ricerca bibliografica (Stato dell'arte dei modelli di flusso e trasporto in mezzi porosi)

C. Gallo[1], G. Lecca[1], C. Paniconi[1], M. Putti[2]

(1) CRS4, Cagliari
(2) DMMSA, Università di Padova

Indice

1 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. In quest'ottica, i modelli di simulazione delle dinamiche delle risorse idriche sotterranee assumeranno un ruolo sempre più centrale negli studi di impatto ambientale. Strumenti di questo genere devono necessariamente ricorrere a tecniche numeriche, che attraverso codici di calcolo possano essere efficacemente utilizzati 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 supportare la valutazione, sia qualitativa che quantitativa, del rischio di inquinamento degli acquiferi.

I contaminanti presenti nel sottosuolo possono essere classificati secondo vari criteri [*Freeze e Cherry* 1979; *Domenico e 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 derivare da più attività collegate. Per esempio, l'eccessivo sfruttamento di acquiferi costieri per prelievie industriali o agricoli può causare intrusione di acqua marina con conseguente estrazione di acque salmastre e salinizzazione dei suoli.

In questo primo rapporto vengono presentate le equazioni fondamentali che reggono i fenomeni di flusso e trasporto in mezzi porosi insieme ai metodi numerici che verrano utilizzati per la soluzione di tali equazioni. I modelli matematici in questione 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 alcune fenomenologie di interazione chimico-fisica tra il soluto e la matrice porosa. Accanto a queste equazione, si descrive anche un modello, a scala di bacino, di afflussi-deflussi superficiali accoppiato con un modello di filtrazione. Questo approccio viene tiene conto di fenomeni importanti qualora vi sia una stretta correlazione tra il moto dell'acqua in superficie e il moto dell'acqua nella zona insatura.

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 e Tsang* 1991; *Ségol* 1993]. L'esposizione in questo rapporto è pertanto limitata ai soli processi di diretto interesse per i siti oggetto di studio, e si concentra nella descrizione generale della modellizzazione di tali fenomeni e la loro soluzione numerica integrata all'interno del simulatore CODESA-3D.

2 Fenomenologia e Modellistica

2.1 Equazione di flusso

L'equazione che regge il moto di un fluido (generalmente acqua) in un mezzo poroso a saturazione variabile, nota anche come equazione di Richards, si scrive [*Philip* 1969]

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

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 unità di volume (densità di portata), positiva se iniettata.

L'equazione (1) è altamente non lineare a causa della 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 prendono la forma [*Huyakorn et al.* 1984]:

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

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

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 dall'equazione (4).

Il modello matematico deve essere completato dalle condizioni iniziale e al contorno di Dirichlet e/o di Neumann:

$$\psi(\mathbf{x},0) = \psi_o(\mathbf{x}) \tag{7}$$
$$\psi(\mathbf{x},t) = \psi_p(\mathbf{x},t) \qquad \text{su } \Gamma_1 \tag{8}$$
$$\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} = -q_n(\mathbf{x},t) \qquad \text{su } \Gamma_2 \tag{9}$$

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 ancora usata la convenzione per cui il flusso q_n è positivo se entrante nel dominio e negativo altrimenti.

2.2 Equazione del trasporto

Trasporto non reattivo. 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]:

$$\phi\frac{\partial S_w C}{\partial t} = \nabla\cdot(D\nabla C) - \nabla\cdot(C\mathbf{v}) + qC^* + f \tag{10}$$

dove C è la concentrazione del contaminante in soluzione, D il tensore di dispersione, $\mathbf{v}$ il vettore velocità di Darcy, C^* la 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 (nelle sue componenti) come:

$$D_{ij} = \phi S_w \tilde{D}_{ij} = \alpha_T \mid \mathbf{v} \mid \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T)\frac{v_i v_j}{\mid \mathbf{v} \mid} + \phi S_w D_o \tau \delta_{ij} \qquad i,j = x,y,z \tag{11}$$

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 (10) 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:

$$\phi S_w\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla\cdot(D\nabla C) - \mathbf{v}\cdot\nabla C + q(C^* - C) + f \tag{12}$$

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].

Trasporto multispecie con reazione chimica. L'equazione del trasporto estesa al caso di un sistema multispecie in cui gli inquinanti siano soggetti ad adsorbimento e a decadimento reattivo (biologico, chimico, etc.) può essere scritta come (cfr. l'equazione (12)):

$$\phi S_w R_D^i \left(\frac{\partial C^i}{\partial t} + \lambda C^i \right) = \nabla \cdot \left(D \nabla C^i \right) - \mathbf{v} \cdot \nabla C^i + q(C^{i,*} - C^i) + f^i - B^i \tag{13}$$

C^i è la concentrazione della specie i-esima, $R_D^i = 1 + (\rho_b k_D^i)/(\phi S_w)$ il corrispondente coefficiente di ritardo, $\rho_b = (1-\phi)\gamma_s$ la densità della matrice porosa, γ_s la densità dei grani e k_D^i il coefficiente di distribuzione, che descrive la relazione di partizionamento tra la concentrazione del composto adsorbito S^i nella fase solida e la concentrazione del soluto C^i, tramite un'isoterma di Freundlich $S^i = k_D(C^i)^n$, con $n = 1$ nel caso di adsorbimento lineare. Il termine B^i indica rappresenta la produzione o scomparsa di massa della componente i-esima dovuta a reazioni chimiche, mentre f^i rappresenta ancora un termine di sorgente, in analogia al termine f dell'equazione (10).

Per l'equazione di trasporto le condizioni iniziali ed al contorno si possono scrivere come:

$$C^i(\mathbf{x}, 0) = C_0^i(\mathbf{x}) \tag{14}$$

$$C^i(\mathbf{x}, t) = C_p^i(\mathbf{x}, t) \qquad \text{on } \Gamma_3 \tag{15}$$

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

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

dove C_0^i è la concentrazione iniziale, C_p^i la concentrazione imposta nel contorno di Dirichlet Γ_3, q_d^i il flusso dispersivo imposto nel contorno di Neumann Γ_4 e q_c^i il flusso totale imposto nel contorno di Cauchy Γ_5.

2.3 Modello accoppiato flusso-trasporto 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 del moto [*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 e Singh* 1996; *Bear et al.* 1999].

Il sale presente nel sottosuolo reagisce solo parzialmente 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 e Gelhar* 1971; *Taigbenu et al.* 1984; *Wirojanagud e 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 e Souza* 1987; *Hill* 1988]. Tutti questi modelli considerano il caso di flusso in zona satura, e non sono in grado di simulare fenomeni che possono essere 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]

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

$$\mathbf{v} = -K_s\frac{1+\epsilon c}{1+\epsilon' c}K_r\ \left(\nabla\psi + (1+\epsilon c)\eta_z\right) \tag{22}$$

$$\phi\frac{\partial S_w c}{\partial t} = \nabla\cdot(D\nabla c) - \nabla\cdot(c\mathbf{v}) + qc^* + f \tag{23}$$

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 (cfr. 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 (vedi equazione 10). 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 e Paniconi* 1995].

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.

2.4 Modello "dual-porosity" per trasporto in non-equilibrio e mezzi fratturati

La modellistica del flusso e trasporto in non-equilibrio e in terreni fratturati sono in molti casi abbastanza simile. Esiste infatti una varietà di approcci modellistici, a seconda del livello di complessità a cui ci si vuole spingere e del livello di dettagli richiesto (si veda *Schmelling e Ross* [*1989*] per una panoramica sull'argomento). Qui di seguito vengono menzionati gli approcci modellistici più comuni per modellizzare i mezzi porosi fratturati, tenendo conto che il secondo e il terzo dei tre elencati possono essere applicati direttamente anche al caso di trasporto in condizioni di non-equilibrio.

- Rappresentazione del numero totale delle fratture o di una loro distribuzione statistica. In questo caso le fratture vengono descritte come coppie di superfici caratterizzate da una distanza ("apertura") e una scabrezza variabili spazialmente, e la parametrizzazione avviene essenzialmente attraverso il parametro di apertura della frattura [*Nordqvist et al.* 1992; *Dronfield e Silliman* 1993]. Questo approccio è usato molto spesso nel campo dei moti multifase (olio-acqua-aria) [*Murphy e Thomson* 1993].

- Rappresentazione del mezzo fratturato come un mezzo poroso equivalente. Questo approccio modellistico si basa su una procedura di omogeneizzazione in cui vengono calcolate le proprietà medie del mezzo poroso pesando opportunamente la parte porosa vera e propria e quella contente le fratture. Le equazioni di flusso e trasporto come scritte precedentemente vengono poi utilizzate nel modello incorporando i valori medi dei parametri così ottenuti. Questo l'approccio ha il limite evidente di non poter descrivere il moto nelle fratture vere e proprie, e quindi di sottostimare in alcuni casi molto evidentemente la massima distanza raggiunta dall'inquinante.

- Rappresentazione tramite l'approccio "dual-porosity". Lo schema "dual-porosity", ben noto in letteratura, è stato applicato spesso per modellizzare vari tipi di fenomeni, come per esempio l'adsorbimento irreversibile, il trasporto con reazioni in condizioni di non equilibrio [*Gallo et al.* 1996], eccetera. Nel caso di applicazione di tale modello al trasporto in terreni fratturati [*Sudicky e McLaren* 1992; *Hamm e Bidaux* 1996], si assume che il flusso avvenga solo nelle fratture (la cosiddetta frazione "mobile" del suolo) dove si sviluppa un vero e proprio campo di flusso, mentre nella matrice porosa (parte immobile) le specie chimiche vengano trasportate solo attraverso un meccanismo di scambio di massa diffusivo.

In questo progetto si è scelto di rappresentare i mezzi porosi fratturati mediante l'approccio "dual-porosity", che rappresenta un buon compromesso fra la complessità del primo e lo scarso livello di approssimazione del secondo. In questo caso, l'equazione del trasporto di inquinanti multispecie soggetti a biodegradazione, per il caso di suoli dual-porosity, si può scrivere come segue:

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\phi_m S_{w_m} \mathbf{D} \cdot \nabla C_m) - \mathbf{v} \cdot \nabla C_m &= (\phi_m S_{w_m} + \rho_s F k_{D_m}) \frac{\partial C_m}{\partial t} \\
+ [\phi_{im} + \rho_s (1-F) k_{D_{im}}] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} &+ \lambda (\phi_m S_{w_m} + \rho_s F k_{D_m}) C_m \\
&+ \lambda [\phi_{im} + \rho_s (1-F) k_{D_{im}}] C_{im} + q(C_m - c^*) - f \qquad (25) \\
[\phi_{im} + \rho_s (1-F) k_{D_{im}}] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} &= \alpha (C_m - C_{im}) - \lambda [\phi_{im} + \rho_s (1-F) k_{D_{im}}] C_{im} \qquad (26)
\end{aligned}$$

dove S_{w_m} indice di saturazione del terreno nella zona mobile, ϕ_m porosità nella zona mobile (volume dei vuoti nella zona mobile / volume totale), $\mathbf{D}$ coefficiente di dispersione idrodinamica, C_m concentrazione di contaminante in soluzione nella zona mobile, C_{im} concentrazione di contaminante in soluzione nella zona immobile (stagnante), ϕ_{im} porosità della zona immobile (volume dei vuoti nella zona immobile / volume totale), $\rho_s = (1-n)\gamma_s]$ densità della matrice porosa, $\phi = \phi_m + \phi_{im}$ porosità totale del mezzo (volume dei vuoti / volume totale), γ_s densità dei grani, F frazione di grani (rispetto al totale) che risiedono nella zona dinamica. F e $1-F$ pesano l'adsorbimento tra la zona mobile e immobile, S_m concentrazione di adsorbato nella zona mobile (massa di adsorbato per massa totale di terreno), S_{im} concentrazione di adsorbato nella zona stagnante (massa di adsorbato per massa totale di terreno), λ coefficiente di decadimento (radioattivo, biologico, ecc.), α coefficiente di trasferimento di massa per diffusione dalla zona mobile a quella immobile.

Definendo i fattori di ritardo come:

$$R_m = 1 + \frac{\rho_s F k_{D_m}}{\phi_m S_{w_m}} \qquad (27)$$

$$R_{im} = 1 + \frac{\rho_s(1-F)k_{D_{im}}}{\phi_{im}} \tag{28}$$

e ponendo $T_m = \phi_m S_{w_m} R_m$ e $T_{im} = \phi_{im} R_{im}$, il modello diventa infine:

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C_m) - \mathbf{v} \cdot \nabla C_m &= T_m \frac{\partial C_m}{\partial t} \\
&+ T_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \lambda \left(T_m C_m + T_{im} C_{im} \right) + q(C_m - c^*) - f \qquad (29) \\
T_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} &= \alpha (C_m - C_{im}) - \lambda T_{im} C_{im} \qquad (30)
\end{aligned}$$

Per quanto riguarda condizioni al contorno, vale quanto detto per l'equazione di transporto precedentemente descritta, mentre si deve aggiungere una condizione iniziale per la concentrazione nella fase immobile, cioè C_{im}.

2.5 Reazione chimica

La quantità di fenomeni che possono essere annoverati come "reazione" chimica nel sottosuolo sono moltissimi e di notevole complessità. In questo studio vengono descritti tre importanti categorie di inquinanti reattivi che hanno attinenza con i siti in studio, e cioè:

- inquinanti biodegradabili;
- fertilizzanti e pesticidi;
- ioni metallici.

2.5.1 Biodegradazione

Una gran parte delle sostanze chimiche inquinanti presenti nel sottosuolo sono soggette a biodegrazione naturale, ma il tempo necessario alla loro distruzione è funzione del tipo di contaminante e dalle condizioni geochimiche del sistema. Fra le varie classi di sostanze biodegradabili, sono particolarmente importanti i composti organici, cioè gli idrocarburi e loro derivati. E' infatti ben nota la capacità dei batteri presenti nel sottosuolo di trasformare e degradare sostanze quali benzene, toluene, xilene ed etilbenzene (componenti dei comuni carburanti usati dagli autoveicoli) [*National Research Council* 1993]. I batteri naturalmente presenti nel suolo sono inoltre in grado di degradare anche idrocarburi clorurati (tricloroetilene, dicloroetilene, etc.) usati per la sgrassatura di metalli e come solventi, e idrocarburi poliaromatici (naftene, antracene, benzopirene, etc.) derivanti dagli scarti delle raffinerie ed usati per asfaltare le strade. Questo secondo tipo di inquinante viene degradato con molta più difficoltà, dato che questi composti necessitano di particolari condizioni ambientali perchè il processo di biodegradazione abbia luogo in maniera efficace.

La biodegradazione viene definita come un insieme di reazioni chimiche promosse o causate dalla presenza di batteri. Il metabolismo di questi microorganismi avviene solo se nel terreno si ha presenza in quantità sufficienti di carbonio organico, elettron-accettori (ossigeno, nitrati, solfati, ioni ferro, etc.), nutrienti (fosfati, nutrienti vari) ed energia. Generalmente, il carbonio organico è presente nei suoli naturalmente, ma nel caso di perdite accidentali di inquinanti organici, questi ultimi forniscono una sorgente di carbonio organico disponibile per la popolazione batterica, che può quindi svilupparsi ulteriormente. Gli inquinanti organici, dunque, vengono processati e degradati fino ad ottenere anidride carbonica e acqua [*Sims et al.* 1992]. Nel caso la reazione venga promossa dalla presenza di ossigeno, si dice che la biodegradazione avviene in condizioni aerobiche. Nel caso in cui la reazione venga promossa dalla presenza di altri elettron-accettori, si dice che avviene in condizioni anaerobiche. Tale distinzione risulta di notevole importanza, dato che determina il tipo di biodegradazione che si instaura e quali potrebbero essere le condizioni e gli interventi più idonei per accelerarla.

Dal punto di vista modellistico, molte formulazioni che partono da ipotesi differenti sono state sviluppate [*Molz et al.* 1986; *Widdowson et al.* 1988; *Kindred e Celia* 1989; *Taylor e Jaffè* 1990d; *Chen et al.* 1992; *Malone et al.* 1993; *Nicol et al.* 1994; *Essaid et al.* 1995; *Wood et al.* 1995; *Prommer* 1999]. Nel tentativo di coniugare semplicità di formulazione con accuratezza nella descrizione delle cinetiche, si riporta in questa sede un modello basato sulla presenza di un substrato organico indicato con la variabile $C^i = S$ (cioè il vero e proprio inquinante organico) che viene trasportato dal moto dell'acqua assieme a ossigeno e nitrati, indicati con O e N rispettivamente [*Kindred e Celia* 1989]. Ossigeno e nitrati sono elettron-accettori (EA) responsabili della biodegradazione in condizioni aerobiche e anaerobiche, rispettivamente. Il termine B^i con $i = S$ dell'equazione (13) assume la forma di combinazione di cinetiche di Monod:

$$B^S = C^{X,O}\mu_0^O Y_{S,O}\frac{C^S}{K^{S,O}+C^S}\frac{C^O}{K^O+C^O}I_b^O + C^{X,N}\mu_0^N Y_{S,N}\frac{C^S}{K^{S,N}+C^S}\frac{C^N}{K^N+C^N}I_b^N \quad (31)$$

dove $Y_{S,j}$, $j = O, N$ sono coefficienti che tengono conto della stechiometria della reazione fra S e gli EA, $K^{S,j}$ e K^j sono costanti di semisaturazione, μ_0^j sono i coefficienti di massima velocità di degradazione, e $C^{X,j}$ è la la popolazione batterica che usa il j-esimo EA, mentre I_b^j è la funzione di inibizione dei batteri collegata alla presenza o meno di ossigeno disciolto. Questa funzione viene introdotta nel modello per tenere conto della competizione fra degradazione aerobica e anaerobica e pesa il contributo dell'una e dell'altra dipendentemente dalla concentrazione di ossigeno disciolto. Come ampiamente documentato in letteratura [*Sims et al.* 1992], i vari EA non vengono utilizzati contemporaneamente, ma in un certo ordine che dipende dalle loro proprietà chimico-fisiche. Generalmente l'ossigeno risulta il substrato preferito e quindi l'utilizzo di nitrati come EA avviene quasi esclusivamente quando l'ossigeno comincia a scarseggiare. Questo porta dunque a formulare la funzione I_b^N come segue:

$$I_b^N = \frac{K_b}{K_b + C^O} \quad (32)$$

in cui K_b è la costante di inibizione. La funzione I_b^N può assumere valori tra 0 e 1, mentre $I_b^O = 1 - I_b^N$. Le funzioni di consumo di ossigeno e nitrato, cioè i termini B^O and B^N dell'equazione di trasporto, hanno una forma che si può scrivere in generale:

$$B^O = C^{X,O}\mu_0^O Y_O\frac{C^S}{K^{S,O}+C^S}\frac{C^O}{K^O+C^O}I_b^O \quad (33)$$

$$B^N = C^{X,N}\mu_0^N Y_N\frac{C^S}{K^{S,N}+C^S}\frac{C^N}{K^N+C^N}I_b^N \quad (34)$$

in cui Y_O e Y_N sono coefficienti di resa per O e N. La chiusura del sistema si ottiene una volta specificata la funzione di crescita/decadimento della popolazione batterica:

$$\frac{1}{C^{X,i}}\frac{\partial C^{X,i}}{\partial t} = \left(\mu_0^i \frac{C^S}{K^S + C^S}\frac{C^i}{K^i + C^i}\right) I_b^i - k_d^i \qquad i = O, N \tag{35}$$

in cui k_d^i è la costante di decadimento della i-esima popolazione batterica.

2.5.2 Pesticidi

I pesticidi sono sostante utilizzate per la distruzione dei parassiti delle piante, siano essi vegetali o meno, i cui residui vengono trasportati nel suolo per discioglimento nelle acque meteoriche. Queste sostanze sono soggette a reazioni di decadimento, per cui i gruppi attivi che le compongono (a livello molecolare) vengono via via disattivati o comunque resi innocui. Il processo di degradazione può richiedere un tempo molto lungo, oltre al fatto che i composti intermedi, che inevitabilmente si vengono a creare, possono risultare in alcuni casi più nocivi e pericolosi delle sostanze iniziali. Un tipico esempio di un pesticida che si trova molto frequentemente nelle falde acquifere è l'atrazina. Essa è un erbicida per piante a foglia larga ed è uno tra i più diffusi per l'uso estensivo in agricoltura. Detto composto risulta il meno biodegradabile della sua categoria, come testimonia il suo tempo di dimezzamento che può variare dalla settimana all'anno, a seconda dei tipi di suolo. La degradazione di questa classe di sostanze passa attraverso un certo numero di composti intermedi. Indicando con C_0 il prodotto di partenza, e C_n quello finale, il processo di decadimento può essere schematizzato come segue:

$$B^i = \mu_i Y_i F(C^i) - \mu_{i-1} Y_{i-1} F(C^{i-1}) \tag{36}$$

dove μ_i è la costante di degradazione, Y_i dipende dalla stechiometria della reazione e $F(C)$ è una funzione che descrive la cinetica di degradazione in funzione della concentrazione a partire da dati di laboratorio.

2.5.3 Fosfati e nitrati (Fertilizzanti)

Fosfati e nitrati sono composti utilizzati come fertilizzanti, cioè come nutrimento per le piante. Queste sostanze sono soggette ad un numero notevole di reazioni chimiche, spesso complesse, quali scambio ionico, precipitazione, adsorbimento, ossido-riduzione, etc. Per una descrizione più dettagliata di tali cinetiche si veda ad esempio [*Postma et al.* 1991; *Korom* 1992]. Per quanto riguarda lo stato dell'arte nel campo della modellistica, vale la pena di citare l'esistenza di un pacchetto di pubblico dominio, chiamato PHREEQC [*Parkhurst* 1995] che permette di calcolare le condizioni di equilibrio geochimico del suolo in presenza di tali sostanze. Questo, insieme ai modelli di flusso e trasporto precedentemente descritti, può essere utilizzato per la simulazione della migrazione di tali sostanze.

2.5.4 Metalli pesanti

Per quanto riguarda le dinamiche fisico-chimiche a cui sono soggetti di metalli pesanti, in prima approssimazione l'equazione del trasporto (10) è spesso sufficientemente accurata da descrivere il trasporto della singola specie. In alcuni casi risulta necessario considerare la cinetica di adsorbimento dei metalli pesanti nella matrice porosa. Questo processo è fortemente condizionato dalle condizioni geochimiche puntuali, quali, ad esempio, la forza ionica del sistema, il pH, il pE, e la presenza di altri ioni, sia in forma di soluti, che già adsorbiti sulla matrice porosa. Ancora il pacchetto applicativo PHREEQC può essere utilizzato efficacemente per calcolare gli equilibri geochimici e quindi la probabilità che una reazione avvenga.

2.6 Modello accoppiato flusso sotterraneo - flusso superficiale

Nei modelli idrologici a scala di bacino si ha spesso la necessità di descrivere le interazioni tra i processi idrologici superficiali e sotterranei, e ciò richiede la capacità di simulare in maniera dettagliata ed integrata tali fenomeni [*Abbott et al.* 1986]. Gli eventi di precipitazione, alternata ad evaporazione, determinano la dinamica idraulica di un bacino idrografico e sono suddivisi dal bacino stesso in deflussi superficiali (runoff), che comprendono fenomeni quali i moti di versante e di canale e gli effetti di laminazione dovuti agli invasi superficiali, e deflussi sotterranei, che comprendono infiltrazione nel terreno insaturo, movimento dell'acqua nelle falde superficiali e esfiltrazione o drenaggio dalla zona insatura verso la superficie. I modelli previsionali a scala di bacino che si trovano in letteratura generalmente non considerano in maniera dettagliata i moti di filtrazione, che vengono inclusi spesso come perdite nette nel moto di scorrimento superficiale. Talchè fenomeni di filtrazione laterale e drenaggio vengono completamente ignorati. Queste approssimazioni possono risultare inaccettabili qualora il contributo al runoff superficiale proveniente dal sottosuolo non sia trascurabile, come può accadere per esempio in un bacino a bassa pendenza con falde poco profonde in cui depressioni topografiche, tipicamente laghi o stagni, interagiscono attivamente con i deflussi superficiali e sotterranei.

Il modello matematico accoppiato di flusso sotterraneo e superficiale che viene presentato in questo rapporto può essere descritto da un sistema di due equazioni differenziali alle derivate parziali, una che regge il flusso nel terreno insaturo (equazione di Richards, discussa nel paragrafo 2.1), e una che descrive la risposta idrologica del bacino superficiale (flusso di versante e di canale). La formulazione adottata assume che il moto di versante sia concentrato in canali (rills), che si formano per le irregolarità e la scabrezza del terreno e la cui geometria varia allargandosi e approfondendosi in concomitanza con eventi di precipitazione e in funzione della pendenza, delle caratteristiche idrauliche del moto superficiale, e della erodibilità del suolo, e possa essere descritto dalla stessa equazione di convezione-diffusione che regge il moto nei canali veri e propri, ma con diversi valori dei parametri idraulici. A tale scopo, a partire da un modello digitale del terreno (DEM, Digital Elevation Model) viene estratta una rete di drenaggio formata integralmente da maglie monodimensionali ove si conentra il moto di versante e di canale.

Il sistema di equazioni può essere scritto come

$$\begin{aligned} \sigma(\psi)\frac{\partial \psi}{\partial t} &= \nabla \cdot [K_s K_{rw}(\psi)(\nabla \psi + \eta_z)] \\ &\quad + q_s(h) \end{aligned} \tag{37}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + c_k \frac{\partial Q}{\partial s} = D_h \frac{\partial^2 Q}{\partial s^2} + c_k q_L(h, \psi) \tag{38}$$

dove la prima equazione è analoga all'eq. (1), e descrive il moto di filtrazione in condizioni di saturazione variabile, mentre la seconda equazione descrive la propagazione superficiale lungo ogni maglia di versante o di canale utilizzando un sistema di coordinate unidimensionale s definito sulla rete di drenaggio. In quest'equazione, Q è la portata lungo la maglia, c_k è la celerità cinematica, D_h è il coefficiente di dispersione idraulica, e q_L rappresenta il tasso di iniezione (positivo) o estrazione (negativo) dal terreno, cioè, il contributo sotterraneo al deflusso superficiale. Si noti che i termini di accoppiamento q_s in (37) e q_L in (38) sono entrambi funzioni della *ponding head* h, o altezza della lama d'acqua superficiale riferita alla quota del terreno, che può essere calcolata a partire dalla portata Q con un semplice bilancio di massa. Il primo termine rappresenta le condizioni al contorno che vanno imposte nell'equazione di Richards nel caso di "ponding", il secondo rappresenta il flusso (entrante o uscente) dal suolo verso la superficie. Il sistema di equazioni risulta quindi accoppiato e deve essere risolto simultaneamente per il vettore incognito (Q, ψ) o (h, ψ). Nonlinearità importanti sono presenti nei termini $S_w(\psi)$ e $K_{rw}(\psi)$, cioè le curve caratteristiche nell'equazione di Richards descritte dalle equazioni da (2) a (6), e nella dipendenza nonlineare di q_s da h, e di q_L da ψ.

3 Soluzione numerica

La soluzione dei modelli sopra descritti è complessa e deve necessariamente ricorrere a metodi numerici dato che solo in casi molto particolari e di scarso interesse applicativo esiste una soluzione analitica.

In questa nota dapprima verranno descritte le formulazioni numeriche per la soluzione delle equazioni alle derivate parziali che formano i diversi modelli matematici. Successivamente verranno discusse le tecniche di soluzione dei termini non lineari e di accoppiamento. 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; *Lecca* 2000].

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:

$$\begin{aligned} \psi \approx \hat{\psi} &= \sum_{j=1}^{N} \hat{\psi}_j(t) W_j(\mathbf{x}) \\ c \approx \hat{c} &= \sum_{j=1}^{N} \hat{c}_j(t) W_j(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{39}$$

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.

3.1 Equazione di flusso

Sostituendo le equazioni (39) nell'equazione (21) otteniamo il residuo:

$$L(\hat{\psi}, \hat{c}) = \nabla \cdot \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} K_r \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \right] - \sigma \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} - \phi S_w \epsilon \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_o} q = 0 \tag{40}$$

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

$$\int_\Omega L(\hat{\psi}, \hat{c}) W_i(\mathbf{x}) d\Omega = 0 \qquad i = 1, \ldots, N \tag{41}$$

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 (41) e applicando il lemma di Green alle derivate spaziali si ottiene per $i = 1, \ldots, N$:

$$\begin{aligned} &- \int_\Omega K_r \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \cdot \nabla W_i \right] d\Omega \\ &\quad + \int_\Gamma K_r \left[K_s \frac{1+\epsilon\hat{c}}{1+\epsilon'\hat{c}} \left(\nabla\hat{\psi} + (1+\epsilon\hat{c})\eta_z \right) \cdot \mathbf{n} \right] W_i d\Gamma \\ &\quad - \int_\Omega \sigma \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t} W_i d\Omega - \int_\Omega \phi S_w \epsilon \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} W_i d\Omega + \int_\Omega \frac{\rho}{\rho_o} q W_i d\Omega = 0 \end{aligned} \tag{42}$$

Sostituendo l'espressione di $(\hat{\psi}, \hat{c})$ data dalla (39), cambiando di segno, e imponendo le condizioni al contorno (9) si ottiene il seguente sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$H(\hat{\mathbf{\Psi}}, \hat{\mathbf{c}})\hat{\mathbf{\Psi}} + P(\hat{\mathbf{\Psi}}, \hat{\mathbf{c}}) \frac{d\hat{\mathbf{\Psi}}}{dt} + \mathbf{q}^*(\hat{\mathbf{\Psi}}, \hat{\mathbf{c}}) = \mathbf{0} \tag{43}$$

dove

$$h_{ij} = \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} K_r^e \frac{1+\epsilon\overline{c}}{1+\epsilon'\overline{c}} \left(K_s^e \nabla W_j^e \cdot \nabla W_i^e \right) dV$$

$$
\begin{aligned}
p_{ij} &= \sum_{e=1}^{E} \int_{V^e} \sigma^e W_j^e W_i^e dV \qquad (44)\\
q_i^* &= \sum_{e=1}^{E} \left[\int_{V^e} K_r^e K_{sz}^e \frac{(1+\epsilon\overline{c}^e)^2}{1+\epsilon'\overline{c}} \frac{\partial W_i^e}{\partial z} dV + \int_{V^e} \phi^e S_w^e \epsilon \frac{\partial \overline{c}^e}{\partial t} W_i^e dV \right.\\
&\left. - \int_{V^e} \frac{\rho^e}{\rho_o} q^e W_i^e dV - \int_{\Gamma_2^e} q_n^e W_i^e d\Gamma \right]
\end{aligned}
$$

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 (43) viene integrato nel tempo con uno schema alle differenze finite pesate:

$$
\left(\nu_f H^{k+\nu_f} + \frac{P^{k+\nu_f}}{\Delta t_k} \right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} = \left(\frac{P^{k+\nu_f}}{\Delta t_k} - (1-\nu_f) H^{k+\nu_f} \right) \hat{\mathbf{\Psi}}^k - \mathbf{q}^{*^{k+\nu_f}} \qquad (45)
$$

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

$$
\mathbf{v}_\ell^{k+1} = U_\ell \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1} \qquad \ell = x, y, z \qquad (46)
$$

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), 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 (44) e (46) si può trovare in *Gambolati et al.* [*1999*].

3.2 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 (42):

$$
\begin{aligned}
&- \int_\Omega (D\,\nabla \hat{c}) \cdot \nabla W_i d\Omega - \int_\Omega \nabla \cdot (\mathbf{v}\hat{c}) W_i d\Omega + \int_\Gamma (D\,\nabla \hat{c}) \cdot \mathbf{n} W_i d\Gamma \\
&- \int_\Omega \phi \frac{\partial S_w \hat{c}}{\partial t} W_i d\Omega + \int_\Omega (qc^* + f) W_i d\Omega = 0 \qquad i = 1, \ldots, N \qquad (47)
\end{aligned}
$$

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 e Gambolati* 1989].

Dopo aver sostituito la soluzione approssimata (39) nella (47), cambiato di segno e imposto le condizioni al contorno (16) e (17), si ottiene il sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$\left[A(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})+B(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})+C(\hat{\mathbf{\Psi}},\hat{\mathbf{c}})\right]\hat{\mathbf{c}}+\frac{d}{dt}\left[M(\hat{\mathbf{\Psi}})\hat{\mathbf{c}}\right]+\mathbf{r}^{*}=\mathbf{0} \tag{48}$$

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:

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \sum_{e=1}^{E}\int_{V^e}(D^e\nabla W_j^e)\cdot\nabla W_i^e dV\\
b_{ij} &= \sum_{e=1}^{E}\int_{V^e}\nabla\cdot\left(\tilde{\mathbf{v}}^e W_j^e\right)W_i^e dV\\
c_{ij} &= -\sum_{e=1}^{E}\int_{\Gamma_5^e}\tilde{\mathbf{v}}^e\cdot\mathbf{n}W_j^e W_i^e d\Gamma\\
m_{ij} &= \sum_{e=1}^{E}\int_{V^e}\phi^e S_w^e W_j^e W_i^e dV\\
r_i^* &= \sum_{e=1}^{E}\left[-\int_{V^e}(q^e c^*+f^e)W_i^e dV-\int_{\Gamma_4^e}q_d^e W_i^e d\Gamma-\int_{\Gamma_5^e}q_c^e W_i^e d\Gamma\right]
\end{aligned} \tag{49}$$

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.* [*Gambolati et al.* 1999]. Come per l'equazione di flusso (43), 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:

$$\left[\nu_c(A+B+C)^{k+\nu_c}+\frac{M^{k+1}}{\Delta t_k}\right]\hat{\mathbf{c}}^{k+1}=\left[\frac{M^k}{\Delta t_k}-(1-\nu_c)(A+B+C)^{k+\nu_c}\right]\hat{\mathbf{c}}^k-\mathbf{r^*}^{k+\nu_c} \tag{50}$$

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 vicino all'unità garantisce la stabilità al prezzo di una minore accuratezza e un aumento della diffusione numerica [*Peyret e 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* 1977b; *Putti et al.* 1990; *Cox e Nishikawa* 1991]. Altre tecniche alternative utilizzate principalmente per aumentare l'accuratezza nel calcolo delle velocità di Darcy considerano metodi agli elementi finiti misti [*Brezzi e Fortin* 1991; *Durlofsky* 1993; *Bergamaschi e Putti* 1999] o variazioni del metodo di Galerkin [*Putti e Cordes* 1998].

3.3 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 e 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.

3.4 Solutori iterativi per il problema di flusso a saturazione variabile

Per l'equazione di flusso (45) riscritta nella forma

$$\mathbf{g}\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1}\right) = H^{k+\nu_f}\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+\nu_f} + \frac{1}{\Delta t_k}P^{k+\nu_f}\left(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1} - \hat{\mathbf{\Psi}}^{k}\right) + {\mathbf{q}^*}^{k+\nu_f} = \mathbf{0} \tag{51}$$

il metodo di Newton risulta

$$J(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m})\mathbf{s}^m = -\mathbf{g}(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}) \tag{52}$$

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

$$J_{ij} = \nu_f H_{ij} + \frac{1}{\Delta t_k}P_{ij} + \sum_s \frac{\partial H_{is}}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}}\hat{\psi}_s^{k+\nu_f} + \frac{1}{\Delta t_k}\sum_s \frac{\partial P_{is}}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}}(\hat{\psi}_s^{k+1} - \hat{\psi}_s^{k}) + \frac{\partial q_i^*}{\partial \hat{\psi}_j^{k+1}} \tag{53}$$

L'equazione (52) rappresenta un sistema lineare non simmetrico che deve essere rissolto ad ogni iterazione di Newton.

Il metodo di Picard si ricava direttamente dall'equazione (45) 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

$$\begin{aligned}&\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k} P^{k+\nu_f,m}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} \\ &= \left(\frac{1}{\Delta t_k} P^{k+\nu_f,m} - (1-\nu_f) H^{k+\nu_f,m}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k} - {\mathbf{q}^*}^{k+\nu_f,m}\end{aligned} \tag{54}$$

Questo sistema lineare simmetrico può essere scritto in maniera alternativa come

$$\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k} \left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{1}{\Delta t_k}\right) P^{k+\nu_f,m}\right) \mathbf{s}^m = -\mathbf{g}(\hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m}, \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}) \tag{55}$$

Dal confronto delle equazioni (52) e (55) 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 e 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 e 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 e Schnabel* 1983; *Paniconi e Putti* 1996].

3.5 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 (46) 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

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

$$\left(\frac{1}{\Delta t_k} P^{k+\nu_f,m} - (1-\nu_f) H^{k+\nu_f,m}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^k - {\mathbf{q}^*}^{k+\nu_f,m} \tag{56}$$

$$\mathbf{v}_\ell^{k+1,m} = U_\ell^{k+1,m} \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1,m} \qquad \ell = x, y, z \tag{57}$$

$$\begin{aligned} &\left[\nu_c (A+B+C)^{k+\nu_c,m} + \frac{1}{\Delta t_k} M^{k+1,m}\right] \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1} = \\ &\left[\frac{1}{\Delta t_k} M^k - (1-\nu_c)(A+B+C)^{k+\nu_c,m}\right] \hat{\mathbf{c}}^k - {\mathbf{r}^*}^{k+\nu_c} \end{aligned} \tag{58}$$

Si noti che l'equazione (56) rappresenta lo schema di Picard (54), e può essere sostituito con un altro metodo di linearizzazione dell'equazione di flusso insaturo, come per esempio il metodo di Newton (52). Inoltre, nell'equazione (57) compare il termine $\mathbf{v}_\ell^{k+1,m}$ al posto di $\mathbf{v}_\ell^{k+1,m+1}$ perchè 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 $m+1$ perchè 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 (56) e quello derivante dall'equazione di trasporto (58).

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 e Paniconi* 1995]. Questo metodo, nello spirito di metodi simili utilizzati nelle simulazioni di giacimenti [*Aziz e 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 (56)–(58) 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

$$\begin{aligned} &\left(\nu_f H^{k+\nu_f,m} + \frac{P^{k+\nu_f,m}}{\Delta t_k}\right) \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} \\ &= -\left[(1-\nu_f) H^{k+\nu_f,m} - \frac{P^{k+\nu_f,m}}{\Delta t_k}\right] \hat{\mathbf{\Psi}}^k - {\mathbf{q}^*}^{k+\nu_f,m} \end{aligned} \tag{59}$$

$$\begin{aligned} &\left[\nu_c (A+B+C)^{k+\nu_c,m+1} + \frac{M^{k+1,m+1}}{\Delta t_k}\right] \hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1} \\ &= -\left[(1-\nu_c)(A+B+C)^{k+\nu_c,m+1} - \frac{M^k}{\Delta t_k}\right] \hat{\mathbf{c}}^k - {\mathbf{r}^*}^{k+\nu_c} \end{aligned} \tag{60}$$

dove

$$\mathbf{v}_\ell^{k+1,m+1} = U_\ell \hat{\mathbf{\Psi}}^{k+1,m+1} + \mathbf{g}_\ell^{k+1,m+1} \tag{61}$$

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:

$$J\left(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{k+1},\hat{\mathbf{c}}^{k+1}\right)=\nu_c\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c}+\left[\frac{\partial}{\partial\hat{\mathbf{c}}^{k+1}}\left(A+B+C\right)^{k+\nu_c}\right]\hat{\mathbf{c}}^{k+\nu_c}+\frac{1}{\Delta t_k}M^{k+1} \quad (62)$$

L'espressione dei diversi elementi di J in (62) nel caso di flusso saturo è riportata in *Putti e Paniconi* [*Putti e Paniconi* 1995]. Il sistema di Newton così risultante è

$$J\left(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{k+1,m},\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}\right)\Delta\hat{\mathbf{c}}=-\mathbf{f}_2\left(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{k+1,m},\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m}\right) \quad (63)$$

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

2. risolvere l'equazione di Newton (63) ottenendo il nuovo valore del vettore concentrazione $\hat{\mathbf{c}}^{k+1,m+1}$.

Dal confronto dell'equazione (62) con il termine a sinistra del simbolo di uguaglianza di (58) 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.

3.6 Soluzione del modello accoppiato di flusso sotterraneo-superficiale

Il sistema accoppiato (37)–(38) è risolto discretizzando separatamente le due equazioni nei moduli FLOW3D [*Paniconi e Wood* 1993; *Paniconi e Putti* 1994] e SURF_ROUTE [*Orlandini e Rosso* 1996], descritti di seguito.

Il modulo FLOW3D. Il modulo FLOW3D, descritto dal punto di vista strettamente numerico nel paragrafo 3.1, ha la possibilità di definire condizioni al contorno variabili sia nello spazio che nel tempo, ed è in grado di simulare le forzanti atmosferiche (alternanza di flussi di precipitazione ed evaporazione) in superficie. Il trattamento delle condizioni al contorno atmosferiche assume importanza determinante in questo modello e può essere descritto come segue. I valori di input, dati in termini di intensità di precipitazione (flusso positivo) o evaporazione (flusso negativo), sono considerati come “potenziali”, essendo i valori effettivi (o flussi efficaci) dipendenti dai valori della pressione nel terreno e calcolati dinamicamente dal codice nel corso della simulazione. Il flusso superficiale, definito come il volume di acqua per unità di tempo e di superficie che non riesce ad infiltrare o che esfiltra dal terreno, viene calcolato ad ogni passo temporale dal bilancio dei flussi totali potenziali ed efficaci, e trasferito per la propagazione al modulo SURF_ROUTE.

Il modulo SURF_ROUTE. SURF_ROUTE si compone di moduli di simulazione sperarati per ciascuno dei processi che influenzano la risposta idrologica di un bacino e che non sono considerati in FLOW3D: il moto di versante e di canale e i fenomeni di invaso e laminazione che si hanno in presenza di depressioni topografiche.

MOTO DI VERSANTE E DI CANALE. Per minimizzare lo sforzo computazionale e il numero di parametri del modello, i canali di versante sono concentrati in un unico canale concettuale per ciascuna cella del DEM, in maniera da formare, assieme alle celle di canale vere e proprie, una rete di drenaggio che copre tutto il bacino. Ogni canale elementare è caratterizzato da una pendenza e una lunghezza che dipendono dalla sua localizzazione all'interno della rete di drenaggio e ha geometria rettangolare con larghezza che varia dinamicamente con la portata seguendo le leggi di scala “at-a-station” e “downstream” inizialmente introdotte da Leopold e Maddock [*1953*]. La distinzione tra versante e canale viene fatta sulla base del concetto di “constant critical support area” descritto da Montgomery e Foufoula-Georgiu [*1993*], per il quale il moto è di versante in tutte quelle celle per cui l'area drenata A non supera il valore soglia A^*, e viceversa.

Uno schema numerico alla Muskingum-Cunge a parametri variabili è adottato per la risoluzione dell'equazione di laminazione in ciascuna maglia della rete di drenaggio, impiegando una distribuzione del coefficiente di Gauckler-Strickler variabile a seconda che si tratti di maglia in cella di versante o in cella di canale [*Orlandini e Rosso* 1998]. Il modello è implementato a partire dalle celle di monte (caratterizzate dalle elevazioni massime) fino alla cella di sbocco, seguendo la rete di drenaggio già determinata. Per ciascuna cella vi sarà un flusso entrante da monte e un flusso uscente verso valle, e un termine di sorgente q_L dato da:

$$q_L = q \Delta x \Delta y / \Delta s$$

dove q è il contributo locale al runoff superficiale calcolato da FLOW3D, Δx e Δy sono le dimensioni della cella, e Δs è la lunghezza del canale all'interno della cella stessa. L'idrogramma entrante e i flussi q_L sono laminati in ogni singola cella risolvendo l'equazione di convezione-diffusione (38), che, discretizzata alla Muskingun-Cunge, diventa:

$$Q_{i+1}^{k+1} = C_1 Q_i^{k+1} + C_2 Q_i^k + C_3 Q_{i+1}^k + C_4 q_{L_{i+1}}^k \qquad (64)$$

essendo Q_{i+1}^{k+1} la portata in corrispondenza al nodo di coordinata $s = (i+1)\Delta s$ ed al tempo $(k+1)\Delta t$ e $q_{L_{i+1}}^k$ il termine di sorgente nello stesso nodo ma al tempo $k\Delta t$. I coefficienti C_i dipendono dalla celerità di propagazione c_k e dalla discretizzazione numerica. Note le portate in entrata e in uscita dalla cella, l'altezza d'acqua (ponding head) h viene calcolata per mezzo di un semplice bilancio di massa.

DEPRESSIONI TOPOGRAFICHE. Depressioni topografiche (o "pits") presenti nel DEM possono essere attribuite alla presenza di laghi o stagni, oppure possono essere interpretate come dato erroneo o mancante. L'evenienza di tali depressioni preclude l'utilizzo di procedure automatice di estrazione della rete di drenaggio, talchè tecniche di "depitting" sono generalmente usate per la regolarizza del DEM, variandone artificialmente le elevazioni delle celle depresse. Quando le depressioni nel terreno intervengono attivamente nella formazione dei deflussi superficiale e sotterraneo, tipicamente in zone a pendenza relativamente bassa, le procedure di depitting possono introdurre errori non trascurabili nelle direzioni di deflusso e non consentire quindi una corretta riproduzione dei fenomeni di invaso e laminazione di laghi o stagni. Per incorporare nel modello questi effetti si procede come segue. Dopo aver identificato nel DEM la posizione delle depressioni una procedura di "lake boundary-following" [*Mackay e Band* 1989] definisce e caratterizza la depressione nella rete di drenaggio: alle celle di contorno del pit (chiamate celle "buffer") viene assegnato il ruolo di celle drenanti per tutte le celle afferenti alla depressione. Questo viene fatto imponendo a ciascuna cella buffer una direzione di deflusso che forma una circuitazione attorno alla depressione e che drena tutta l'acqua in una singola cella chiamata "cella serbatoio". Le celle che si trovano all'interno del buffer vengono escluse dalla rete di drenaggio e si può procedere così alla estrazione della rete correggendo le elevazioni delle celle depresse rimanenti che ora sono considerate come dati errati. Gli effetti di invaso e laminazione della depressione sono considerati nel modello di deflusso superficiale assumendo che le celle buffer trasferiscano istantanemante i flussi raccolti nella cella serbatoio, ove vengono concentrate tutte le caratteristiche geometriche e idrauliche della depressione stessa. Il flusso uscente da tale cella viene calcolato risolvendo l'equazione di continuità dei serbatoi:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = I(t) - O(h^*) \tag{65}$$

dove V è il volume di invaso del serbatoio e i termini I e O ne descrivono l'input a l'output e sono funzioni del tempo e dell'altezza d'acqua h^* rispetto a all'elevazione della cella. Il tirante d'acqua così determinato viene poi assegnato a tutte le celle della depressione, e utilizzato come condizione al contorno per FLOW3D, mentre il flusso uscente dalla cella serbatoio contribuisce al deflusso superficiale nel modulo SURF_ROUTE.

L'algoritmo di accoppiamento. Il fatto che lo schema di Muskingum-Cunge sia esplicito nel tempo permette di costruire il seguente algoritmo non iterativo per la soluzione del sistema accoppiato (37)–(38) [*Bixio et al.* 1999]:

per $t_k = 0$ fino a t_{max} con passo Δt:

- risolvere (38) usando q_L^k come input per SURF_ROUTE ottenendo Q^{k+1}; da questa si ottiene la distribuzione di "ponding head" h^{k+1};
- usare h^{k+1}, assieme ai dati atmosferici di input al tempo t^{k+1} per imporre le condizioni iniziali ed al contorno per FLOW3D e risolvere (37) per ψ^{k+1}
- calcolare (di nuovo con FLOW3D) il flusso superficiale q_L^{k+1} utilizzando ψ^{k+1} e il bilancio di massa considerando gli input atmosferici e i flussi efficaci.

La condizione iniziale necessaria per l'innesco dell'algoritmo è data in termini di distribuzione spaziale di q_L per l'equazione (38). In mancanza di dati sufficienti, una distribuzione iniziale di tentativo dei flussi superficiali può essere calcolata da FLOW3D a partire dalle condizioni di pressione dell'acquifero e dai dati di input atmosferico.

L'accoppiamento tra i due moduli è tale per cui ad ogni passo temporale si ha scambio di informazioni tra i due codici nel modo seguente: il modulo FLOW3D calcola e passa a SURF_ROUTE il contributo al deflusso superficiale dato cella per cella dal flusso sotterraneo, mentre SURF_ROUTE calcola e passa a FLOW3D i valori nodali del tirante d'acqua propagato superficialmente. Questa interazione è intimamente collegata all'algoritmo di FLOW3D che implementa e controlla le condizioni superficiali del terreno e eventualmente commuta da condizioni al contorno di Dirichlet (processo controllato dallo stato del suolo) a condizioni al contorno di Neumann (processo controllato dagli input atmosferici). Questo algoritmo determina, seguendo la dinamica fisica del processo di infiltrazione e esfiltrazione in funzione dei flussi potenziali ed efficaci, se alla fine del passo temporale un nodo (o una cella) superficiale è saturo, insaturo o "ponded", nel qual caso il volume d'acqua presente in superficie concorre alla formazione di deflusso superficiale.

La distinzione fisica tra nodo superficiale "saturo" o "ponded", avviene a seconda della presenza o meno di una lama d'acqua giacente in superficie. Questa distinzione viene fatta attraverso il parametro di input chiamato "pond_head_min" che identifica il valore soglia al di sopra del quale il nodo è considerato "ponded". Il valore di "pond_head_min" è assegnato in considerazione della quantità di acqua che rimane intrappolata nelle microtopografie del terreno e non partecipa al deflusso superficiale.

4 Riferimenti Bibliografici

Abbott, M., J. Bathurst, J. Cunge e P. O'Connel, An introduction to the European Hydrological System — Système Hydrologique Européen, "SHE", 1: History and philosophy of a physically-based, distributed modelling system, *J. Hydrol.* 87, 45–59, 1986.

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

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

Bear, J., A. H.-D. Cheng, S. Sorek, D. Ouazar e I. Herrera (eds.), *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers — Concepts, Methods, and Practices.* Dordrecht, The Netherlands, 1999. Kluwer Academic.

Bergamaschi, L. e M. Putti, Mixed finite elements and Newton-like linearization for the solution of Richard's equation, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 45(8), 1025–1046, 1999.

Bixio, A. C., S. Orlandini, C. Paniconi e M. Putti, Coupled surface runoff and subsurface flow model for catchment simulations. In: Feyen, J. e K. Wiyo (eds.) *Modelling of Transport Processes in Soils at Various Scales in Time and Space: International Workshop of EurAgEng's Field of Interest on Soil and Water.* Wageningen Pers, The Netherlands, pp 583–591, 1999.

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

Chen, Y. M., L. M. Abriola, P. J. J. Alvarez, P. J. Anid e T. M. Vogel, Modeling transport and biodegradation of benzene and toluene in sandy aquifer material: Comparisons with experimental measurements, *Water Resources Research* 28(7), 1833–1847, 1992.

Collins, M. A. e 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. e 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. e R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1983.

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

Dronfield, D. G. e S. E. Silliman, Velocity dependence of dispersion for transport through a single fracture of variable roughness, *Water Resour. Res.* 29(6), 3477–3483, 1993.

Durlofsky, L. J., A triangle based mixed finite element-finite volume technique for modeling two phase flow through porous media, *J. Comp. 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.

Essaid, H. I., B. A. Bekins, E. M. Godsy, E. Warren, M. J. Baedecker e I. M. Cozzarelli, Simulation of aerobic and anaerobic biodegradation processes at a crude oil spill site, *Water Resour. Res.* 31(12), 3309–3327, 1995.

Freeze, R. A. e J. A. Cherry, *Groundwater.* Prentice-Hall, New Jersey, 1979.

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

Galeati, G. e 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.

Gallo, C., C. Paniconi e G. Gambolati, Comparison of solution approaches for the two-domain model of nonequilibrium transport in porous media, *Adv. Water Resources* 19(4), 241–253, 1996.

Gambolati, G., C. Paniconi e M. Putti, Numerical modeling of contaminant transport in groundwater. In: Petruzzelli, D. e 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 e 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 e C. Paniconi, Three-dimensional model of coupled density-dependent flow and miscible salt transport. In: Bear, J., A. H.-D. Cheng, S. Sorek, D. Ouazar e I. Herrera (eds.) *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers — Concepts, Methods and Practices* 315–362, Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1999.

Hamm, S. e P. Bidaux, Dual-porosity fractal models for transient flow analysis in fissured rocks, *Water Resour. Res.* 32(9), 2733–2745, 1996.

Henry, H. R., Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. In: Cooper Jr., H. H., F. A. Kohout, H. R. Henry e R. E. Glover (eds.) *Sea Water in Coastal Aquifers.* U. S. Geol. Surv. Water Supply paper, 1613-C, pp C70–C84, 1964.

Hill, M. C., A comparison of coupled freshwater sharp interface and convective dispersive models of saltwater intrusion in a layered aquifer system. In: Celia, M. A., L. Ferrand, C. A. Brebbia, W. G. Gray e G. F. Pinder (eds.) *Proceedings VII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Vol. 1, Modelling Surface and Subsurface Flow.* CMP Elsevier, Amsterdam, Holland, pp 211–216, 1988.

Huyakorn, P. S. e G. F. Pinder, *Computational Methods in Subsurface Flow.* Academic Press, London, 1983.

Huyakorn, P. S., S. D. Thomas e 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 e 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 e 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.

Kindred, J. e M. Celia, Contaminant transport and biodegradation: 2. conceptual model and test simulations, *Water Resour. Res.* 25(6), 1149–1159, 1989.

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

Korom, S. F., Natural denitrification in the saturated zone: A review, *Water Resour. Res.* 28(6), 1657–1668, 1992.

Lecca, G., Implementation and testing of CODESA-3D code for density-dependent flow and transport in porous media. Technical Report (in preparation), CRS4, Italy, 2000.

Leopold, L. B. e T. Maddock Jr., The hydraulic geometry of stream channels and some physiographic implications. Prof. Pap. 252, U.S. Geol. Surv., Washington, DC, 1953.

Mackay, D. S. e L. E. Band, Extraction and representation of nested catchment areas from digital elevation models in lake-dominated topography, *Water Resour. Res.* 34(8), 897–901, 1989.

Malone, D. R., C. Kao e R. C. Borden, Dissolution and biorestoration of nonaqueous phase hydrocarbons: Model development and laboratory evaluation, *Water Resour. Res.* 29(7), 2203–2213, 1993.

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

Molz, F. J., M. A. Widdowson e L. D. Benefield, Simulation of microbial growth dynamics coupled to nutrient and oxygen transport in porous media, *Water Resour. Res.* 22(8), 1207–1216, 1986.

Montgomery, D. R. e E. Foufoula-Georgiou, Channel network source representation using digital elevation models, *Water Resour. Res.* 29(12), 3925–3934, 1993.

Murphy, J. R. e N. R. Thomson, Two-phase flow in a variable aperture fracture, *Water Resour. Res.* 29(10), 3453–3476, 1993.

National Research Council, *In Situ Bioremediation: When Does It Work?* National Academy Press, Washington, D.C., 1993.

Nicol, J. P., W. R. Wise, F. J. Molz e L. D. Benefield, Modeling biodegradation of residual petroleum in a saturated porous column, *Water Resour. Res.* 30(12), 3313–3325, 1994.

Nordqvist, A. W., Y. W. Tsang, C. F. Tsang, B. Dverstorp e J. Andersson, A variable aperture fracture network model for flow and transport in fractured rocks, *Water Resour. Res.* 28(6), 1703–1713, 1992.

Orlandini, S. e R. Rosso, Diffusion wave modeling of distributed catchment dynamics, *J. Hydraul. Engrg. ASCE* 1(3), 103–113, 1996.

Orlandini, S. e R. Rosso, Parametrization of stream channel geometry in the distributed modeling of catchment dynamics, *Water Resour. Res.* 34(8), 1971–1985, 1998.

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

Paniconi, C. e E. F. Wood, A detailed model for simulation of catchment scale subsurface hydrologic processes, *Water Resour. Res.* 29(6), 1601–1620, 1993.

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

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

Parkhurst, D., User's guide to phreeqc–a computer program for speciation, reaction-path, advective-transport, and inverse geochemical calculations. Technical Report, U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations, Report 95-4227, 143 p.586 p., 1995.

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

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

Postma, D., C. Boesen, H. Kristiansen e F. Larsen, Nitrate reduction in an unconfined sandy aquifer: Water chemistry, reduction processes, and geochemical modeling, *Water Resour. Res.* 27(8), 2027–2045, 1991.

Prommer, H., *Modelling reactive multicomponent transport in contaminated aquifers.* PhD thesis, University of Western Australia, 1999. Department of Environmental Engineering.

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

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

Schmelling, S. G. e R. R. Ross, Contaminant tranasport in fractured media: models for decision makers. Technical Report EPA/540/4-89/004, US EPA, 1989.

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

Ségol, G., G. F. Pinder e 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. e V. P. Singh, Saltwater intrusion. In: Singh, V. (ed.) *Hydrology of Disasters* chapter 10, 269–316, Kluwer Academic, Dordrecht, Holland, 1996.

Sims, J. L., J. M. Suflita e H. H. Russel, *In Situ* bioremediation of contaminated groundwater. Technical Report EPA/540/S-92/003, US EPA, Technology Innovation Office, Office of Solid Waste and Emergency Response, US EPA, Washington, DC, 1992.

Sudicky, E. A. e R. G. McLaren, The Laplace transorm Galerkin technique for large-scale simulation of mass transport in discretely fractured porous formations, *Water Resour. Res.* 28(2), 499–514, 1992.

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

Taylor, S. W. e P. R. Jaffè, Substrate and biomass transport in a porous medium, *Water Resour. Res.* 26(9), 2181–2194, 1990d.

van Genuchten, M. T. e 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, 276–299, 1977b.

Voss, C. I. e 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.

Widdowson, M. A., F. J. Molz e L. D. Benefield, A numerical transport model for oxygen- and nitrate-based respiration linked to substrate and nutrient availability in porous media, *Water Resour. Res.* 24(9), 1553–1565, 1988.

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

Wood, B. D., T. R. Ginn e C. N. Dawson, Effects of microbial metabolic lag in contaminant transport and biodegradation modeling in a layered porous media system, *Water Resour. Res.* 31(3), 553–563, 1995.

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