

POLITECNICO DI MILANO

Scuola di Ingegneria Civile, Ambientale e Territoriale

Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria Civile, Ind. Idraulica



**STUDIO DEI PROCESSI DI FLUSSO E
TRASPORTO A DENSITA' VARIABILE NEL
MEZZO POROSO: INTRUSIONE SALINA IN
ACQUIFERI COSTIERI.**

Relatore: Prof. Alberto Guadagnini

Correlatore: Prof. Monica Riva

Tesi di laurea di:

Aronne Dell'Oca

Matricola 783783

Anno accademico 2012/2013

RINGRAZIAMENTI

Alla mia famiglia per il sostegno morale, economico e spirituale offerto in questi anni.

Alla Professoressa Monica Riva per l'opportunità offerta e il sostegno indispensabile nel realizzarla.

Al Professor Alberto Guadagnini per gli indispensabili suggerimenti.

All'aula tesisti per i momenti passati insieme, in particolare ad Ivo, Cecilia, Maria Vittoria ed Elisa.

All'Ing. Porta per il prezioso sostegno.

All'Ing. Lorenzo Tamellini, il cui lavoro è stato fondamentale per la riuscita del mio.

Ad Amir per la condivisione di gioie e pene.

A Dalila per la tastiera.

A Raul per la lavagnetta.

A Giulia per la pazienza dimostrata.

Ai messaggi d'errore di Matlab.

INDICE DEI CONTENUTI

ABSTRACT	12
INTRODUZIONE	15
1 INTRUSIONE SALINA	21
1.1 EQUAZIONI GOVERNANTI IL FENOMENO DI SWI.....	28
1.2 EQUAZIONE DI DARCY.....	29
1.3 EQUAZIONE COSTITUTIVA DEL FLUIDO.....	34
1.4 EQUAZIONE DI CONTINUITÀ.....	35
1.5 EQUAZIONE DEL TRASPORTO ADVETTIVO DIFFUSIVO DISPERSIVO NEL MEZZO POROSO.....	37
1.6 IL PROBLEMA DI HENRY.....	40
1.7 PROBLEMA DI HENRY ANISOTROPO E DISPERSIVO.....	48
2 DEFINIZIONE DEL PROBLEMA	53
2.1 CONFIGURAZIONE DEL PROBLEMA.....	54
2.1.1 IMPLEMENTAZIONE IN SUTRA.....	56
2.2 VARIABILI DI STATO GLOBALI D'INTERESSE.....	59
2.3 LA SCELTA DEI PARAMETRI.....	63
3 ANALISI DI SENSITIVITA'	69
3.1 INDICI DI SOBOL.....	72
3.2 ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE.....	75
3.2.1 ESEMPIO DI ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE.....	80
3.2.2 ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE GENERALIZZATA.....	83
3.2.3 INDICI DI SENSITIVITA'.....	84
3.2.4 COEFFICIENTE DI CORRELAZIONE DI PEARSON.....	86
3.3 SPARSE GRID.....	87

3.3.1	<i>ESEMPIO DI COSTRUZIONE SPARSE GRID E CONVERSIONE MODALE.....</i>	<i>95</i>
4	RISULTATI	99
4.1	INDICI DI SOBOL.....	100
4.2	DISTRIBUZIONI DI PROBABILITA'	113
4.2.1	<i>DISTRIBUZIONI DI PROBABILITA MARGINALI.....</i>	<i>114</i>
4.2.2	<i>DISTRIBUZIONI DI PROBABILITA CONGIUNTE E CONDIZIONATE.....</i>	<i>124</i>
5	MODELLAZIONE INVERSA.....	138
5.1	INTRODUZIONE AI PROBLEMI DI STIMA DEI PARAMETRI....	139
5.2	PROCEDURA DI MODELLAZIONE INVERSA	142
5.3	RISULTATI MODELLAZIONE INVERSA.....	149
6	CONCLUSIONI.....	156
	Appendice A DETTAGLI IMPLEMENTAZIONE IN SUTRA.....	162
	BIBLIOGRAFIA.....	170

INDICE DELLE FIGURE

Figura 1.1 Schematizzazione del processo d'intrusione salina in acquiferi costieri.....	22
Figura 1.2 . Schematizzazione modello Ghyben-Herzberg.....	24
Figura 1.3. Nomenclatura per il processo di media sul REV (Bear,2010).....	30
Figura 1.4. Schema del processo di flusso nel mezzo poroso (Bear,2010).....	33
Figura 1.5 Rappresentazione alla scala microscopica dei processi che generano la dispersione meccanica.....	37
Figura 1.6. Schematizzazione del problema di Henry [Abarca 2005].....	40
Figura 1.7. Dominio e rispettive condizioni al contorno per il problema di Henry in termini adimensionali (Gotovac,2003).....	43
Figura 1.8. Soluzione per la stream-function adimensionale ψ' per il problema di Henry (Gotovac,2003).....	45
Figura 1.9. Soluzione per la concentrazione adimensionale c' per il problema di Henry (Gotovac, 2003).....	45
Figura 1.10. Confronto per la distribuzione delle concentrazioni relative per il problema accoppiato e disaccoppiato (Simpson,2004). Per il problema disaccoppiato è riportata la sola linea ad iso-concentrazione al 50%.....	47
Figura 1.11. Schematizzazione del problema di Henry anisotropo-dispersivo.....	49
Figura 1.12. Distribuzione delle Iso-concnetrazioni e campo di velocità per il problema di Henry anisotropo-dispersivo (Abarca,2005).....	51
Figura 2.1. Schematizzazione del dominio e delle condizioni al contorno.....	55
Figura 2.2 Descrizione schematica delle grandezze L_D e $wmz(x)$	60
Figura 2.3. Descrizione schematica delle grandezze L_S ed L_y	61
Figura 2.4. Rappresentazione schematica della grandezza AC	61
Figura 2.5. Valori caratteristici della permeabilità.....	67
Figura 3.1. Schematizzazione dei vari passaggi coinvolti nella propagazione dell'incertezza usando metodi spettrali [Le Maitre,2010].....	76
Figura 3.2. Polinomi di Hermite uni variati per $n=0,1,..,4$	80
Figura 3.3. Caos Polinomiale di ordine $p=0,1,2$ utilizzando polinomi di Hermite multidimensionali (La Maitre,2010).....	82
Figura 3.4. Esempio di griglie di campionamento per la risoluzione di un integrale bidimensionale (Bungartz,2004).....	89

Figura 3.5. Griglie tensoriali bidimensionali associate alla <i>sparse grid</i> di livello $l_{SG} = 2$. Nodi interpolanti di Gauss-Legendre.....	96
Figura 3.6. Sparse grid di livello $l_{SG} = 2$. Nodi interpolanti di Gauss-Legendre.	97
Figura 4.1. Indici di Sobol per le <i>variabili di stato globali</i> . Livello della griglia <i>sparse grid</i> $l_{SG} = 2$	100
Figura 4.2. Indici di Sobol per le <i>variabili di stato globali</i> . Livello della griglia <i>sparse grid</i> $l_{SG} = 3$	101
Figura 4.3. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per la <i>variabile di stato globale</i> larghezza media della zona di transizione <i>WD</i>	102
Figura 4.4. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per L_T	103
Figura 4.5. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per la variabile di stato globale posizione L_y	103
Figura 4.6. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per la <i>variabile di stato globale</i> L_S	104
Figura 4.7. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per la <i>variabile di stato globale</i> <i>AC</i>	104
Figura 4.8. Soluzione del problema di Henry dispersivo-anisotropo in termini di iso-concentrazioni relative e campo di velocità [Abarca 2005]. I parametri utilizzati sono riportati in Tabella 1.4.....	106
Figura 4.9. Effetti della variazione della dispersività trasversale α_T	108
Figura 4.10. Effetti della variazione della dispersività longitudinale α_L	109
Figura 4.11. Effetti della variazione della permeabilità idraulica k_x	110
Figura 4.12. . Effetti della variazione del rapporto d'anisotropia delle permeabilità r_k	111
Figura 4.13. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per <i>WD</i>	114
Figura 4.14. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per L_T	116
Figura 4.15. Funzione di distribuzione di probabilità e funzione di distribuzione di probabilità cumulata per L_y	118
Figura 4.16. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per L_S	120

Figura 4.17. Funzione di distribuzione di probabilità e funzione di distribuzione di probabilità cumulata per AC	122
Figura 4.18. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali L_T e WD	125
Figura 4.19. Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali L_T e WD	126
Figura 4.20. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali WD e L_S	127
Figura 4.21. Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali WD e L_S	127
Figura 4.22. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali L_T e L_Y	128
Figura 4.23. Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di <i>variabili di stato</i> globali L_T e L_Y	129
Figura 4.24. Rappresentazione delle realizzazioni condizionate ad L_T	131
Figura 4.25. Confronto funzione di distribuzione di probabilità di L_Y condizionata su L_T ed funzione di distribuzione di probabilità marginale di L_Y	132
Figura 4.26. Confronto tra la funzione di distribuzione di probabilità di WD condizionata su L_T e la moda di $L_Y L_T$ e la distribuzione di probabilità marginale di WD ..	133
Figura 4.27. confronto tra funzione di distribuzione di probabilità di L_S condizionata su L_T e la moda di $L_Y L_T$ e la media di $WD (L_T, \text{mod } a(L_Y L_T))$ e tra la funzione di distribuzione di probabilità marginale di L_S	134
Figura 4.28. Errori relativi percentuali della stima delle variabili di stato globali mediante l'uso delle pdf condizionate.	136
Figura 5.1. Stima dei parametri per il caso 1, croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri.	150
Figura 5.2. Stima dei parametri per il caso 2, instabile. Non si riportano gli intervalli di confidenza per motivi di scala.	151
Figura 5.3. Stima dei parametri , croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri.....	153

Figura 5.4. Stima dei parametri , croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri.....	154
Figura 6.1.confronto della distribuzione delle linee ad iso-concentrazione relativa per le differenti griglie analizzate.....	165
Figura 6.2. Rappresentazione schematica per la condizione al contorno di pressione specificata (Voss & Souza,2008).....	166
Figura 6.3. Linee ad iso-errore relativo per la concentrazione confrontando la simulazione ad conduttanza 5000m ² /s e 10000m ² /s.....	168
Figura 6.4. Errori relativi al variare della conduttanza	169

INDICE DELLE TABELLE

Tabella 1.1. Valori dei parametri dimensionali adottati da Henry.....	44
Tabella 1.2 Parametri adimensionali per il problema di Henry	44
Tabella 1.3. Condizioni al contorno per il problema di Henry anisotropo-dispersivo	49
Tabella 1.4. Valori dei parametri per il problema di Henry anisotropo-dispersivo	50
Tabella 2.1. Condizioni al contorno scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività.....	55
Tabella 2.2. Condizioni iniziali scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività	55
Tabella 2.3. Geometria del dominio scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività.....	55
Tabella 2.4. Discretizzazione numerica spaziale e temporale	58
Tabella 2.5. Parametri a valore fissato nell'analisi di sensitività globale	65
Tabella 2.6. Condizioni al contorno scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività.....	65
Tabella 2.7. Condizioni iniziali scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività.....	66
Tabella 2.8. Geometria del dominio scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività	66
Tabella 2.9. Intervalli di variazione per i parametri incerti utilizzati nell'analisi di sensitività globale, mancano le unità di misura	68
Tabella 3.1. Relazione tra la distribuzione della variabile random e la famiglia di polinomi ortogonali [Xiu 2003]	83
Tabella 3.2. Rappresentazione dei monomi impiegati nella sparse grid e nel prodotto tensoriale completo per il caso bidimensionale, $d = 2$ e grado massimo $p = 3$	93
Tabella 4.1. Confronto della Media, s.q.m. e coefficiente di variazione per le variabili di stato globali calcolati con PCE di grado massimo due e tre.....	105
Tabella 4.2. Parametri della distribuzione Normale relativa a WD stimati mediante ML.....	115
Tabella 4.3. Parametri della distribuzione Gamma relativa a L_T stimati mediante ML.....	117
Tabella 4.4. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a L_Y stimati mediante ML.	119
Tabella 4.5. Parametri della distribuzione Normale relativa a L_S stimati mediante ML.....	121
Tabella 4.6. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a AC stimati mediante ML.....	123
Tabella 4.7. Coefficienti di correlazione di Pearson per le <i>variabili di stato globali</i> ottenuti mediante i coefficienti delle PCE(blù) e mediante simulazioni in SUTRA(verde).	124

Tabella 4.8. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a L_Y condizionato su L_T stimati mediante ML.....	132
Tabella 4.9. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a WD condizionata su L_T e la moda di $L_Y L_T$	133
Tabella 4.10. Confronto tra i valori della variabili di stato globali calcolate con SUTRA e ricavate mediante le pdf condizionate.....	135
Tabella 5.1. Valori delle misure fornite da modello Y e s.q.m. degli errori di misura per le variabili di stato globali.....	149
Tabella 5.2. Valori del dato iniziale.....	150
Tabella 5.3. Valori delle misure fornite da modello Y e s.q.m. degli errori di misura per le variabili di stato globali.....	152
Tabella 5.4. Valori del dato iniziale.....	152
Tabella 6.1. Valori di discretizzazione per le griglie analizzate.	162
Tabella 6.2. Valori dei parametri utilizzati nella scelta della discretizzazione spaziale.....	164
Tabella 6.3. Valori della conduttanza utilizzati per la scelta del valore di riferimento.....	169

ABSTRACT

PAROLE CHIAVE: Intrusione salina, Permeabilità idraulica, Coefficienti di Dispersione, Analisi di Sensitività Globale, *Polynomial Chaos Expansion*, Indici di Sobol, Distribuzioni di Probabilità Congiunte e Condizionate, Modellazione Inversa.

Nel presente lavoro di tesi si considera l'effetto dei parametri caratteristici degli acquiferi, quali conducibilità idraulica orizzontale, rapporto d'anisotropia delle permeabilità, coefficienti di dispersione longitudinale e trasversale, sul fenomeno dell'intrusione salina (SWI) in acquiferi costieri. Tali parametri esibiscono una variabilità naturale e sono spesso affetti da incertezza. Lo studio del processo di SWI è stato analizzato con riferimento a delle *variabili di stato globali* definite per il sistema in analisi. Come caso di riferimento si è adottato il problema di Henry (1964) nella forma anisotropa-dispersiva proposta da Abarca (2006). Lo studio dell'effetto dei parametri scelti nel processo di SWI è stato condotto mediante un'analisi di sensitività globale (GSA) basata sugli indici di Sobol (IS). Tali indici hanno permesso di definire il contributo dei parametri incerti alla varianza totale delle singole *variabili di stato globali* definite. La determinazione degli indici di Sobol si è basata su una decomposizione di tipo *Polynomial Chaos Expansion* (PCE) ricavata sfruttando il metodo di collocazione *sparse grid*. I codici utilizzati sono stati precedentemente elaborati nell'ambito di un progetto di ricerca svolto in collaborazione tra i Dipartimenti di Matematica e DIAR del Politecnico di Milano. L'utilizzo di una PCE consente di definire gli indici di Sobol in maniera analitica e fornisce un modello surrogato del sistema. Quest'ultimo è stato impiegato per condurre un'analisi Monte Carlo delle *variabili di stato globali*, definendo le funzioni di densità di probabilità delle singole variabili, utili nel definire i livelli di rischio. Sfruttando il modello surrogato PCE si è determinata la correlazione tra le *variabili di stato globali*, si sono poi investigate le funzioni di distribuzione di densità di probabilità congiunte e

condizionate . Infine si è affrontato un problema di modellazione inversa basato sul criterio della massima verosimiglianza (*Maximum likelihood* , ML), in cui viene sfruttato il modello PCE, per stimare i parametri incerti a partire da valori delle *variabili di stato globali* .

Introduzione

Lo studio del fenomeno di intrusione salina (SWI) è un argomento in continuo approfondimento alla luce dell'incremento della domanda di acqua dolce. Processi di SWI sono stati evidenziati in molti acquiferi costieri, in particolare in zone aride, densamente popolate e industrializzate dove le estrazioni da falda promuovono l'avanzamento del cuneo salino, provocando la contaminazione dei pozzi. Nell'ambito dei processi d'intrusione salina molteplici fattori possono influenzare la conformazione del cuneo salino. Ulteriori studi possono definire quali siano i fattori cardine che controllano il fenomeno di SWI e trattare l'incertezza associata con tali fattori.

L'idea alla base del lavoro di tesi consiste nel riconoscere che la definizione dei parametri che controllano l'evoluzione dell'intrusione salina è sempre associata ad incertezza, legata al fatto che molti di questi sono determinabili solamente mediante indagini di campo. Inoltre le informazioni reperibili sono affette da un'intrinseca variabilità, impedendo la definizione di un valore univoco. Un ulteriore aspetto tipico dei processi di SWI è che sono spesso caratterizzati mediante *variabili di stato globali* che descrivono l'aspetto generale del cuneo salino che si instaura, alla luce dell'impossibilità di definire la distribuzione delle concentrazioni in ogni punto del dominio.

Nell'ambito della tesi lo studio è stato condotto con riferimento al problema di Henry anisotropo-dispersivo proposto da Abarca. Tale scelta è giustificata dalla elevata rappresentatività del fenomeno per il problema così formulato, nonostante si faccia riferimento ad una configurazione semplice. Come dimostrato da Abarca questa configurazione del problema consente di visualizzare chiaramente gli effetti che i vari parametri coinvolti nei processi di flusso e trasporto, svolgono nei problemi di SWI.

Nel lavoro di tesi si è indagato quale sia l'effetto dell'incertezza associata ai principali parametri, sulle *variabili di stato globali*. La valutazione dell'influenza dell'incertezza dei parametri in entrata sulla risposta espressa in termini di *variabili di stato globali* è stata effettuata mediante una tecnica di analisi di sensitività globale

(*GSA, Global Sensitivity Analysis*). In letteratura è stata dimostrata l'efficacia dei metodi basati sull'analisi della varianza (tra questi si ricordano formulazioni basate sugli indici di Sobol), che analizzano l'interazione tra molteplici parametri affetti da incertezza e la propagazione di tale incertezza sul processo in esame.

Nell'ambito del presente lavoro si è quindi effettuata un'analisi di sensitività globale (*GSA, Global Sensitivity Analysis*) del processo d'intrusione salina, calcolando gli indici di Sobol. Si presentano in dettaglio tutti i passaggi che portano alla *GSA*. In primo luogo viene selezionato un sottoinsieme significativo delle grandezze che influenzano la modellazione dei fenomeni in studio. Per ogni grandezza selezionata viene adottata una funzione di distribuzione di probabilità (pdf, *Probability Density Function*), definita in un intervallo assegnato. Lo spazio di variabilità delle grandezze individuate viene quindi campionato, per mezzo di un metodo di collocazione (e.g. Monte Carlo) e si ottiene, un set di scenari da analizzare. Dai risultati così ottenuti è possibile analizzare la varianza di variabili di interesse in uscita con tecniche tipo *ANOVA decomposition* e, quindi, effettuare un'analisi di sensitività della varianza mediante il calcolo degli indici di Sobol. Da questo processo è poi possibile ottenere una misura dell'importanza dei singoli parametri studiati all'interno del fenomeno considerato. Gli indici di Sobol, infatti, determinano la quota parte di varianza totale associabile a ciascun parametro incerto considerato.

Una particolarità del presente lavoro è legata al fatto che il calcolo degli indici di Sobol viene effettuato sulla base di una decomposizione tipo *Polynomial Chaos Expansion (PCE)*, che permette di calcolare gli indici in maniera analitica, attraverso i coefficienti del polinomio fornito dalla decomposizione che approssima la risposta del modello. Utilizzare la *PCE* comporta quindi due vantaggi: (1) fornisce un modello surrogato, utile per un'eventuale calibrazione dei parametri e per la conduzione di simulazioni Monte Carlo in maniera efficiente ed accurata, e (2) permette di calcolare facilmente gli indici di Sobol. Per la definizione del modello surrogato *PCE* si è utilizzato metodo di collocazione *sparse grids*. La scelta di tale metodo permette di ridurre il costo computazionale, associato alla costruzione del modello surrogato e quindi alla successiva determinazione degli Indici di Sobol, rispetto ad una metodologia di collocazione Monte Carlo standard. In letteratura è stata dimostrata l'efficacia del metodo *sparse grids* in diversi campi. La procedura di calcolo degli indici di Sobol, la definizione del modello surrogato *PCE* e il metodo di collocazione *sparse*

grids sono stati eseguiti mediante i codici di calcolo elaborati in precedenza nell'ambito di un progetto di ricerca, svolto in collaborazione tra i Dipartimenti di Matematica e DIIAR, del Politecnico di Milano.

Mediante il modello surrogato PCE si è eseguita un'analisi di tipo Monte Carlo con lo scopo di definire le funzioni di distribuzione di probabilità per ogni *variabile di stato globale* introdotta caratterizzando l'incertezza di ognuna. L'approccio probabilistico adottato permette di definire livelli di rischio, effettuare predizioni e stime sui valori delle *variabili di stato globali* partendo da un livello di incertezza dei parametri in ingresso al modello. Successivamente si è indagata la correlazione lineare tra *variabili di stato globali* analizzate e sulla base dei risultati si sono definite le distribuzioni di probabilità congiunte per le variabili maggiormente correlate. Nel lavoro di tesi si propone poi una possibile metodologia per caratterizzare, in termini probabilistici, le *variabili di stato globali* sfruttando l'informazione di una *variabile di stato globale* ,assunta nota. Tale metodologia si basa sull'esplorazione delle distribuzioni di probabilità marginali e/o congiunte ,precedentemente condizionate alla *variabile di stato globale* ,assunta nota.

Sfruttando il modello surrogato PCE definito per le *variabili di stato globali* relative al problema di Henry anisotropo-dispersivo in analisi si è impostato un problema di modellazione inversa per la stima dei parametri assunti incerti. Lo schema teorico per il Problema Inverso proposto è il criterio della massima verosimiglianza (*Maximum Likelihood* , ML) . L'utilizzo del modello surrogato PCE consente di ridurre notevolmente il costo computazione,tipicamente elevato, nei problemi di inversione. La procedura proposta ha l'originalità di essere basata su *variabili di stato globali* , invece che variabili di stato tipiche quali pressione e concentrazione.

Nel 1 vengono presentate le equazioni alla base dei processi di flusso e trasporto con densità variabile che si generano nei problemi di SWI. Successivamente viene presentato il problema di Henry ,evidenziandone le criticità. Viene poi proposto il problema di Henry anisotropo-dispersivo elaborato da Abarca. Tale configurazione è stata assunta come caso di riferimento.

Nel Capitolo 2 viene definito nel dettaglio il caso di riferimento scelto nell'ambito della tesi evidenziando quali parametri sono stati assunti costanti e quali affetti da variabilità. Inoltre si presentano le *variabili di stato globali* scelte nell'analisi.

Vengono riportate le scelte effettuate per la discretizzazione spaziale e temporale del problema di riferimento.

Nel Capitolo 3 si analizza il metodo scelto per effettuare l'analisi di sensitività. Si è approssimata la risposta del modello mediante un'espansione del tipo *Polynomial Chaos Expansion (PCE)* che consente il calcolo immediato degli indici di Sobol. Inoltre viene presentata la metodologia di collocazione *sparse grids* e la procedura di conversione modale per il calcolo della PCE.

Nel Capitolo 4 sono presentati i risultati dello studio della propagazione dell'incertezza associata ai parametri in ingresso sulle *variabili di stato globali*. Si riporta quindi un'analisi di come i vari parametri influenzino le *variabili di stato globali*. Successivamente sono presentate le analisi di tipo Monte Carlo condotte sfruttando la PCE. Si presentano le distribuzioni di probabilità marginali, congiunte e condizionate ricavate sulle base di 600'000 realizzazioni. Viene poi mostrata la metodologia impiegata per ricavare informazioni ulteriori su *variabili di stato globali* conoscendo una *variabile di stato globale*, mediante l'uso delle funzioni di distribuzione di probabilità condizionate.

Nel Capitolo 5 viene introdotta la metodologia utilizzata nel Problema Inverso basata sul criterio della massima verosimiglianza. Vengono inoltre indicate le assunzioni fatte nella procedura d'inversione. Sono poi riportati i risultati ottenuti: il problema è risultato ben posto per la stima dei coefficiente di dispersività longitudinale e trasversale, impiegando misure di quattro delle *variabili di stato globali* introdotte.

1

INTRUSIONE SALINA

L'intrusione di acqua salina (SWI) negli acquiferi costieri è una problematica a livello mondiale, in particolare nelle regioni aride dove la ricarica d'acqua dolce è scarsa, in zone densamente popolate ed economicamente avanzate in cui lo sfruttamento della falda è intenso. Barlow e Reichard (2010) hanno riportato differenti casi di SWI lungo le coste del Canada, Mexico e USA descrivendo le peculiarità delle varie modalità di sviluppo dell'intrusione. Payne et al. (2006) hanno descritto lo stato dell'intrusione salina per le aree costiere della Georgia e della Florida, dove dagli anni '80 le intense attività d'estrazione hanno provocato un abbassamento del livello della falda, agevolando l'intrusione di acqua marina. Bocanegra et al. (2010) hanno descritto 15 acquiferi costieri nel Sud America affetti da SWI. Custodio (2010) ha fornito una revisione dei modelli concettuali per gli acquiferi costieri in Europa descrivendo i principali problemi in aree deltaiche, rocce non consolidate, materiale carbonatico e piccole isole. Werner (2010) ha proposto una revisione dei principali, e meglio documentati, acquiferi costieri Australiani affetti da SWI dove il basso tasso di ricarica pone molti acquiferi a rischio di eccessiva salinizzazione. Vari autori [Bonacci & Roje, 1997; Petalas & Diamantis, 1999; Arfib & Marily, 2004] hanno descritto il problema per gli acquiferi lungo le coste del Mediterraneo. Tipicamente l'intrusione di acqua salina comporta la formazione di un cuneo di acqua salata a maggior densità, sottostante il naturale flusso di acqua dolce diretto dall'entroterra verso il mare (vedi Figura 1.1). Generalmente il passaggio tra l'acqua salata intrusa e l'acqua dolce avviene in maniera graduale, generando una zona di dispersione o transizione caratterizzata da una variazione della concentrazione di soluti disciolti.

Le conseguenze dirette della SWI sono la riduzione del volume di acqua dolce immagazzinato all'interno dell'acquifero e la contaminazione di eventuali pozzi di emungimento posizionati in prossimità delle coste. Infatti, in accordo con le Guidelines for drinking-water quality (2011) una concentrazione di cloruro maggiore di circa 250mg/l rende l'acqua inutilizzabile a scopo potabile.

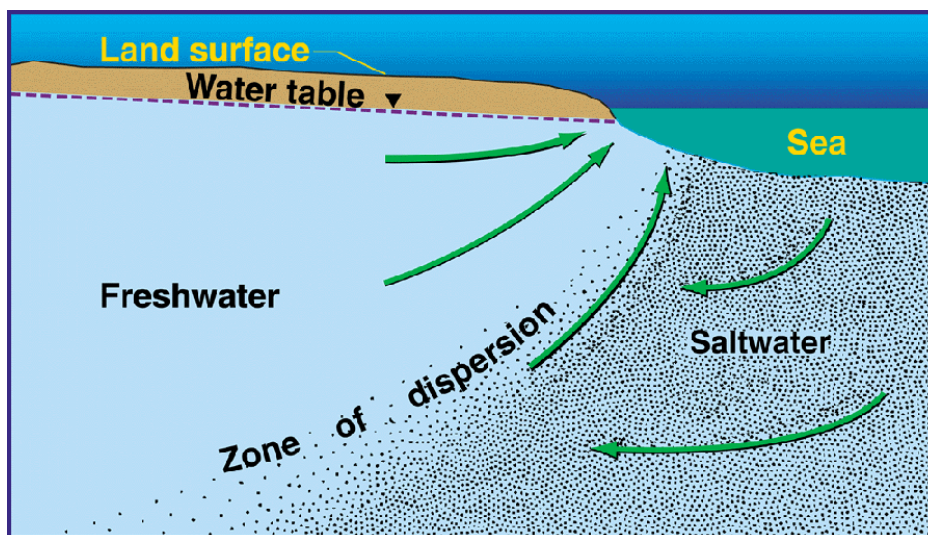


Figura 1.1 Schematizzazione del processo d'intrusione salina in acquiferi costieri.

Gli acquiferi costieri naturali sono sistemi complessi e la configurazione di equilibrio tra acqua dolce e salata è controllata da molteplici fattori quali: le proprietà idrauliche e geometriche dell'acquifero, le fluttuazioni dei livelli della falda, le fluttuazioni delle maree ed eventi oceanici rari, eventuali reazioni chimiche e biochimiche che si sviluppano alla scala dei pori, variazioni climatiche ed attività antropiche. In particolare, elevate attività di emungimento di acqua dolce dalla falda per uso potabile portano ad un movimento verso l'alto del cuneo salino (fenomeno usualmente denominato "up-coning", Werner 2013) con il conseguente possibile deterioramento dell'acqua emunta.

Il fenomeno di SWI dipende quindi dalla combinazione di numerosi fattori. Questo pone una grossa sfida nell'identificare e comprendere i fattori chiave che controllano il processo. Tuttavia tra i fattori principali sono inclusi: effetti dovuti al contrasto di densità controllata principalmente dalla concentrazione dei soluti disciolti

(Dausman AM,2010), forze advettive associate al flusso di acqua fresca, meccanismi di dispersione, le condizioni idrogeologico e geometriche dell'acquifero (Bear,1999).

L'intrusione di acqua salata è stata storicamente analizzata seguendo due diversi approcci.

L'acqua dolce e l'acqua salata sono considerati come due fluidi immiscibili separati da un'interfaccia, tale approccio è comunemente indicato come *sharp interface approximation* e viene generalmente impiegato nell'elaborare soluzioni analitiche in configurazioni semplici o per simulazioni numeriche qualora lo spessore della zona di transizione sia contenuto rispetto alla dimensione dell'acquifero. Il problema viene risolto accoppiando le equazioni del flusso delle due fasi (acqua dolce e salata) e imponendo che la pressione e la velocità siano continue lungo l'interfaccia di separazione (Bear,2010). Un'ulteriore semplificazione del problema è rappresentata dal modello concettuale proposto da Badon-Ghyben (1888) e Herzberg (1901). Considerando l'interfaccia in Figura 1.2 il tubo ad U sovrapposto sulla figura ha lo scopo di dimostrare il modello concettuale: considerando una condizione stazionaria, l'acqua salata è in condizioni statiche e l'acqua dolce che fluisce verso il mare è caratterizzata da una distribuzione idrostatica della pressione. Questo implica che il flusso sia essenzialmente orizzontale e le linee ad uguale carico piezometrico siano verticali (il carico piezometrico è definito $h = z + \frac{p}{\gamma}$, dove z è l'elevazione da una data superficie di riferimento, p è la pressione del fluido, γ il peso specifico del fluido).

Con la notazione di Figura 1.2, si ottiene che :

$$\eta_s = \delta \eta_f$$

Dove $\delta = \rho_f / (\rho_s - \rho_f)$ ed ρ_s è la densità dell'acqua salata ed ρ_f la densità dell'acqua dolce.

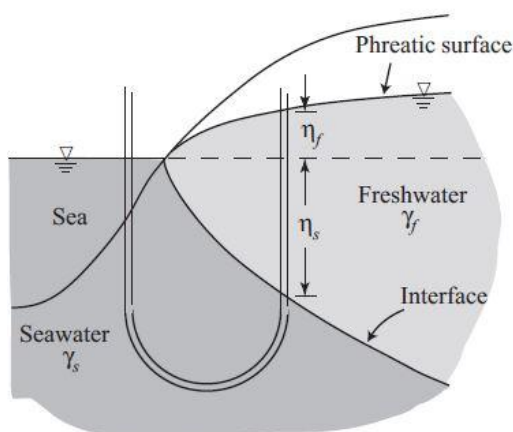


Figura 1.2 . Schematizzazione modello Ghyben-Herzberg

La relazione precedente è detta Ghyben-Herzberg approximation. Assumendo come valore per la densità dell'acqua dolce 1000 kg/m^3 e per l'acqua salata 1025 kg/m^3 si ottiene che la profondità del cuneo salino è circa 40 volte l'elevazione della superficie freatica della falda sul livello del mare. Tuttavia mano a mano che si approccia il mare viene a cadere l'ipotesi di flusso orizzontale, inoltre questa approssimazione non fornisce una regione in cui il flusso d'acqua dolce sbocchi nel mare.

Di fatto però le variazioni di densità influenzano il campo di flusso. La soluzione accoppiata delle due equazioni comporta l'insorgere di effetti non lineari. Quest'ultimo aspetto costringe ad una risoluzione di tipo numerico del problema, implementato in molti codici di calcolo: MOC3D (Konikow et al,1996),FEFLOW (Diersch,1988), SEAWAT (Langevin et al,2004),SUTRA (Voss & Souza,2002).

Analisi di laboratorio, simulazioni numeriche e rilievi di campo (Turner IL, 2004; Price et al.,2003; Cherry,2006;) hanno evidenziato il ruolo chiave assunto dai processi di dispersione idrodinamica per la caratterizzazione della zona di mescolamento. Il cuneo salino si instaura per un gradiente di pressione che promuove il flusso d'acqua salata dal mare verso l'interno dell'acquifero, tale gradiente è più elevato con la profondità. L'acqua salata intrude quindi nella zona inferiore dell'acquifero e si incunea al di sotto del flusso d'acqua dolce con densità inferiore. Per effetto della dispersione i soluti, disciolti nell'acqua marina, si mescolano nel flusso d'acqua dolce e qui vengono trasportati di nuovo verso mare (vedi Figura 1.1). Per effetto del gradiente della densità tra acqua dolce e acqua salata sottostante si genera

una cella di ricircolo e i soluti sono trasportati dalla zona inferiore del cuneo alla zona superiore. Questa dispersione dei soluti genera una diminuzione della densità dell'acqua salata, riducendo il contrasto di densità e di fatto la profondità d'avanzamento del cuneo.

La larghezza della zona di transizione e la profondità d'avanzamento del cuneo salino sono due aspetti fondamentali nella salvaguardia e gestione degli acquiferi costieri. La larghezza della zona di dispersione mostra una grande variabilità: esperimenti di laboratorio in mezzi omogenei hanno mostrato una zona di transizione modesta, riproducibili con simulazioni numeriche imponendo bassi valori della dispersività. Tuttavia in situazioni di campo si sono osservate zone di transizione della larghezza di pochi metri a qualche chilometro. Price et al. (2003) hanno riportato una zona di transizione della larghezza compresa tra 6-28km per il Parco Nazionale di Everglades, in Florida. Barlow (2003) ha evidenziato zone di transizione delle concentrazioni estese per molti acquiferi della costa Atlantica, e.g., l'acquifero di Biscayne nei pressi di Miami, Florida, il sistema di acquiferi della Carolina del Sud, Georgia e Florida. Volker & Rushton (1982) hanno simulato zone di transizione estese per elevati coefficienti di dispersione (in un modello di dispersione velocità-indipendente) e bassi valori del flusso d'acqua dolce. Held (2005), Paster e Dagan (2007) suggeriscono come lo spessore della zona di transizione sia principalmente controllata dal valore della dispersività trasversale. Abarca (2005) ha fornito un'espressione per la larghezza della zona di dispersione dipendente dal valore della media geometrica dei coefficienti di dispersività trasversale e longitudinale. Lo sviluppo dei processi di dispersione è fortemente legato al grado d'eterogeneità delle proprietà idrauliche del sistema. Diversi autori hanno investigato l'effetto dell'eterogeneità. Abarca suggerisce che per bassi livelli d'eterogeneità la larghezza della zona di transizione non subisce grandi modifiche in confronto al caso omogeneo. Dagan e Zeitzou (1998) hanno investigato l'aspetto del cuneo salino per acquiferi stratificati evidenziando come la profondità d'intrusione del cuneo venga sovrastimata trascurando le eterogeneità. Da analisi di laboratorio e numeriche di un acquifero stratificato, caratterizzato dalla presenza di un acquitardo, Lu et. al. (2013) sono giunti a considerazioni simili ed inoltre hanno evidenziato come nella zona a bassa permeabilità si instauri una zona di transizione dallo spessore elevato. Questi risultati sono utili nel capire i processi e il funzionamento dei meccanismi coinvolti nei

problemi di SWI, tuttavia in molte situazioni la configurazione geologica locale gioca un ruolo chiave nel definire l'aspetto dell'intrusione salina (Oki et. al.,1998; Ghassemi,2000). Questo impedisce una generalizzazione e un'applicabilità universale dei risultati teorici a situazioni di campo.

Spesso nello studio dei fenomeni di SWI si evidenziano grosse incertezze nel definire la configurazione del cuneo salino dovute ad incertezze sul valore dei parametri che controllano il flusso e il trasporto dei soluti, quali coefficienti di dispersività o permeabilità idraulica, nella geometria del dominio e sulle condizioni al contorno al sistema. Molti autori hanno affrontato il problema mediante un approccio stocastico valutando l'incertezza associata alla definizione della larghezza della zona di transizione e sulla profondità del cuneo salino (Dagan&Zeitoun,1998; Ababou&Al-Bitar,2004; Al-Bitar,2007).

Alla luce dell'elevata incertezza che caratterizza i processi di SWI, nel lavoro di tesi ,si è condotta un'analisi di sensitività globale (GSA) per delle *variabili di stato globali* utilizzate nel definire l'aspetto del cuneo salino. Come fonti d'incertezza si sono considerati i valori dei coefficienti di dispersività, la cui definizione e il ruolo svolto in problemi di flusso e trasporto a densità variabile non è ancora completamente delucidato, e i valori delle permeabilità idrauliche per un mezzo omogeneo anisotropo. Come caso di riferimento si è utilizzato il problema di Henry (1964) che per primo introdusse gli effetti della diffusione molecolare nel processo di SWI, precedentemente affrontato solamente mediante la *sharp interface approximation* . Nell'ambito della tesi si è scelto di fare riferimento al problema di Henry nella forma dispersiva anisotropa proposta da Abarca, alla luce della maggior rappresentatività dei processi fisici reali. Il dominio considerato è una sezione verticale rettangolare d'acquifero confinato, sul fondo e sul contorno superiore non vi è flusso, dal lato entroterra si impone un flusso d'acqua dolce mentre a lato mare è imposta una distribuzione idrostatica della pressione, proporzionale alla densità dell'acqua salata. Il problema di Henry è stato nel corso degli anni modificato e criticato da molti autori, tuttavia per la sua semplicità e rappresentatività dei processi chiave è divenuto un caso di benchmarking nello studio della SWI.

La semplicità e la rappresentatività del problema di Henry sono state sfruttate da Sanz e Voss (2005) per ricavare informazioni utili nella risoluzione del Problema Inverso per problematiche di SWI. Sanz e Voss hanno identificato le regioni d'acquifero

più sensibili per effettuare misurazioni delle variabili di stato, pressione e concentrazione, al fine di ridurre l'incertezza nella stima dei parametri analizzati: misure di pressione sul lato entrotterra riducono l'incertezza associata al flusso d'acqua fresca, alla permeabilità idraulica e alla viscosità, rilievi nella regione intermedia della zona di transizione delle concentrazioni sono indicate per la stima del coefficiente di diffusione molecolare e per la stima della porosità. Sanz e Voss hanno evidenziato come il problema inverso in processi di SWI risulti spesso mal posto qualora si voglia stimare un numero elevato di parametri, specialmente quando questi siano fortemente correlati fra loro. Carrera et al (2009) ha analizzato le principali problematiche relative alla stima dei parametri in acquiferi costieri: le misure di carico devono essere accompagnate da informazioni sulla densità, misure della concentrazione sono molto sensibili ai flussi che si instaurano all'interno dei pozzi di misura, la procedura d'inversione richiede spesso elevati costi computazionali, associati alla risoluzione in maniera iterativa del modello numerico definito per l'acquifero in esame. Nell'ambito della tesi si è impostata una procedura d' inversione per il problema di Henry anisotropo-dispersivo basata sulle *variabili di stato globali* introdotte. La procedura di stima dei parametri si basa sul criterio della massima verosimiglianza (*Maximum Likelihood, ML*) e sfrutta un modello surrogato (*Polynomial Chaos Expansion, PCE*) al fine di ridurre i costi computazionali.

1.1 EQUAZIONI GOVERNANTI IL FENOMENO DI SWI

Le equazioni fondamentali che stanno alla base del processo d'intrusione salina nei mezzi porosi in condizioni isoterme sono:

- equazione del moto (legge di Darcy)
- equazione costitutiva del fluido
- equazione di continuità
- equazione del trasporto advettivo-diffusivo-dispersivo

L'equazione di continuità nei mezzi porosi viene risolta in maniera accoppiata all'equazione del trasporto advettivo-diffusivo-dispersivo per considerare le variazioni di densità espresse dall'equazione costitutiva del fluido. Opportune condizioni al contorno (B.C.) e condizioni iniziali (C.I.) devono essere esplicitate sia per l'equazioni del flusso sia per l'equazione del trasporto.

Nei problemi di intrusione salina il fluido contenuto nei vuoti del mezzo poroso è scomponibile nella sua porzione di *acqua distillata* e nella sua porzione di *soluti disciolti*. Si possono quindi definire le seguenti grandezze di interesse:

- ρ [M/L³] : Densità del fluido, variabile con la concentrazione dei soluti disciolti.
- C [M/M] : Concentrazione massa su massa dei soluti disciolti rispetto al fluido .
- c [M/L³] : Concentrazione massa su volume dei soluti disciolti rispetto all'acqua distillata.

1.2 EQUAZIONE DI DARCY

Un dominio spaziale è detto *continuo* se è possibile definire variabili di stato e parametri o coefficienti che descrivono il materiale occupante, in ogni punto del dominio. Considerando il *mezzo poroso* possiamo identificare almeno due componenti: la matrice solida del terreno e il fluido circolante nei vuoti. La scala di osservazione del fenomeno di flusso nel mezzo poroso che considera separatamente la matrice solida e il fluido è detta *scala microscopica*. Volendo descrivere il processo di flusso a questa scala si renderebbe necessario risolvere le equazioni di Navier-Stokes conoscendo in dettaglio la geometria dei pori ed imponendo condizioni al contorno e iniziali adeguate. Un tale approccio è quindi impraticabile per domini di mezzo poroso estesi alla luce delle difficoltà nel definire esattamente la geometria dei pori e per gli oneri computazionali associati elevati. Si rende quindi necessaria una scala d'osservazione del fenomeno differente, la scala del *continuo o macroscopica*. Il passaggio dalla scala *microscopica* alla scala del *continuo* avviene tramite un processo di media definita *volume averaging* (Bear 2010).

L'approccio mediante *volume averaging* consente di trasformare leggi fisiche microscopiche, e.g., equazioni di bilancio di grandezze estensive come massa e quantità di moto, nella loro controparte per applicazioni pratiche alla scala del *continuo*. Considerando un punto nel dominio, \mathbf{x} , possiamo costruire un *volume elementare rappresentativo* (REV) con baricentro in \mathbf{x} e volume U_0 (Figura 1.3). Definiamo E_α come l'ammontare della quantità estensiva E in una componente del mezzo poroso denotata dal pedice α . Una quantità estensiva è una quantità additiva, ad esempio come la massa o la quantità di moto. La corrispondente quantità intensiva, e_α è definita come:

$$e_\alpha = \frac{E_\alpha}{U_\alpha} \quad (1.2.1)$$

Dove U_α indica il volume della componente α .

Si definisce *intrinsic phase average* di e_α , condotta per il dominio definito dal REV di volume U_0 con baricentro in \mathbf{x} :

$$\overline{e_\alpha}^\alpha(x,t) = \frac{1}{U_{0\alpha}(x,t)} \int_{U_{0\alpha}(x,t)} e_\alpha(x',t;x) dU_\alpha(x') \quad (1.2.2)$$

Dove $U_{0\alpha}$ è il volume della componente α nel volume U_0 , x' è un punto nella componente α all'interno del REV con baricentro in \mathbf{x} e t denota il tempo. La *intrinsic phase average* è quindi la media di E_α per unità di volume della fase considerata.

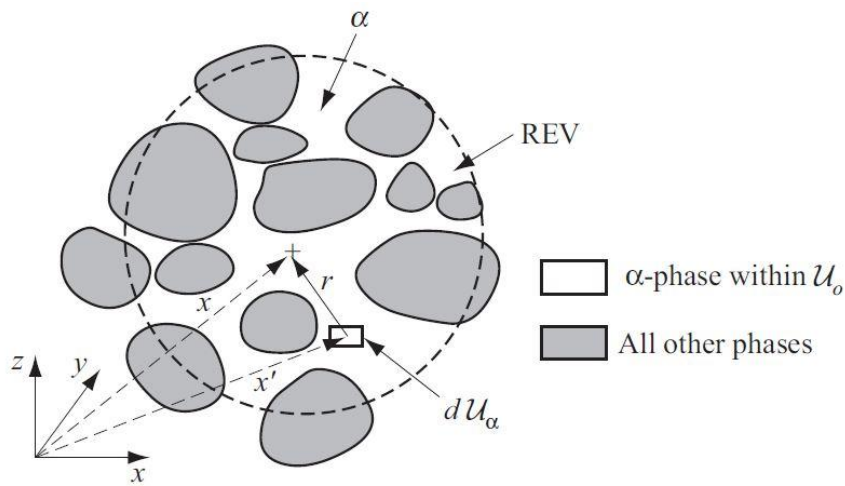


Figura 1.3. Nomenclatura per il processo di media sul REV (Bear,2010)

L'operazione di media può essere ripetuta per ogni punto \mathbf{x} del dominio, questo ci permette di definire le quantità intensive $\overline{e_\alpha}^\alpha(x,t)$ per ogni componente α come una funzione continua e derivabile. Ad esempio si può definire la densità del fluido $\overline{e_\alpha}^\alpha(x,t) = \overline{\rho_f}^f(x,t)$ in ogni punto del dominio per ogni istante. Procedendo in maniera analoga per le varie grandezze coinvolte nel fenomeno del flusso nel mezzo poroso si possono costruire il continuo relativo al fluido e il continuo relativo alla matrice solida. Il mezzo poroso alla scala del macroscopica è definito come la sovrapposizione del continuo fluido e del continuo matrice solida. Nel passaggio di scala così descritto vengono introdotti coefficienti rappresentativi del processo mediato a livello microscopico quali ,ad esempio, la porosità e la permeabilità idraulica che racchiudono le caratteristiche geometriche medie dei pori. Usualmente la scelta

della dimensione del REV è tale che (a) il valore medio di ogni caratteristica geometrica della microstruttura dei pori, in ogni punto del dominio, è funzione unicamente della posizione del punto, (b) il valore delle media deve essere indipendente da piccole perturbazioni della dimensione del REV. Indicando con l la dimensione caratteristica del REV e con d la dimensione caratteristica dei pori (diametro, raggio idraulico) una condizione necessaria per ottenere stime non casuali delle caratteristiche geometriche dei pori in ogni punto del dominio è $l \gg d$. Inoltre la dimensione del REV deve essere piccola rispetto alla dimensione del dominio del mezzo poroso, L_{domain} , $l \ll L_{domain}$ (Bear, 2010).

In relazione al processo del flusso nel mezzo poroso il punto di partenza è quindi le equazioni di bilancio della quantità di moto per il fluido contenuto nei micropori della matrice solida scritta in forma vettoriale :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{V} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{V} \mathbf{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{F} \quad (1.2.3)$$

(a) (b) (c) (d)

Dove:

ρ	[M/L ³]	Densità del fluido
\mathbf{V}	[L/T]	Velocità del fluido
$\boldsymbol{\sigma}$	[M/LT]	Sforzi
\mathbf{F}	[ML/T]	Forze di volume

I vari termini coinvolti nella (1.2.3) sono definiti per unità di volume di fase fluida e rappresentano :

- (a)= tasso di accumulo di quantità di moto
- (b)=tasso di variazione di quantità di moto per advezione
- (c)=tasso di variazione di quantità di moto legata agli sforzi
- (d)=variazione di quantità di moto per effetto delle forze di volume

Mediando il bilancio della quantità di moto per il fluido (1.2.3) contenuto in un volume elementare rappresentativo (REV) e introducendo le seguenti ipotesi:

- Il fluido è Newtoniano.
- Le forze d'inerzia sono trascurabili rispetto a quelle viscosive.
- L'effetto di trasferimento di quantità di moto all'interno del fluido, come risultato del gradiente di velocità a livello microscopico è trascurabile in

confronto alla forza di trascinamento che si sviluppa all'interfaccia tra solido e fluido.

- Il fluido occupa satura completamente i vuoti.
- La matrice solida è immobile.

Si ottiene un'espressione semplificata per il bilancio della quantità di moto (Bear 2010):

$$\underline{v} = -\frac{\underline{k}(x, y, z)}{\phi\mu} \cdot (\nabla p + \rho \underline{g}) \quad (1.2.4)$$

Dove

\underline{v}	[L/T]	Velocità di filtrazione media del fluido
\underline{k}	[L ²]	Tensore permeabilità idraulica
ρ	[M/L ³]	Densità media del fluido
p	[M/LT]	Pressione media del fluido
μ	[M/LT]	Viscosità media del fluido
ϕ	[-]	Porosità media della matrice solida
\underline{g}	[L/T ²]	Vettore accelerazione di gravità

Avendo introdotto il sistema di riferimento cartesiano (x, y, z) . dove la componente z è diretta verticalmente verso l'alto. Il vettore contenente l'accelerazione di gravità diviene:

$$\underline{g} = (0, 0, -|g|) \quad (1.2.5)$$

L'equazione (1.2.4) è la legge generale del moto per un fluido Newtoniano in un mezzo poroso anisotropo ed eterogeneo. Nell'equazione (1.2.4) il termine $-(\nabla p + \rho g \nabla z)$ rappresenta la forza che genera il moto del fluido: il termine $-\nabla p$ rappresenta le forze dovute al gradiente di pressione, mentre $-(\rho g \nabla z)$ rappresenta la forza dovuta alla gravità. La somma vettoriale di queste due forze è bilanciata dalla forza di trascinamento, o resistenza al flusso che si sviluppa all'interfaccia tra fluido e solido, esprimibile come $\phi \mu \underline{k}^{-1}(\underline{v})$. La resistenza al flusso è quindi proporzionale alla velocità media del fluido rispetto alla matrice solida, alla viscosità del fluido, e inversamente proporzionale al coefficiente macroscopico \underline{k} / ϕ che rappresenta gli effetti della configurazione microscopica dei vuoti del mezzo poroso in condizioni di completa

saturazione. Il tensore di permeabilità intrinseca \underline{k} descrive l'attitudine del terreno a lasciarsi attraversare da un generico fluido. Dipende dalle sole proprietà geometriche del mezzo poroso, le sue componenti possono essere determinate dalla tessitura del terreno (pezzatura dei granuli, forma, etc).

Considerando l'unità di area di mezzo poroso si definisce la portata specifica :

$$\underline{q} = \varepsilon \underline{v} = -\frac{\underline{k}(x, y, z)}{\mu} \cdot (\nabla p + \rho \underline{g}) \quad (1.2.6)$$

Dove:

\underline{q} [L/T] Portata media specifica volumetrica o flusso di Darcy

Comunemente la (1.2.6) viene indicata come equazione di Darcy. L'equazione di Darcy esprime quindi la quantità di fluido che mediamente attraversa l'unità di area di mezzo poroso nell'unità di tempo (Figura 1.4).

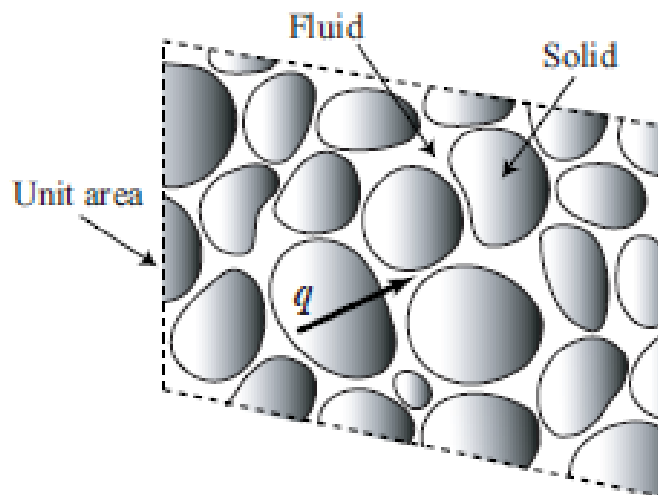


Figura 1.4. Schema del processo di flusso nel mezzo poroso (Bear,2010)

1.3 EQUAZIONE COSTITUTIVA DEL FLUIDO

La densità del fluido può subire sensibili variazioni in seguito ad un cambiamento della concentrazione di soluti disciolti ,C . La relazione più semplice e comunemente utilizzata che esprime questa variazione è un'espansione in serie di Taylor del valore attorno ad un valore di riferimento:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial C} (C - C_0) \quad (1.3.1)$$

Dove:

ρ_0	[M/L ³]	Densità di riferimento del fluido	kg/m ³	1000
C_0	[M/M]	Concentrazione dei soluti disciolti di riferimento	kg/kg	0
$\frac{\partial \rho}{\partial C}$	[-]	Tasso di variazione della densità per variazione unitaria della concentrazione di soluti disciolti	kg/m ³	700

Questa semplice relazione risulta essere una buona approssimazione nei processi d'intrusione salina (Abarca,2005) . In casi di variazioni di densità, per effetto della concentrazione, più marcate esistono diverse relazioni in letteratura (Landman, 2005). La variazione della viscosità per effetto della concentrazione può essere trascurata nei processi di intrusione salina (Abarca,2005).

1.4 EQUAZIONE DI CONTINUITÀ

L'equazione di continuità nei mezzi porosi è definita alla scala del *continuo* ed esprime il bilancio di massa di fluido contenuto all'interno del mezzo poroso completamente saturo :

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{v}) + Q_p + \gamma \quad (1.4.1)$$

Dove:

ε	[-]	porosità
ρ	[M/L ³]	densità del fluido
\mathbf{v}	[L/T]	velocità di Darcy
Q_p	[M/L ³ T]	Sorgente di massa di fluido
γ	[M/L ³ T]	Sorgente di massa di soluto

In generale le sorgenti di massa di soluto puro (i.e. dovute alla dissoluzione della matrice solida) possono essere trascurate rispetto alle sorgenti di massa di fluido $\gamma \ll Q_p$.

Il termine di sinistra dell'equazione (1.4.1) può essere riscritto come:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} = (\rho S_{op}) \frac{\partial p}{\partial t} + \left(\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1.4.2)$$

Dove:

S_{op}	[LT ² /M]	Storativity specifica della pressione
----------	----------------------	---------------------------------------

La storativity specifica della pressione rappresenta il volume di fluido rilasciato o immagazzinato per unità di mezzo poroso in seguito ad una variazione unitaria della pressione. La storativity specifica della pressione viene definita come:

$$\rho S_{op} = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} + \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial p} = (1 - \varepsilon)\alpha + \beta \quad (1.4.3)$$

Dove:

α	[LT ² /M]	Comprimibilità della matrice solida
β	[LT ² /M]	Comprimibilità volumetrica del fluido

La comprimibilità della matrice solida α rappresenta la variazione di volume della matrice solida in seguito ad una variazione della pressione del fluido interstiziale dei pori:

$$\alpha = -\frac{1}{VOL} \frac{\partial(VOL)}{\partial\sigma'} \quad (1.4.4)$$

Dove:

VOL $[L^3]$ Volume di riferimento

σ' $[M/LT^2]$ Sforzi efficaci

Questo coefficiente viene ricavato nell'ipotesi di sforzi totali $\sigma = \sigma' + p = cost$, dove σ sono gli sforzi totali e σ' gli sforzi efficaci.

La comprimibilità volumetrica del fluido β rappresenta la variazione relativa di densità del fluido in seguito ad una variazione unitaria di pressione.

$$\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial\rho}{\partial p} \quad (1.4.5)$$

Il secondo termine a destra dell'uguale nell'equazione (1.4.2) rappresenta la variazione di massa di fluido contenuta nell'unità di mezzo poroso in seguito ad una variazione della concentrazione dei soluti nel tempo.

L'equazione (1.4.1) si può quindi riscrivere come:

$$\rho S_{op} \frac{\partial p}{\partial t} + \left(\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla(\varepsilon \rho \underline{v}) = Q_p \quad (1.4.6)$$

1.5 EQUAZIONE DEL TRASPORTO ADVETTIVO DIFFUSIVO DISPERSIVO NEL MEZZO POROSO

Nella descrizione del processo di trasporto per soluti disciolti nella fase liquida si considerano i tre seguenti processi :

- trasporto advettivo in cui i soluti sono trasportati dal flusso di fluido che si instaura nel mezzo poroso descritto sulla base dell'equazione di Darcy (1.2.4).
- trasporto diffusivo, dovuto alla diffusione molecolare all'interno del mezzo poroso. E' descrivibile dalla legge di Fick (Bear,2010). La diffusione genera movimento di soluti da zone ad alta concentrazione verso zone a bassa concentrazione.
- La dispersione meccanica nasce dall'osservazione che la geometria dei pori e le loro interconnessioni generano variazioni di velocità all'interno del sistema poroso provocando una distribuzione di velocità non uniforme (vedi Figura 1.5) .

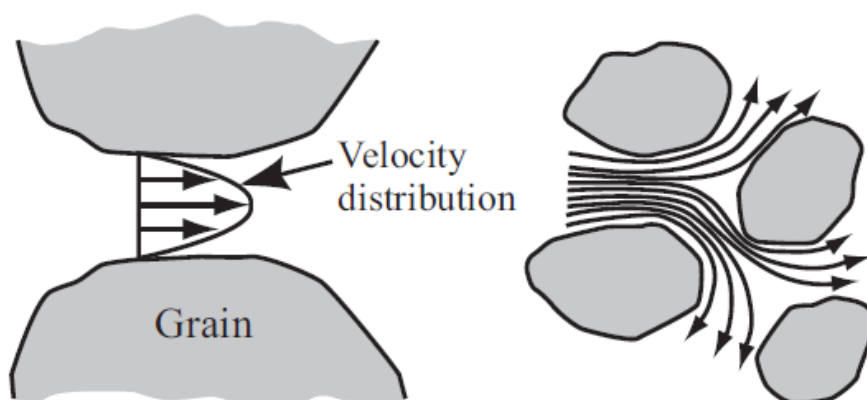


Figura 1.5 Rappresentazione alla scala microscopica dei processi che generano la dispersione meccanica

Considerando un processo di trasporto non reattivo per un unico soluto e trascurando l'interazione tra il fluido e la matrice solida, l'equazione che descrive il processo di trasporto advettivo-diffusivo-dispersivo diventa :

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho C)}{\partial t} = -\underline{\nabla}\cdot(\varepsilon\rho C\underline{v}) + \underline{\nabla}\cdot\left[\varepsilon\rho\left(D_m I + \underline{\underline{D}}\right)\cdot\underline{\nabla}C\right] + Q_p C^* \quad (1.5.1)$$

Dove:

D_m	$[L^2/T]$	Coefficiente di diffusione molecolare
I	$[-]$	Matrice identità scrivila come matrice
$\underline{\underline{D}}$	$[L^2/T]$	Tensore di dispersione meccanica
C^*	$[-]$	Concentrazione del soluto per la sorgente di fluido Q_p

Il termine a sinistra dell'uguale della relazione(1.5.1) rappresenta il termine di accumulo. Il primo termine a destra dell'uguale esprime il flusso advettivo. Il secondo termine a destra dell'uguale si compone del flusso diffusivo e del termine legato ai processi di dispersione meccanica. L'ultimo termine rappresenta le sorgenti di soluto associate a sorgenti di massa di fluido, si noti che questo termine può esprimere sorgenti di soluto puro specificando $C^*=1$.

Il coefficiente di diffusione molecolare D_m assume valore costanti e dipende dal soluto in esame. La diffusione molecolare agisce in maniera isotropa nello spazio.

Il tensore di dispersione meccanica $\underline{\underline{D}}$ generalmente è completo ed anisotropo. Si assume generalmente che le sue direzioni principali coincidano con quelle del moto, i.e.

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.5.2)$$

Dove gli elementi diagonali sono dati dalle seguenti espressioni

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \left(\frac{1}{v^2}\right)(d_L v_x^2 + d_T v_y^2 + d_T v_z^2) \\ D_{yy} &= \left(\frac{1}{v^2}\right)(d_T v_x^2 + d_L v_y^2 + d_T v_z^2) \\ D_{zz} &= \left(\frac{1}{v^2}\right)(d_T v_x^2 + d_T v_y^2 + d_L v_z^2) \end{aligned} \quad (1.5.3)$$

Dove:

v	[L/T]	Velocità media
v_x	[L/T]	Componente nella direzione x della velocità media
v_y	[L/T]	Componente nella direzione y della velocità media
v_z	[L/T]	Componente nella direzione z della velocità media
d_L	[L ² /T]	Coefficiente di dispersione longitudinale
d_T	[L ² /T]	Coefficiente di dispersione trasversale

Nell'espressione precedente sono stati introdotti i coefficienti di dispersione longitudinale d_L e trasversale d_T . Tali coefficienti sono generalmente assunti proporzionali al modulo della velocità :

$$\begin{aligned} d_L &= \alpha_L v \\ d_T &= \alpha_T v \end{aligned} \tag{1.5.4}$$

Dove:

α_L	[L]	Coefficiente di dispersività longitudinale
α_T	[L]	Coefficiente di dispersività trasversale

I coefficienti di dispersività sono dei parametri chiave nei processi di trasporto, in essi si racchiudono gli effetti della configurazione della matrice solida sul flusso e quindi sul trasporto dei soluti. I coefficienti di dispersività tipicamente sono determinati sperimentalmente e dipendono dalla scala di osservazione del fenomeno .

1.6 IL PROBLEMA DI HENRY

Il problema di Henry analizza il processo di intrusione salina lungo una sezione verticale rettangolare rappresentante un acquifero confinato omogeneo isotropo. Sul contorno d'entroterra si impone un flusso di acqua dolce, mentre un carico costante di acqua salata è imposto sul contorno a lato mare. I contorni inferiore e superiore sono impermeabili (Figura 1.6). Henry propose una soluzione semi-analitica del problema in termini adimensionali e in condizioni stazionarie utilizzando le stream-function e considerando le sole componenti advettivo-diffusivo del trasporto (ovvero trascurando la dispersione meccanica). Il problema di Henry è divenuto un caso classico di benchmarking per molti codici numerici e, nonostante la semplicità della configurazione adottata, è tuttora impiegato per lo studio dell'intrusione salina. Nel corso degli anni diversi autori ne hanno evidenziato problematiche e limitazioni, alcune delle quali riportate in seguito. (Pinder&Cooper, 1970; Segol et al,1975; Frind,1982; Segol,1994).

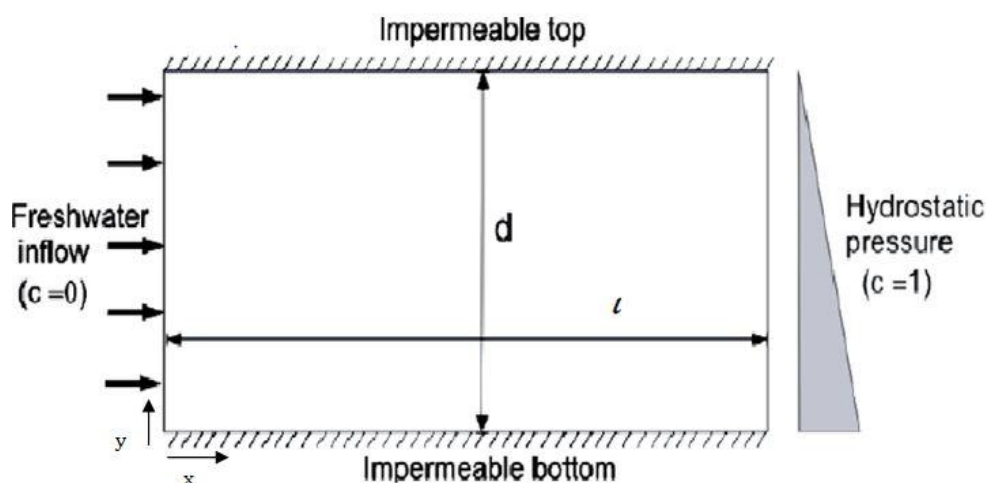


Figura 1.6. Schematizzazione del problema di Henry [Abarca 2005].

Di seguito si riassume brevemente la formulazione del problema e la soluzione proposta da Henry [1964].

Le equazioni che governano il processo sono l'equazione di continuità (1.4.1) nella sua forma stazionaria riscritta utilizzando la relazione (1.2.6) e senza termini sorgente :

$$\underline{\nabla} \cdot (\underline{\rho q}) = 0 \quad (1.6.1)$$

L'equazione del trasporto (1.5.1) nella sua forma stazionaria ed escludendo la componente relativa alla dispersione idrodinamica ed eventuali termini sorgente e sfruttando la (1.2.6) ,diventa :

$$\underline{\nabla} \cdot (\underline{c q}) - \underline{\nabla} \cdot [\underline{\varepsilon D}_m \underline{I} \cdot \underline{\nabla} c] = 0 \quad (1.6.2)$$

Il sistema di riferimento bidimensionale è denominato con (x, y) ; x -direzione orizzontale ed y -direzione verticale, origine nell'estremo inferiore sinistro del dominio di calcolo. Vengono introdotte le seguenti quantità adimensionali:

$$x' = \frac{x}{d}; y' = \frac{y}{d}; q'_x = \frac{q_x d}{Q}; q'_y = \frac{q_y d}{Q}; c' = \frac{c}{c_s}; \rho' = \frac{\rho - \rho_f}{\rho_s - \rho_f}; \xi = \frac{l}{d}; \quad (1.6.3)$$

Dove:

d	[L]	Dimensione verticale del dominio
l	[L]	Dimensione orizzontale del dominio
Q	[L ² /T]	Flusso d'acqua dolce totale imposto
ρ_f	[M/ L ³]	Densità acqua dolce
ρ_s	[M/ L ³]	Densità acqua salata
c_s	[M/L ³]	Concentrazione volumetrica di soluti per l'acqua salata
c	[M/L ³]	Concentrazione volumetrica di soluti

Riscrivendo la (1.6.1) in termini adimensionali e sfruttando l'ipotesi di Boussinesq, che consente di trascurare le variazioni di densità ad eccezione del termine gravitativo nell'equazione di Darcy (Landman,2005),si ottiene:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{q}' = 0 \Rightarrow \underline{\nabla} \cdot \underline{q} = 0 \quad (1.6.4)$$

Definendo le stream-function adimensionali :

$$q'_{x'} = \frac{\partial \psi'}{\partial y'}; \quad q'_{y'} = -\frac{\partial \psi'}{\partial x'} \quad (1.6.5)$$

Dopo qualche arrangiamento (Croucher & O'Sullivan, 1995) si ottiene la prima equazioni differenziale per il problema:

$$a \nabla^2 \psi' = \frac{\partial c'}{\partial x'} \quad (1.6.6)$$

Dove il parametro adimensionale $a = \frac{\mu Q}{kgd(\rho_s - \rho_f)}$ rappresenta il rapporto tra le forze viscosse e le forze di galleggiamento.

Assumendo che la diffusione molecolare D_m e la porosità ε siano costanti nel dominio indicato e sostituendo l'equazione (1.6.4) nell'equazione (1.6.2) si ottiene:

$$\underline{q} \cdot \nabla c - \varepsilon D_m \nabla^2 c = 0 \quad (1.6.7)$$

Utilizzando l'equazione (1.6.3) e (1.6.5) nell'equazione (1.6.7), dopo qualche manipolazione (Gotovac et al,2003) si ottiene la seconda equazione differenziale che governa il sistema :

$$b \nabla^2 c' = \frac{\partial \psi'}{\partial y'} \frac{\partial c'}{\partial x'} - \frac{\partial \psi'}{\partial x'} \frac{\partial c'}{\partial y'} \quad (1.6.8)$$

Dove si è introdotto il termine adimensionale $b = \frac{\varepsilon D_m}{Q}$ anche detto numero di Peclet, che confronta i flussi diffusivi con quelli advettivi.

Le condizioni al contorno per il problema in termini adimensionali diventano:

$$x' = 0 \Rightarrow \frac{\partial \psi'}{\partial x'} = 0; \quad c' = 0; \quad (1.6.9)$$

$$x' = 2 \Rightarrow \frac{\partial \psi'}{\partial x'} = 0; \quad c' = 1; \quad (1.6.10)$$

$$y' = 0 \Rightarrow \psi' = 0; \quad \frac{\partial c'}{\partial y'} = 0; \quad (1.6.11)$$

$$y' = 1 \Rightarrow \psi' = 1; \quad \frac{\partial c'}{\partial y'} = 0; \quad (1.6.12)$$

L'equazione (1.6.9) esprime la condizione di flusso d'acqua dolce dall'entroterra. L'equazione(1.6.10) fissa la concentrazione di soluti disciolti pari a quella del mare c_s ,

ed impone un carico idrostatico lungo il contorno lato mare. Le equazioni (1.6.11) e (1.6.12) impongono l'impermeabilità per lo strato inferiore e superiore.

Si riporta di seguito una rappresentazione grafica del problema di Henry in termini adimensionali.

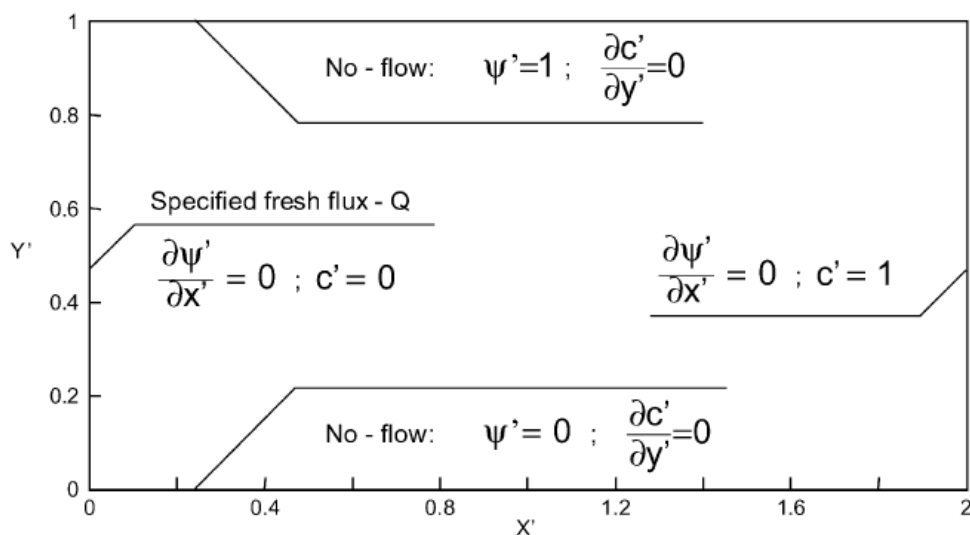


Figura 1.7. Dominio e rispettive condizioni al contorno per il problema di Henry in termini adimensionali (Gotovac,2003).

La soluzione di Henry prevede di ricavare le due variabili principali ψ', c' in termine di una doppia serie di Fourier :

$$\begin{aligned} \psi' &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} A_{m,n} \sin(m\pi y) \cos(n\pi \frac{x}{\xi}) \\ c' &= \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} B_{r,s} \cos(r\pi y) \sin(s\pi \frac{x}{\xi}) \end{aligned} \tag{1.6.13}$$

Seguendo il metodo di Galerkin la procedura prevede di sostituire le espressioni (1.6.13) nell'equazioni (1.6.6) e (1.6.8) e moltiplicare per delle specifiche funzioni (Henry, 1964).Le equazioni risultanti sono poi integrate nel dominio di calcolo e le condizioni al contorno sono incorporate. Questo modo di procedere porta alla valutazione di un infinito set di equazioni algebriche non lineari per valutare i coefficienti delle serie di Fourier. L'approssimazione che viene introdotta, rendendo la soluzione semi-analitica, sta nel troncamento delle serie di Fourier. I coefficienti sono poi calcolati secondo una procedura iterativa (Segol, 1975).

In tabella 1.1 si riportano i valori dei parametri caratteristici adottati da Henry e in tabella 1.2 i numeri adimensionali corrispondenti.

Tabella 1.1. Valori dei parametri dimensionali adottati da Henry

Simbolo	Parametro	Valore	Unita
d	Dimensione verticale del dominio	1	m
l	Dimensione orizzontale del dominio	2	m
ε	Porosità	0.35	
D_m	Diffusione molecolare	$1.8857 \cdot 10^{-5}$	m^2/s
k	Permeabilità	$1.019 \cdot 10^{-9}$	m^2
Q	Flusso d'acqua dolce totale imposto	$6.6 \cdot 10^{-5}$	m^2/s
ρ_f	Densità acqua dolce	1000	kg/m^3
ρ_s	Densità acqua salata	1025	kg/m^3
c_s	Concentrazione volumetrica di soluti per l'acqua salata	0.035	kg/m^3
c_f	Concentrazione volumetrica di soluti per l'acqua dolce	0.0	kg/m^3
μ	Viscosità del fluido	0.001	kg/ms

Tabella 1.2 Parametri adimensionali per il problema di Henry

Simbolo	Parametro	Valore
a	Forze viscosive su forze di galleggiamento	0.263
b	Numero di Peclet	0.2
ξ	Rapporto geometrico del dominio	2

Di seguito si riportano i risultati ottenuti da Henry per le variabili principali c', ψ' in forma grafica.

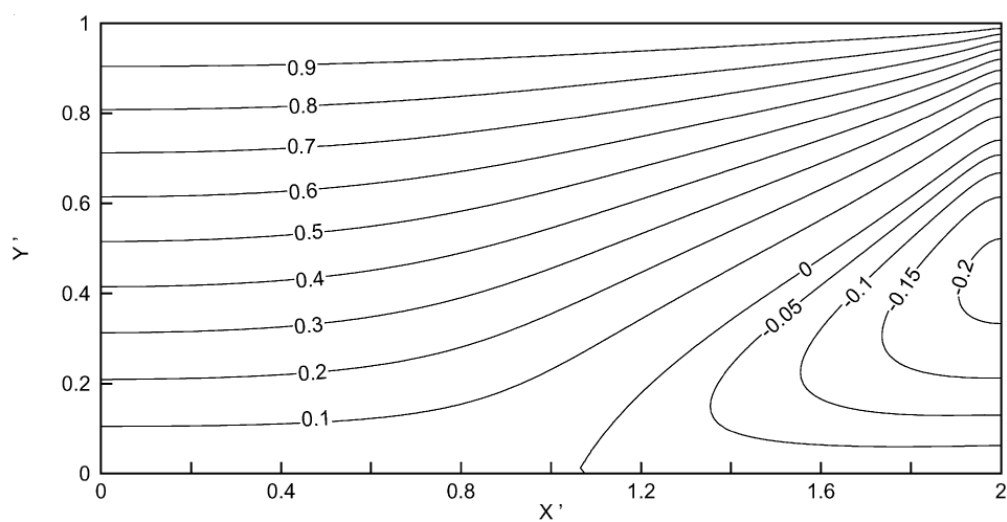


Figura 1.8. Soluzione per la stream-function adimensionale ψ' per il problema di Henry (Gotovac,2003).

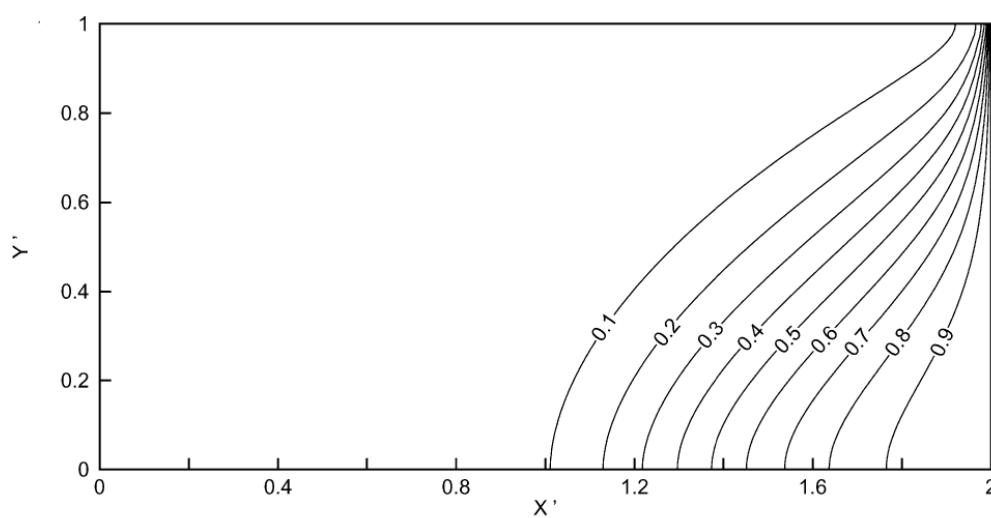


Figura 1.9. Soluzione per la concentrazione adimensionale c' per il problema di Henry (Gotovac, 2003).

Nel corso degli anni il problema di Henry come ora presentato ha subito diverse critiche di seguito riassunte.

- La condizione al contorno nel lato entroterra prescrive il gradiente delle stream-function parallelo al contorno verticale, equazione (1.6.9). Il flusso totale in ingresso è dettato dalla differenza tra il valore della stream-function specificato sul bordo inferiore e superiore del dominio. Questo equivale a specificare un carico idraulico costante, ma incognito ed un flusso totale in ingresso, non conoscendone la distribuzione. Questa condizione al contorno è di difficile implementazione nei codici numerici e viene quindi sostituita con un carico idraulico noto e costante, o con un flusso d'acqua dolce noto in ingresso uniformemente distribuito lungo il contorno. Nessuna delle due condizioni rappresenta però una condizione realistica di campo essendo, in generale, il carico e il flusso maggiore sul fondo rispetto ai valori nella parte superiore (Abarca, 2006).
- La condizione di concentrazione specificata al lato mare, equazione (1.6.10), porta ad una distribuzione delle concentrazioni irrealistica, specialmente nella parte alta del dominio dove generalmente si registra l'accumulo del flusso d'acqua dolce proveniente dall'entroterra e sospinto, per contrasto di densità, verso l'alto dall'acqua salata intrusa. Una condizione al contorno più realistica prevede di *non* specificare direttamente la concentrazione lungo il contorno mare, ma impone che (a) se il flusso di fluido è diretto verso l'esterno del dominio la concentrazione del soluto è dettata dalla risoluzione del problema, (b) se il flusso di fluido è diretto verso l'interno del dominio la concentrazione del soluto coincide con quella dell'acqua salata (Souza, 1987; Frind, 1982).
- Nel problema risolto da Henry (1964) il valore elevato del coefficiente di diffusione molecolare porta ad un valore del numero di Peclet $b = 0.1$ relativamente alto, rendendo, nel suo aspetto generale, la soluzione poco sensibile agli effetti dovuti al contrasto di densità, ovvero la soluzione disaccoppiata dell'equazione del flusso, (1.4.1), e del trasporto, (1.5.1), produce risultati poco differenti da quelli ottenuti con una risoluzione accoppiata del problema (Simpson, 2004), come mostrato in Figura 1.10 dove si riportano le linee ad iso-concentrazione relativa $c(x, y) / c_s = \text{cost}$, con c_s concentrazione dell'acqua di mare, calcolate secondo la soluzione semi-analitica di Henry e

mediante il problema accoppiato per i valori 25%,50%,75% e la iso-concentrazione al 50% per problema disaccoppiato. La conformazione del cuneo salino non differisce in maniera sostanziale risolvendo il problema nelle due configurazioni.

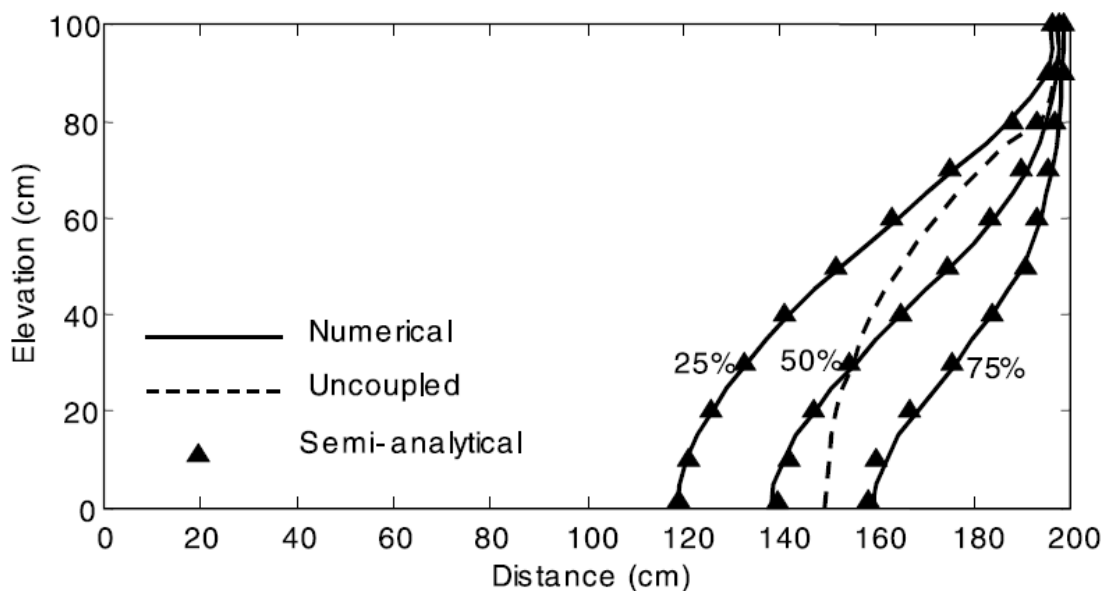


Figura 1.10. Confronto per la distribuzione delle concentrazioni relative per il problema accoppiato e disaccoppiato (Simpson,2004). Per il problema disaccoppiato è riportata la sola linea ad iso-concentrazione al 50%.

1.7 PROBLEMA DI HENRY ANISOTROPO E DISPERSIVO

Abarca (2005, Abarca & Carrera 2007) ha proposto una modifica al problema di Henry nella sua forma originale, introducendo il processo di dispersione meccanica, gli effetti dell'anisotropia della conducibilità idraulica e modificando le condizioni al contorno della concentrazione come evidenziato nel paragrafo precedente.

Il problema di Henry nella configurazione di Abarca può essere considerato più realistico, rispetto alla formulazione originale, alla luce del maggior riscontro con dati di campo e per l'inclusione del processo di dispersione idrodinamica che influenza fortemente la distribuzione dei soluti negli acquiferi costieri. Tuttavia per questa formulazione non esistono soluzioni analitiche (o semi-analitiche) di riferimento. Di seguito si presenta il problema di Henry nella versione modificata da Abarca.

Il dominio considerato è formato da una sezione verticale rettangolare di acquifero confinato omogeneo anisotropo a porosità costante. Un flusso costante di acqua dolce (q_b) è imposto al contorno verticale sul lato entroterra. Un carico costante di acqua salata è imposto sul contorno a lato mare, corrispondente ad una distribuzione idrostatica con densità pari a quella dell'acqua salata. La condizione al contorno a lato mare per il trasporto prevede che se il flusso è entrante nel dominio, la concentrazione è pari a quella imposta per l'acqua salata, se il flusso è uscente la concentrazione è dettata dalla risoluzione del problema. I contorni inferiore e superiore sono impermeabili (Figura 1.11). Il sistema di riferimento bidimensionale è denominato con (x, y) : x -direzione orizzontale ed y -direzione verticale con, origine nell'estremo inferiore sinistro del dominio di calcolo. Le condizioni al contorno sono riassunte in Tabella 1.3.

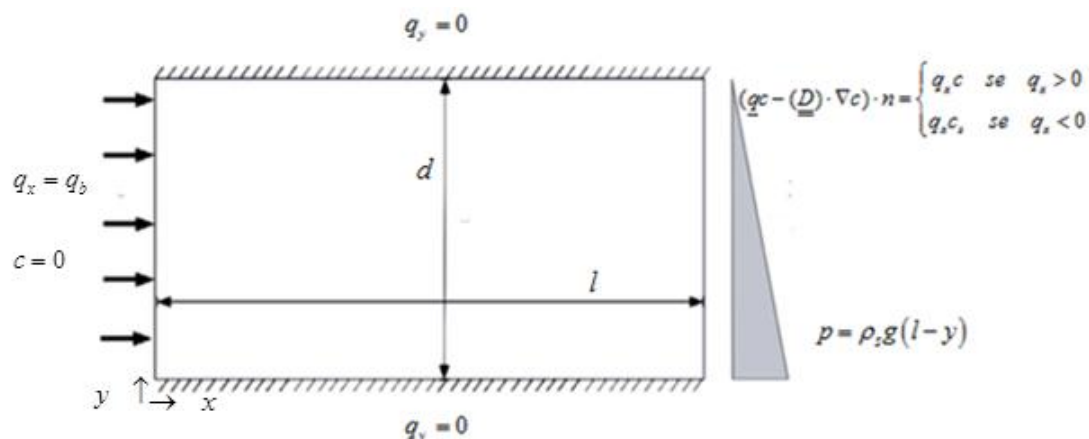


Figura 1.11. Schematizzazione del problema di Henry anisotropo-dispersivo

Tabella 1.3. Condizioni al contorno per il problema di Henry anisotropo-dispersivo

Contorno	Flusso	Trasporto
Entroterra	$q_x = q_b$	$C = 0$
Mare	$p = \rho_s g (d - y)$	$(\underline{q}C - (\underline{D}) \cdot \nabla C) \cdot n = \begin{cases} q_x C & \text{se } q_x > 0 \\ q_x C_s & \text{se } q_x < 0 \end{cases}$
Inferiore	$q_y = 0$	$(\underline{q}C - (\underline{D}) \cdot \nabla C) \cdot n = 0$
Superiore	$q_y = 0$	$(\underline{q}C - (\underline{D}) \cdot \nabla C) \cdot n = 0$

Si riportano di seguito la soluzione del problema di Henry anisotropo-dispersivo, in termini di linee ad iso-concentrazione relativa : $c(x, y) / c_s = \cos t$ e di campo di velocità . In Tabella 1.4 si riportano i valori dei parametri imposti.

Tabella 1.4. Valori dei parametri per il problema di Henry anisotropo-dispersivo

Simbolo	Parametro	valore	Unita
ρ_f	Densità acqua fresca	1000	kg/m ³
ρ_s	Densità acqua salata	1025	kg/m ³
$\frac{\partial \rho}{\partial C}$	Fattore di variazione densità per variazione unitaria della concentrazione	700	kg/m ³
ρ_0	Densità di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	1000	kg/m ³
C_0	Concentrazione di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	0	kg/kg
ε	Porosità	0.35	-
α	Comprimibilità della matrice solida	10 ⁻⁷	(kg/ms ²) ⁻¹
β	Comprimibilità del fluido	4.47*10 ⁻¹⁰	(kg/ms ²) ⁻¹
μ	Viscosità del fluido	0.001	kg/ms
g	Accelerazione di gravità	9.81	m/s ²
k_x	Permeabilità idraulica orizzontale	1.02*10 ⁻⁹	m ²
k_y	Permeabilità idraulica verticale	6.72*10 ⁻¹⁰	m ²
α_L	Dispersività longitudinale	0.1	m
α_T	Dispersività trasversale	0.01	m
d	Dimensione verticale	1	m
l	Dimensione orizzontale	2	m
q_b	Flusso di acqua fresca	6.66*10 ⁻⁵	m/s

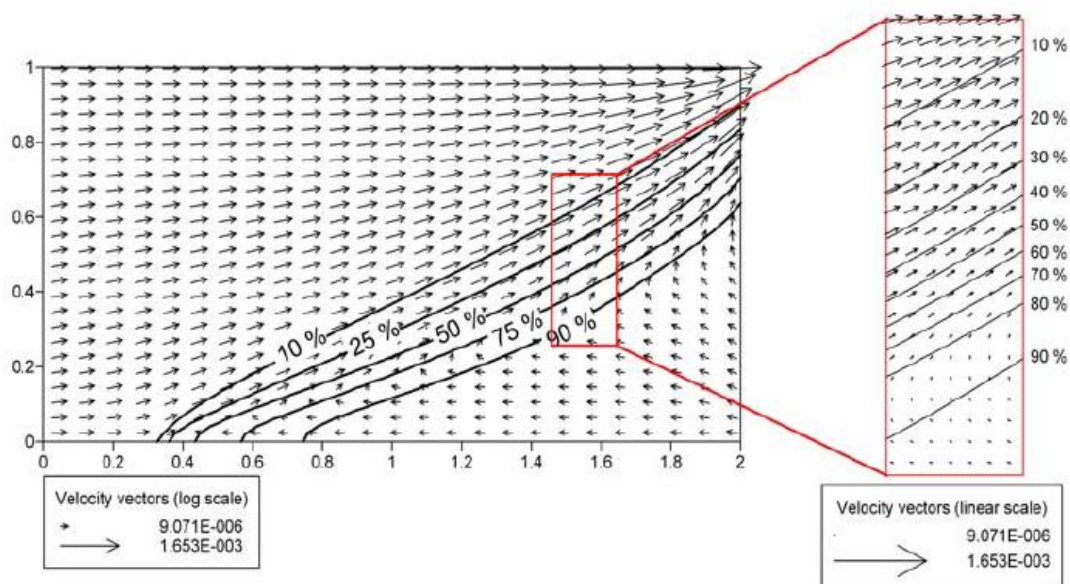


Figura 1.12. Distribuzione delle Iso-concentrazioni e campo di velocità per il problema di Henry anisotropo-dispersivo (Abarca,2005).

Dalla Figura 1.12 si può notare l'iterazione che avviene fra l'acqua dolce e l'acqua salata. Per effetto del contrasto di densità l'acqua dolce defluisce verso il mare in posizione sovrastante all'acqua salata caratterizzata da una maggiore densità. In seguito alla dispersione idrodinamica si genera la zona di transizione delle concentrazioni. Inoltre si può notare come nella zona di transizione le velocità siano principalmente parallele alle linee ad iso-concentrazione mentre siano prevalentemente orizzontali nella parte inferiore del cuneo salino. In generale si osservano velocità d'intensità minore all'interno del cuneo salino rispetto alle velocità che caratterizzano la zona occupata dall'acqua dolce, riflettendo una certa immobilità nella parte inferiore del cuneo. Si nota inoltre come le velocità siano maggiori nella parte alta del dominio in prossimità del lato mare. Questo fenomeno è dovuto all'accumulo del flusso d'acqua dolce proveniente dall'entroterra in questa zona, dove il flusso d'acqua dolce viene sospinto per effetto delle forze di galleggiamento. Osservando il campo di velocità si nota la tipica zona (o cella) di ricircolo: nella parte inferiore si ha l'ingresso di acqua salata secondo gradiente di pressione ed il flusso è principalmente di tipo advettivo; il processo di dispersione e le forze di galleggiamento controllano poi il mescolamento tra acqua salata e dolce (Abarca, 2005). Abarca ha inoltre evidenziato come un aumento della dispersività trasversale produca un 'effetto

di taglio ' sulla configurazione del cuneo, muovendo la zona di dispersione verso mare nella parte inferiore e verso l'entroterra nella parte superiore.

2 **DEFINIZIONE DEL PROBLEMA**

Nell'ambito della tesi si è svolta un'analisi di sensitività globale (GSA) per delle *variabili di stato globali* (vedi paragrafo 2.2) che caratterizzano la conformazione generale del cuneo salino. Lo studio e la definizione di tali grandezze è stato condotto in riferimento al problema di Henry anisotropo-dispersivo proposto da Abarca. La GSA è stata svolta impiegando gli indici di Sobol (IS). Per ricavare gli IS si è sfruttato un modello surrogato : espansione in caos polinomiale (PCE) (vedi capitolo 3). Per la costruzione della PCE è necessario utilizzare un codice numerico che simuli il processo d'intrusione salina in determinate condizioni. Come modello numerico nell'ambito della tesi è stato scelto SUTRA (Voss & Souza,2002).

In questo capitolo viene presentata l'impostazione generale del problema (paragrafo 2.1) e la sua implementazione tramite il codice numerico SUTRA (paragrafo 2.1.1). Vengono poi introdotte le *variabili di stato globali* d'interesse (paragrafo 2.2) ed i parametri considerati nella GSA.

2.1 CONFIGURAZIONE DEL PROBLEMA

Il processo d'intrusione salina è stato studiato con riferimento al problema di Henry anisotropo-dispersivo proposto da Abarca. Tale configurazione è stata scelta alla luce della maggior rappresentatività del processo naturale. Inoltre mediante questa formulazione del problema è possibile valutare gli effetti della dispersione e della variazione delle caratteristiche della permeabilità idraulica in maniera agevole .

Riportiamo ora la configurazione scelta per il problema (vedi paragrafo 1.7 e Figura 2.1):

- Geometria: il dominio considerato è una sezione verticale rettangolare d'acquifero.
- Condizioni al contorno (B.C.) : sul lato entroterra si è imposto un flusso d'acqua fresca. A lato mare si impone un carico costante per il flusso, corrispondente ad una distribuzione idrostatica della pressione nel mare, mentre per il trasporto si sceglie di avere una concentrazione in uscita dal dominio dettata dalla risoluzione del problema mentre qualora il flusso sia diretto dal mare verso l'interno del dominio la concentrazione dei soluti coincide con quella imposta per l'acqua salata. Lungo i contorni inferiore e superiore si impone l'impermeabilità (Tabella 2.1).
- Condizioni Iniziali (C.I.): Nelle analisi svolte è necessario risolvere flusso e trasporto in maniera accoppiata, questo implica la scelta di condizioni iniziali anche se l'oggetto dello studio è la configurazione stazionaria. Come condizioni iniziali per il flusso si è scelta una distribuzione idrostatica di pressione, per il trasporto si impone concentrazione dei soluti nulla in tutto il dominio (Tabella 2.2).
- Tipologia del problema: Si analizza il processo allo stato stazionario ed in condizioni isoterme a 20°C. Per ciò che riguarda i processi di trasporto dei soluti si considerano i meccanismi advettivi e dispersivi, non si considera la diffusione molecolare. Tale scelta è stata giustificata nel paragrafo 1.7.

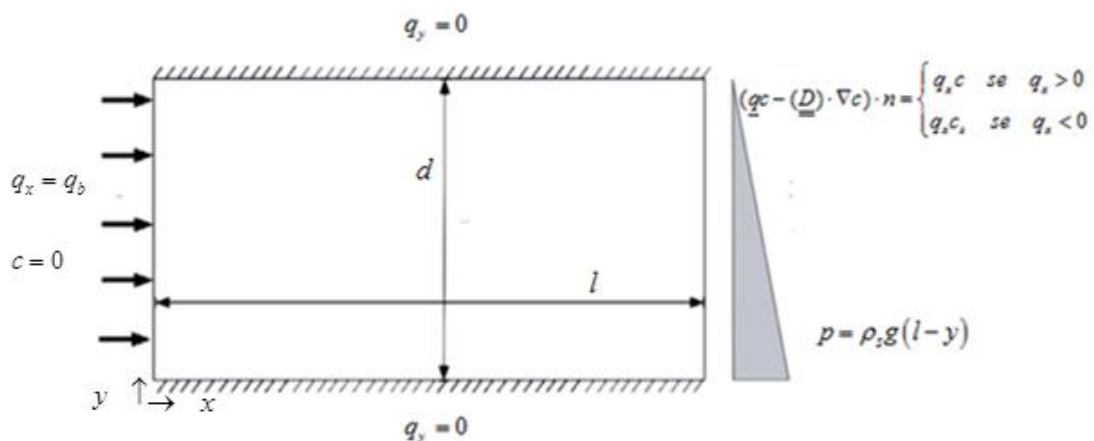


Figura 2.1. Schematizzazione del dominio e delle condizioni al contorno

Tabella 2.1. Condizioni al contorno scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Contorno	Flusso	Trasporto
Entroterra	$q_x = q_b$	$C = 0$
Mare	$p = \rho_s g (d - y)$	$(qC - (D) \cdot \nabla C) \cdot n = \begin{cases} q_x C & \text{se } q_x > 0 \\ q_x C_s & \text{se } q_x < 0 \end{cases}$
Inferiore	$q_y = 0$	$(qC - (D) \cdot \nabla C) \cdot n = 0$
Superiore	$q_y = 0$	$(qC - (D) \cdot \nabla C) \cdot n = 0$

Tabella 2.2. Condizioni iniziali scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Flusso	Trasporto
$p = \rho_f g (d - y) \quad \forall x$	$C = 0 \quad \forall (x, y)$

Tabella 2.3. Geometria del dominio scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Simbolo	Grandezza	Valore	Unità
d	Dimensione verticale	1	m
l	Dimensione orizzontale	2	m

2.1.1 IMPLEMENTAZIONE IN SUTRA

Il problema è stato implementato mediante il codice numerico SUTRA (Voss & Souza,2002). SUTRA (Saturated-Unsaturated TRANsport) permette di simulare il flusso ed il trasporto di soluti ed il trasporto d'energia in condizioni di saturazione e non completa saturazione. I soluti possono essere soggetti a diverse tipologie di reazioni chimiche.

Il codice impiega una discretizzazione spaziale agli elementi finiti ed una discretizzazione temporale basata su differenze finite all'indietro con uno schema implicito. SUTRA consente di simulare i processi di flusso e trasporto di soluti considerando le variazioni di densità del fluido per effetto della concentrazione di soluti o per effetto della temperatura.

SUTRA è stato utilizzato nello studio di problemi a densità variabile, compresi fenomeni di SWI, da parte di diversi autori quali Bobba (2002,2000) , Simmons et al (2002) e Weatherill et al (2004).

Nell'ambito della tesi si considerano il processo di flusso in mezzo saturo e il trasporto dei soluti disciolti, senza considerare reazioni di alcun genere, in condizioni isoterme. Le variazioni di densità sono legate alla sola concentrazione. Il dominio di calcolo è una sezione verticale bidimensionale con lunghezza pari a 2m e altezza 1m. La griglia di calcolo utilizzata è regolare con elementi quadrilateri.

Per maggiori dettagli sulle metodologie implementate in SUTRA si rimanda a Voss e Souza (2002).

Per la scelta della discretizzazione spaziale si sono seguite le linee guide riportate in Voss e Souza (2002).La stabilità della soluzione rispetto alla discretizzazione spaziale è esprimibile mediante le relazioni:

$$Pe_m = \frac{\Delta L_L}{\alpha_L} \leq 4 \quad (2.1.1)$$

Dove Pe_m è il numero di Peclet della griglia di calcolo e ΔL_L è la lunghezza dell'elemento nella direzione parallela al flusso. La seconda relazione è:

$$\Delta L_T \leq \alpha_T \quad (2.1.2)$$

Dove ΔL_L è la lunghezza dell'elemento nella direzione trasversale al flusso. Per la discretizzazione spaziale si fa riferimento alla dimensione degli elementi nella

direzione orizzontale ΔL_x e verticale ΔL_y , che di fatto non coincidono sempre con la direzione trasversale e parallela al flusso. La stabilità della soluzione è comunque stata verificata. I valori adottati sono riportati in Tabella 2.4. Le due condizioni (2.1.1),(2.1.2) scongiurano fenomeni di instabilità numerica, rappresentata da una configurazione delle iso-concentrazioni oscillanti ed fisicamente inesatte. Maggiori dettagli sulla scelta della discretizzazione spaziale sono riportati nell'appendice A.

Per quanto riguarda la discretizzazione temporale non sono richieste condizioni particolare, essendo lo schema alle differenze finite implicito[Quarteroni,2006]. Tuttavia non è possibile scegliere un intervallo temporale del passo di calcolo, Δt 'troppo grande' (Liu ,2006) . La definizione di 'troppo grande' deve essere determinata per tentativi. Una condizioni di riferimento, valida per schemi alle differenze finite espliciti, è dettata dal numero di Courant-Friedrichs-Lewy (CFL):

$$\Delta t \leq \frac{\Delta L}{\sup(v)} \quad (2.1.3)$$

La condizioni (2.1.3) risulta essere molto restrittiva per i casi in esame ed non è comunque vincolante. La condizione è fortemente vincolante a causa del valore della velocità massima che si instaura nella parte superiore del dominio dove si concentra il flusso di acqua fresca uscente verso il mare. La condizioni CFL è stata impiegata per avere un riferimento dell'ordine di grandezza da imporre su Δt considerando come riferimento l'ordine di grandezza della velocità media nel dominio. Il valore adottato è riportato in Tabella 2.4. Maggiori dettagli sull'intervallo temporale sono riportati nell'appendice A.

Tabella 2.4. Discretizzazione numerica spaziale e temporale

Simbolo	Grandezza	Valore
ΔL_x	Dimensione elemento in direzione x	$7.8125 \cdot 10^{-3}$ m
N_x	Numero di elementi in direzione x	256
$\min(\alpha_L)$	Minimo valore della dispersività longitudinale	0.1 m
Pe_m	Numero di Peclet per la griglia	$7.8125 \cdot 10^{-2} \leq 4$
ΔL_y	Dimensione elemento in direzione y	$7.8125 \cdot 10^{-3}$ m
N_y	Numero di elementi in direzione y	128
$\min(\alpha_T)$	Minimo valore della dispersività trasversale	0.01 m
$\Delta L_y \leq \min(\alpha_T)$	Condizione di stabilità	$7.8125 \cdot 10^{-3} < 0.01$
Δt	Passo temporale	60 s
$O(\bar{v})$	Ordine di grandezza della velocità media nel dominio	10^{-4} m/s
CFL	Condizione di CFL	$\Delta t < 78s$

Tutte le simulazioni svolte nell'ambito della tesi sono state discretizzate con una griglia regolare ad elementi quadrilateri con 128 elementi in direzione verticale e 256 elementi in direzione orizzontale, per un dominio di 2m in orizzontale e 1m in verticale. Il passo temporale è stato imposto pari a 60 secondi per tutte le simulazioni svolte nell'ambito del lavoro di tesi.

2.2 VARIABILI DI STATO GLOBALI D'INTERESSE

Considerando la generica soluzione del problema di Henry nella formulazione proposta da Abarca è possibile definire in maniera agevole delle *variabili di stato globali* che caratterizzano il sistema nel suo complesso, fornendo utili informazioni sulla conformazione del cuneo salino che si instaura. Le *variabili di stato globali* introdotte di seguito sono state l'oggetto dell'analisi di sensitività svolta nell'ambito della tesi. Volendo indagare quali siano i parametri chiave nei processi di SWI si è fatto riferimento a grandezze in grado di catturare gli aspetti salienti della conformazione del cuneo salino: *variabili di stato globali* appunto. Inoltre l'approccio mediante grandezze globali è stato adottato alla luce dell'impossibilità, specialmente con riferimento a casi reali, di determinare punto per punto il valore della concentrazione (Boso,2013). Di seguito si riportano le *variabili di stato globali* scelte.

- L_D : Penetrazione della iso-concentrazione al 50% misurata sul fondo dell'acquifero dal lato mare verso l'entroterra (Figura 2.2). Questa grandezza identifica l'estensione del cuneo d'acqua salata.
- W_D :Larghezza media della zona di transizione delle concentrazioni, $WD = \overline{wmz(x)}$. Il valore di $wmz(x)$ (width of mixing zone) è calcolato come distanza lungo la direzione verticale tra le iso-concentrazioni al 75% e 25% nello spazio del dominio compreso tra $0.2L_D$ e $0.8L_D$. Nel caso in cui l'iso-concentrazione al 75% termini ad una distanza inferiore a $0.2L_D$ (come nel caso rappresentato in Figura 2.2) $wmz(x)$ è definito come la distanza lungo la verticale tra la iso-concentrazione al 25% e il fondo del dominio. La zona di transizione delle concentrazioni identifica l'entità della dispersione dei soluti.

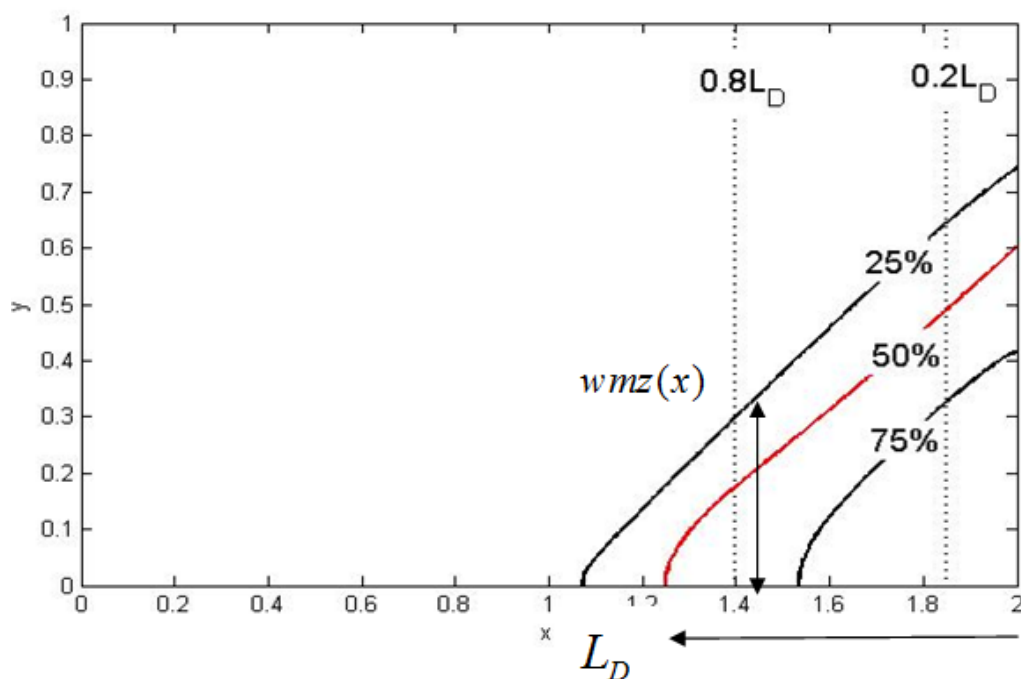


Figura 2.2 Descrizione schematica delle grandezze L_D e $wmz(x)$.

- L_y : posizione verticale della iso-concentrazione al 50% sul contorno mare. Questa grandezza permette di caratterizzare la zona di scambio tra falda e mare, fornendo informazioni su quale sia la profondità del cuneo salino.
- L_s : distanza tra le iso-concentrazione al 20% e 80% calcolata sul fondo del dominio (Figura 2.3). Per il calcolo di questa grandezze si è preferito fare riferimento alle iso-concentrazioni al 20% ed 80% alla luce della maggior variabilità esibita da L_s così definito invece che considerare le iso-concentrazioni al 25% e 75%. Tramite L_s si vuole caratterizzare la dispersione dei soluti all'estremità del cuneo salino intruso.
- AC : valore adimensionale dell'area di dominio caratterizzata da una concentrazione relativa superiore al 5%. Il valore AC fornisce un'indicazione di quale sia l'estensione del corpo principale del cuneo d'acqua contaminata.

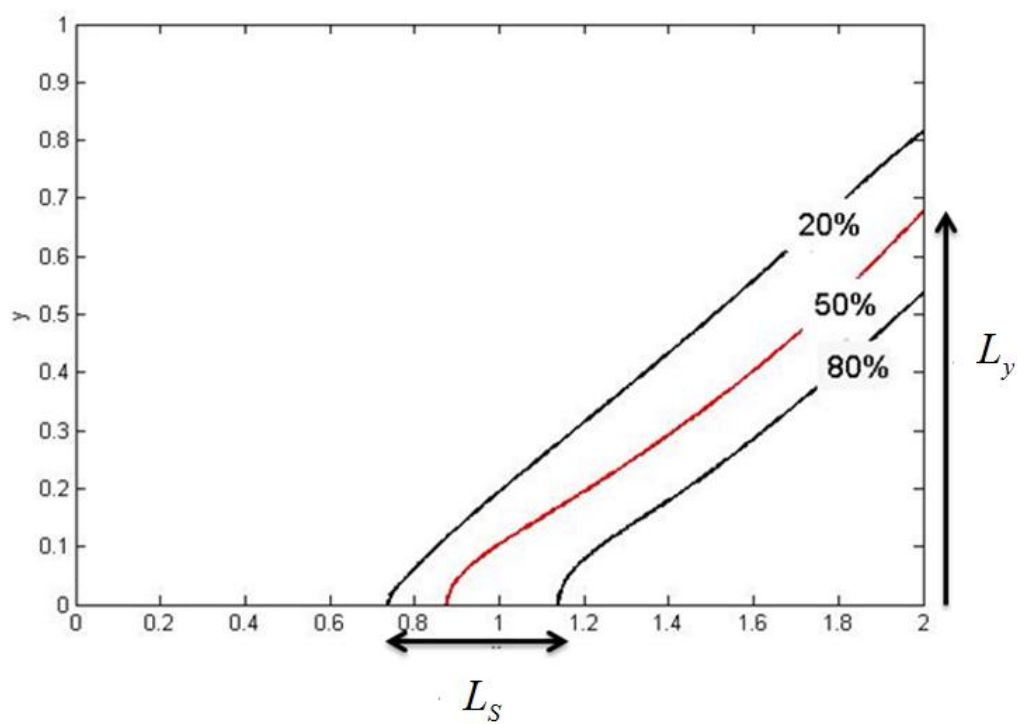


Figura 2.3. Descrizione schematica delle grandezze L_S ed L_y .

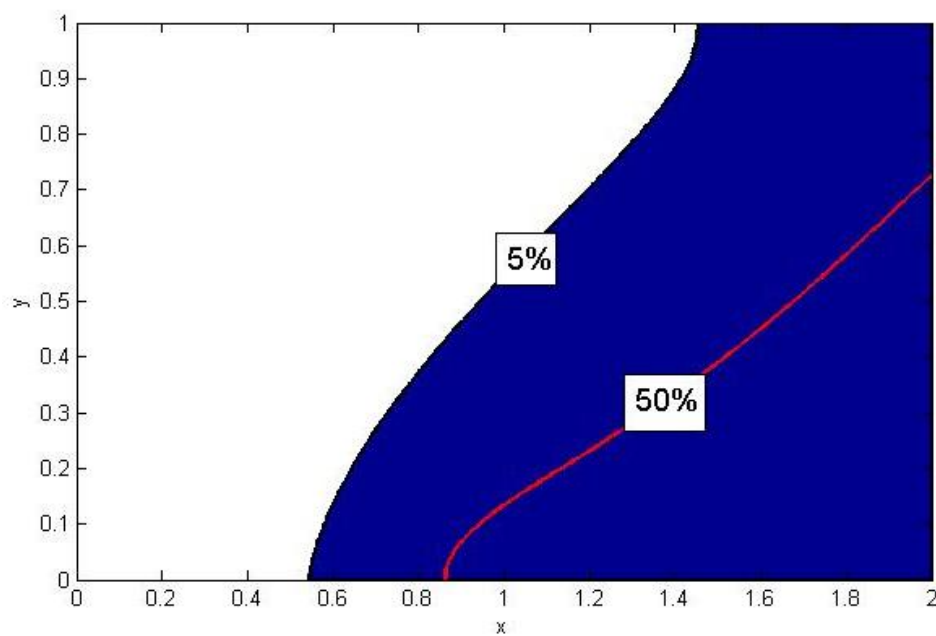


Figura 2.4. Rappresentazione schematica della grandezza AC

Le grandezze ora esposte sono state scelte per la loro rappresentatività nel definire l'aspetto generale del cuneo salino. Inoltre queste grandezze hanno un indubbio contenuto informativo riuscendo a rispondere a domande tecniche di interesse pratico quali: per quanto si estende il cuneo salino? Che andamento ha la iso-concentrazione al 50% ?Che dimensioni ha la zona di transizione?...

2.3 LA SCELTA DEI PARAMETRI

In questo paragrafo vengono analizzati i vari parametri, condizioni al contorno, condizioni iniziali e condizione geometriche, coinvolte nel problema d'intrusione salina, descritto nel paragrafo 2.1 ,evidenziando quali sono stati considerati costanti, quindi non affetti da incertezza , e per quali si è assunta una variabilità. I parametri incerti sono i parametri per i quali si è condotta la GSA delle *variabili di stato globali*.

Ricordando la legge di Darcy (1.2.4) , l'equazione costitutiva del fluido (1.3.1), l'equazione di continuità (1.4.6) e l'equazione del trasporto advettivo-dispersivo nel mezzo poroso (1.5.1), si può definire per ogni *variabile di stato globale* Φ d'interesse (L_T, WD, L_y, L_s, AC) (vedi paragrafo 2.2), la generica relazione:

$$\Phi = F(\rho_f, \rho_s, c_s, \frac{\partial \rho}{\partial C}, \rho_0, C_0, \mu, k_x, k_y, \alpha_L, \alpha_T, \varepsilon, S_{op}, B.C., C.I., d, l) \quad (2.3.1)$$

Dove F rappresenta il generico legame funzionale tra Φ e le grandezze caratteristiche del problema indicate.

Nell'analisi vengono assunti costanti i seguenti fattori. I valori assunti sono riportati in Tabella 2.5.

- ρ_f : densità dell'acqua fresca, tale parametro non presenta sensibili variazioni nelle condizioni isoterme considerate
- ρ_s, C_s : densità e concentrazione di soluti per l'acqua marina salata sono stati assunti costanti alla luce della scarsa variabilità manifestata in natura [Abarca 2005].
- $\frac{\partial \rho}{\partial C}, \rho_0, C_0$: con questo insieme di parametri si definisce l'equazione costitutiva del fluido (1.3.1) . In casi di intrusione salina, dove il contrasto di densità tra acqua marina e acqua dolce non è elevato, si ritiene valida la semplice relazione lineare espressa nella (1.3.1) (Abarca,2007).
- μ : viscosità del fluido. La viscosità del fluido non subisce variazioni sensibili per effetto della concentrazione dei soluti disciolti (Landman,2005).
- S_{op} : Storativity specifica per la pressione, equazione (1.4.3). La Storativity è un parametro fondamentale nell'evoluzione del processo in regime transitorio. Si è

scelto di fissarne il valore essendo interessati alla configurazione in condizioni stazionarie. Si noti che nella definizione della Stortivity mediante l'equazione (1.4.3) sono coinvolti la comprimibilità del fluido β , la comprimibilità della matrice solida α e la porosità ε . Di fatto si sono fissati questi ultimi parametri.

- g : accelerazione di gravità.
- d, l : dimensioni del dominio di calcolo. La dimensione verticale del dominio d influenza quella che è la condizione al contorno del flusso lato mare, determinando il carico idrostatico imposto. Nell'ambito della tesi è stata imposta pari ad 1 metro. Per quanto riguarda la dimensione orizzontale del dominio l si è scelto di fissarne il valore a 2 metri. Tale scelta permette di contenere i costi computazionali. I valori dei restanti parametri costanti e dei parametri variabili sono stati scelti anche in funzione del valore di l , assicurandosi che l'intrusione salina si sviluppasse nel dominio considerato. Le dimensioni scelte sono rappresentative della scala d'osservazione del fenomeno a livello sperimentale.
- *B.C.*: condizioni al contorno. Le varie simulazioni numeriche sono state elaborate assicurandosi che la condizione al contorno imposta sul lato entroterra consentisse uno sviluppo rappresentativo dell'intrusione salina. Un valore elevato del flusso d'acqua dolce q_b porta ad un dilavamento totale del dominio, riducendo fortemente l'intrusione. Un valore ridotto di q_b genera un cuneo salino troppo esteso per il dominio di calcolo scelto, la configurazione che si ottiene non è quindi rappresentativa del processo di SWI. Il valore del flusso d'acqua dolce è stato fissato a $6.6 \cdot 10^{-5} \text{m/s}$.
- *C.I.*: condizioni iniziali. Per il flusso si è imposto in tutto il dominio una distribuzione idrostatica della pressione con densità di riferimento quella d'acqua dolce. Per il trasporto si è imposta una concentrazione nulla dei soluti in tutto il dominio. Le condizioni iniziali non hanno un particolare interesse per lo studio effettuato nell'ambito della tesi in quanto si è indagata la configurazione del cuneo salino in condizioni stazionarie.

Si precisa che l'insieme di parametri ora elencati ha certamente una sua variabilità nei sistemi naturali. Tuttavia nell'ambito della tesi si è scelto di fissarne il valore, o la tipologia per le B.C e le C.I., per concentrare l'attenzione su restanti parametri affetti da

una maggiore variabilità nei sistemi naturali. Un possibile sviluppo consiste nell'aggiungere i parametri, le B.C. e le C.I. precedentemente elencati nella GSA per le *variabili di stato globali*. Di seguito si riportano i valori dei parametri assegnati costanti e le condizioni al contorno ed iniziali scelte.

Tabella 2.5. Parametri a valore fissato nell'analisi di sensitività globale

Simbolo	Parametro	valore	Unita
ρ_f	Densità acqua fresca	1000	kg/m ³
ρ_s	Densità acqua salata	1025	kg/m ³
$\frac{\partial \rho}{\partial C}$	Fattore di variazione densità per variazione unitaria della concentrazione	700	kg/m ³
ρ_0	Densità di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	1000	kg/m ³
C_0	Concentrazione di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	0	kg/kg
μ	Viscosità del fluido	0.001	kg/ms
ε	Porosità	0.35	-
α	Comprimibilità della matrice solida	10 ⁻⁷	(kg/ms ²) ⁻¹
β	Comprimibilità del fluido	4.47*10 ⁻¹⁰	(kg/ms ²) ⁻¹
μ	Viscosità del fluido	0.001	kg/ms
g	Accelerazione di gravità	9.81	m/s ²

Tabella 2.6. Condizioni al contorno scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Contorno	Flusso	Trasporto
Entroterra	$q_x = q_b$	$C = 0$
Mare	$p = \rho_s g (d - y)$	$(\underline{q}C - (\underline{D}) \cdot \nabla C) \cdot n = \begin{cases} q_x C & \text{se } q_x > 0 \\ q_x C_s & \text{se } q_x < 0 \end{cases}$
Inferiore	$q_y = 0$	-
Superiore	$q_y = 0$	-

Tabella 2.7. Condizioni iniziali scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Flusso	Trasporto
$p = \rho_f g (d - y) \quad \forall x$	$C = 0 \quad \forall (x, y)$

Tabella 2.8. Geometria del dominio scelte nell'ambito dell'analisi di sensitività

Simbolo	Grandezza	Valore	Unità
d	Dimensione verticale	1	m
l	Dimensione orizzontale	2	m

I parametri assunti incerti nell'ambito del lavoro di tesi sono riportati di seguito. Questi parametri sono stati scelti per l'importanza chiave che assumono nei processi di flusso e trasporto per gli acquiferi e quindi nelle problematiche d'intrusione salina. I parametri scelti inoltre manifestano una elevata variabilità per i sistemi naturali e sono definibili solamente attraverso misure di campo.

Parametri assunti incerti:

- k_x : permeabilità idraulica nella direzione orizzontale. La permeabilità idraulica è un parametro che esibisce una forte variabilità nei sistemi naturali e riveste un ruolo chiave nei processi di flusso e trasporto per gli acquiferi. Inoltre la sua determinazione avviene sempre attraverso misure indirette e dipende dalla scala di misura (Bear, 2010).
- r_k : rapporto d'anisotropia.
- α_L e α_T dispersività longitudinale e trasversale. Questi parametro svolgono un ruolo chiave nei processi di trasporto, possono essere determinati sperimentalmente ma sono in generale caratterizzati da elevate incertezza.

In Tabella 2.9 sono riportati gli intervalli di variazione imposti per i quattro parametri assunti incerti. La scelta degli intervalli è stata dettata dalle seguenti motivazioni:

- Il rapporto d'anisotropia è generalmente compreso tra zero ed uno e la dispersività trasversale assume generalmente valori minori o uguali alla dispersività longitudinale $\alpha_T \leq \alpha_L$ (Bear,2010).
- Considerazioni riguardanti il costo computazionale e la qualità delle simulazioni: assumendo sempre il dominio di dimensioni $d = 1m, l = 2m$ si è

voluto evitare simulazioni in cui l'intrusione fosse o troppo modesta o eccessiva. Di fatto per consentire uno sviluppo del cuneo salino, nelle configurazioni con eccessiva intrusione, si dovrebbe incrementare la dimensione orizzontale del dominio. Questa strategia implica però un incremento dei costi computazionali.

- La permeabilità idraulica è stata variata all'interno di un campo di valori tipici per materiale granulare (Figura 2.5). I coefficienti di dispersività variano in un intervallo di valori elevati, al fine di evidenziare al meglio il ruolo svolto nel processo d'intrusione analizzato .

$-\log_{10} \cdot K(\text{cm}/\text{sec})$	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Permeability	Pervious			Semipervious				Impervious						
Aquifer	Good				Poor				None					
Soils	Clean gravel		Clean sand or sand and gravel			Very fine sand, silt, loess, loam, solonetz								
				Peat		Stratified clay		Unweathered clay						
Rocks					Oil rocks		Sandstone		Good limestone, dolomite		Breccia, granite			
$-\log_{10} \cdot k(\text{cm}^2)$	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
$\log_{10} k(\text{md})$	8	7	6	5	4	3	2	1	0	-1	-2	-3	-4	-5

Figura 2.5. Valori caratteristici della permeabilità

Tabella 2.9. Intervalli di variazione per i parametri incerti utilizzati nell'analisi di sensitività globale, mancano le unità di misura

Simbolo	Parametro	minimo	massimo
Ω_{k_x}	Permeabilità idraulica orizzontale	$0.825 \cdot 10^{-9} \text{m}^2$	$1.375 \cdot 10^{-9} \text{m}^2$
Ω_{r_k}	Rapporto d'anisotropia	0	1
Ω_{α_L}	Dispersività longitudinale	0.1 m	0.3 m
Ω_{α_T}	Dispersività trasversale	0.01 m	0.1 m

L'analisi di sensitività globale mediante gli indici di Sobol è stata condotta per le *variabili di stato globali* L_T, WD, L_y, L_z, AC considerando come affetti da incertezza i parametri $k_x, r_k, \alpha_L, \alpha_T$. Con il simbolo $\Omega_{parametro}$ si è indicato l'intervallo di variazione assunto per il parametro incerto indicato.

3 ANALISI DI SENSITIVITA'

L'analisi di sensitività (SA, Sensitivity Analysis) di un modello quantifica l'importanza relativa di ogni parametro in input sulla risposta fornita.

Il seguente capitolo stato scritto in collaborazione con Ivo Colombo nell'ambito della tesi ' Modellazione inversa di processi di compattazione geochimica in bacini sedimentari'.

I metodi di analisi della sensitività sono classificati in due categorie (Sudret,2008; Saltelli,2006) :

- Analisi di sensitività locale (LSA, *Local Sensitivity Analysis*) : esprime la variazione della risposta, nell'intorno di un suo valore prefissato, rispetto ai parametri in input.
- Analisi di sensitività globale (GSA, *Global sensitivity Analysis*): esprime l'incertezza della risposta dovuta all'incertezza dei parametri in input, considerandoli singolarmente o nelle loro mute iterazioni.

La GSA è uno strumento utile nello studio di un modello matematico nel suo complesso. In letteratura sono disponibili differenti metodi per effettuare la GSA. In termini generali possono essere suddivisi in due categorie (Sudret,2008) :

- *Metodi basati sulla regressione* : I coefficienti di regressione standardizzati (SRC) sono basati sulla regressione lineare tra il vettore di dati in input e la risposta. I coefficienti di correlazione di Pearson misurano l'effetto di ogni variabile in ingresso in termini di correlazione lineare con la risposta del modello. La significatività di questi coefficienti è alta se esiste un legame del

tipo lineare tra gli input e la risposta, i.e. un coefficiente di determinazione R^2 prossimo ad uno.

- *Metodi basati sulla varianza:* Questi metodi mirano alla decomposizione della varianza della risposta come somma di contributi dovuti alle singole variabili in input e le loro mutue interazioni. Questi metodi sono anche detti tecniche ANOVA, 'ANalysis of VAriance'. Gli indici di Sobol (IS) appartengono a tali metodi e mirano a determinare la sensitività per modelli non strettamente lineari (Sobol 1993, Sobol 2001, Sobol 2005). Solitamente il calcolo di tali indici richiede l'impiego di tecniche Monte Carlo dall'elevato costo computazionale. Un'ulteriore metodo per l'ANOVA è il FAST (Fourier amplitude sensitivity test) (Cukier 1978, Saltelli 1999).

Generalizzando si può pensare ad un modello come : $Y = f(X)$, dove $X = \{x_1, x_2, \dots, x_d\}$ sono i parametri in input considerati come variabili aleatorie indipendenti, f è una funzione deterministica (e.g. sistema di equazioni differenziali) ed Y è il risultato scalare del modello. L'analisi di sensitività globale non prevede nessuna distinzione sui valori particolari assunti dai parametri in input ma effettua un'analisi della varianza della risposta Y basandosi su tutto il range di variazione esplorato per il vettore dei parametri X .

Gli indici di Sobol forniscono uno strumento efficace per la GSA riuscendo a scomporre la varianza della risposta nei vari contributi dovuti ai parametri in input. Il calcolo degli indici di Sobol può essere effettuato utilizzando una espansione generalizzata in caos polinomiale (Polynomial chaos expansion, PCE) (Sudret, 2008; Le Maître, 2010) della risposta del sistema, in funzione dei parametri in input. L'utilizzo di una PCE generalizzata permette :

- La costruzione di un modello surrogato. Il modello surrogato opportunamente costruito, permette di analizzare grandezze scalari, inerenti al sistema in esame, in funzioni di un set di parametri definito con costi computazionali ridotti.
- Gli indici di Sobol possono essere ricavati analiticamente mediante un'opportuna manipolazione dei coefficienti della PCE (Crestaux, 2009). Il

calcolo degli indici di Sobol sfruttando la PCE ha costi computazionali ridotti.

Gli oneri computazionali maggiori risiedono nel calcolo dei coefficienti della PCE essendo questi legati ad un integrale pluridimensionale, dettato dai parametri in input coinvolti . Per la valutazione di questo integrale è necessario sfruttare il modello matematico-numerico ‘completo’ scelto nell’ambito dello studio (SUTRA nella tesi) per un ben determinato numero di volte. La determinazione dei coefficienti della PCE nell’ambito della tesi è stata effettuata mediante l’uso di interpolazione polinomiale su *sparse grids* riducendo il costo computazionale rispetto ad una metodologia Monte Carlo standard. (Baeck et al,2010; Baeck et al,2011; Le Maitre,2010).

Di seguito si riporta una breve introduzione alla teoria matematica per l’analisi della varianza globale mediante gli indici di Sobol, l’espansione in caos polinomiale e il calcolo dei coefficienti utilizzando le *sparse grids*.

La metodologia qui introdotta è implementata in un codice numerico creato presso il MOX, Politecnico di Milano (Baeck et al,2011), attraverso il quale è possibile ottenere le *sparse grids*, in grado di ottimizzare il numero di punti di collocazione necessari per dei coefficienti della PCE. Il codice permette inoltre di costruire l’espansione in caos polinomiale, PCE, ed il calcolo degli indici di Sobol ricercati.

3.1 INDICI DI SOBOL

Si consideri un modello matematico con d parametri in entrata, contenuti in un vettore \vec{x} ed una risposta scalare y :

$$y = f(\vec{x}), \quad \vec{x} \in \Omega^d \quad (3.1.1)$$

dove Ω^d è definito come lo spazio dei parametri $\Omega^d = \{\vec{x} : 0 \leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, d\}$. La decomposizione di Sobol (2001) di $f(\vec{x})$, espressa tramite delle sommatorie è :

$$f(x_1, \dots, x_d) = f_0 + \sum_{i=1}^d f_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{1, \dots, d}(x_1, \dots, x_d) \quad (3.1.2)$$

dove f_0 è una costante e l'integrale di ogni sommatoria $\int_0^1 f_{i_1, \dots, i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) \cdot dx_{i_k} = 0$ per $1 \leq k \leq s$.

Le proprietà della decomposizione di Sobol (3.1.2) sono:

I. La sommatoria della decomposizione contiene $\sum_{j=1}^n \binom{n}{j} = 2^n - 1$ termini;

II. La costante f_0 indica il valore medio della funzione $f_0 = \int_{K^n} f(\vec{x}) \cdot dx_1 \cdot \dots \cdot dx_n$;

III. Le sommatorie sono tra loro ortogonali,

ossia $\int_{\Omega^d} f_{i_1, \dots, i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) \cdot f_{j_1, \dots, j_t}(x_{j_1}, \dots, x_{j_t}) \cdot d\vec{x} = 0$, per

$$\{x_{i_1}, \dots, x_{i_s}\} \neq \{x_{j_1}, \dots, x_{j_t}\}.$$

Date le ipotesi precedenti si può dimostrare che la decomposizione è unica se $f(\vec{x})$ è integrabile in Ω^d . In più i termini della decomposizione possono essere derivati analiticamente. Il termine uni-variato è:

$$f_i(x_i) = \int_{\Omega^{d-1}} f(\vec{x}) \cdot d\vec{x}_{-i} - f_0 \quad (3.1.3)$$

In questa espressione la notazione $\int_{\Omega^{d-1}} d\vec{x}_{-i}$ indica l'integrazione su tutte le variabili

tranne x_i . Analogamente il termine bi-variato è:

$$f_{ij}(x_i, x_j) = \int_{\Omega^{d-2}} f(\vec{x}) \cdot d\vec{x}_{-\{ij\}} - f_i(x_i) - f_j(x_j) - f_0 \quad (3.1.4)$$

Nuovamente $\int_{\Omega^{d-2}} d\vec{x}_{-\{ij\}}$ indica l'integrazione su tutte le variabili tranne x_i ed x_j .

Seguendo il medesimo procedimento enunciato nella (3.1.4) ogni sommatoria $f_{i_1, \dots, i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s})$ può essere scritta come differenza tra integrali multidimensionali e sommatorie di ordine inferiore.

Si ipotizzi ora che i parametri in input siano variabili aleatorie indipendenti uniformemente distribuite in $[0,1]$:

$$\vec{x} = \{x_1, \dots, x_d\}, \quad x_i \sim \mathfrak{U}(0,1), i = 1, \dots, d \quad (3.1.5)$$

Come conseguenza, il modello di risposta $y = f(\vec{x})$ è una variabile casuale, la cui varianza D è data da:

$$D = \text{Var} \left[f(\vec{X}) \right] = \int_{K^n} f^2(\vec{x}) \varphi_d(\vec{x}) d\vec{x} - f_0^2 \quad (3.1.6)$$

Dove $\varphi_d(\vec{x})$ è la distribuzione di probabilità definita dal prodotto delle distribuzioni di probabilità delle singole variabili indipendenti \vec{x} .

È possibile decomporre la varianza totale come segue:

$$D = \sum_{i=1}^n D_i + \sum_{1 \leq i < j \leq n} D_{ij} + \dots + D_{1,2,\dots,n} \quad (3.1.7)$$

dove i contributi parziali sono definiti nella seguente espansione:

$$D_{i_1, \dots, i_s} = \int f_{i_1, \dots, i_s}^2(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_1}, \dots, dx_{i_s}, 1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq n, s = 1, \dots, n \quad (3.1.8)$$

Gli indici di Sobol sono definiti come:

$$S_{i_1, \dots, i_s} = \frac{D_{i_1, \dots, i_s}}{D} \quad (3.1.9)$$

Per definizione e ricordando la (3.1.2), gli indici soddisfano la seguente equazione:

$$\sum_{i=1}^n S_i + \sum_{1 \leq i < j \leq n} S_{ij} + \dots + S_{1,2,\dots,n} = 1 \quad (3.1.10)$$

Ogni indice S_{i_1, \dots, i_s} è una misura di sensitività che descrive la quota parte della varianza totale rispetto al parametro in considerazione, ed è causata dalle incertezze nel set dei parametri in entrata $\{i_1, \dots, i_s\}$.

Gli indici del primo ordine S_i valutano l'influenza di ogni parametro preso singolarmente. Gli indici di ordine superiore valutano invece in maniera combinata gli effetti dei vari parametri.

Inoltre si definiscono gli indici di sensitività totale, S_{T_i} , che raggruppano la quota parte di varianza attribuibile ad ogni singolo parametro, preso sia singolarmente che in combinazione con gli altri:

$$S_{T_i} = \sum_{J_i} D_{i_1, \dots, i_s} \quad (3.1.11)$$

Gli indici di Sobol sono noti per essere dei buoni descrittori della sensitività del modello rispetto ai suoi parametri in input, in quanto non viene ipotizzata alcun tipo di linearità o monotonia nel legame funzionale che lega la risposta ai parametri stessi (Saltelli ,2006). Laddove non siano disponibili espressioni analitiche della risposta, la descrizione completa degli indici di Sobol richiede la valutazione di 2^d integrali Monte Carlo. Tale operazione risulta spesso irrealizzabile con le risorse computazionali oggi a disposizione (Sudret ,2008; Fajraoui,2011). Nella pratica, risulta agevole calcolare gli indici del primo (o al massimo del secondo) ordine e gli indici di sensitività totale in funzione del valore assunto dall'esponente d .

3.2 ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE

Nell'analisi di molti fenomeni la modellazione assume un ruolo fondamentale per la comprensione e la quantificazione di processi fisici appartenenti al mondo reale. Il passaggio tra il processo reale e il processo modellato comporta inevitabilmente un'approssimazione dovuta all'introduzione di errori legati a tre componenti principali (Le Maitre,2010) :

- *errore nel modello*: la simulazione di un fenomeno si basa sulla risoluzione di modelli matematici che traducono le caratteristiche salienti del sistema oggetto di studio. I modelli matematici esprimono principi essenziali (legge di conservazione, leggi termodinamiche,..) e sono generalmente supportati da adeguate modellazioni delle caratteristiche fisiche del sistema (leggi costitutive, equazioni di stato, ...). All'interno di un modello matematico si possono introdurre ipotesi semplificative (fluido incompressibile, densità costante, bidimensionalità ...) che portano a simulare un sistema idealizzato e semplificato. Inoltre il modello matematico può non essere in grado di catturare e tradurre in dettaglio alcuni aspetti del sistema in seguito a lacune teoriche (fenomeni di dispersione nel mezzo poroso ,...). Tutti questi aspetti introducono inevitabilmente un errore nel riprodurre il sistema fisico reale.
- *errore numerico* : il modello matematico utilizzato per descrivere un processo spesso viene risolto per via numerica. Il modello matematico esatto viene quindi discretizzato e risolto con appropriati algoritmi. Gli errori introdotti da questa discretizzazione possono essere ridotti e controllati utilizzando le nozioni di convergenza, consistenza e stabilità.
- *errore sui dati*: i modelli matematici necessitano di dati e parametri che specificano le caratteristiche fisiche del processo simulato. Questi dati possono riguardare la geometria del sistema, le condizioni al contorno, le forzanti esterne, ... I parametri nel modello possono avere un significato fisico preciso o essere costanti specifiche . In molti casi dati e parametri non possono essere definiti esattamente in seguito alla limitazione dei dati sperimentali a disposizione. La mancata conoscenza esatta dei dati e parametri si riflette sulla capacità predittiva del modello.

La PCE fornisce uno strumento utile al fine di analizzare l'effetto dell'errore sui dati e parametri, traducibile con la loro incertezza, sulla risposta predetta dal modello matematico selezionato ed opportunamente discretizzato. L'utilizzo di una PCE presuppone quindi la scelta di un modello matematico soddisfacente e la sua opportuna discretizzazione numerica.

Lo studio della propagazione dell'incertezza relativa ai parametri viene affrontata in un'ottica probabilistica, potendo considerare i parametri come quantità aleatorie. I metodi spettrali per la quantificazione dell'incertezza, a cui la PCE appartiene, sono essenzialmente basati sulla parametrizzazione dei parametri in input mediante l'uso di variabili casuali indipendenti. Generalmente non si conosce la distribuzione esatta dei dati e si procede quindi ad una loro parametrizzazione mediante una variabile casuale. Successivamente si procede allo studio della dipendenza che intercorre tra la risposta del modello analizzata e le variabili casuali definite come parametrizzazione dei parametri in input (Figura 3.1).

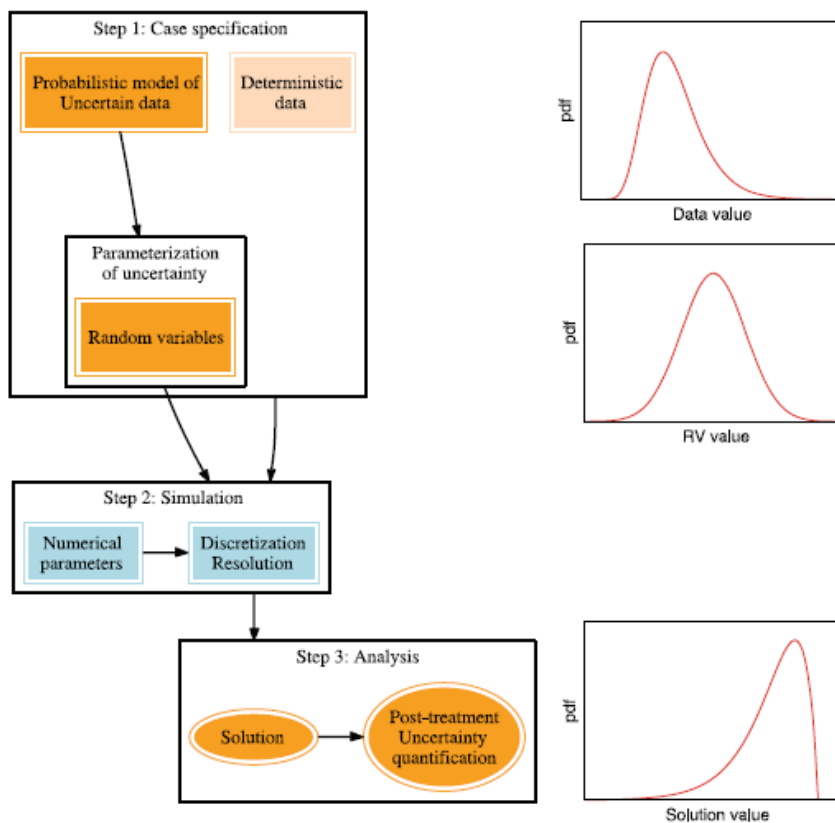


Figura 3.1. Schematizzazione dei vari passaggi coinvolti nella propagazione dell'incertezza usando metodi spettrali [Le Maitre,2010]

La dipendenza funzionale che intercorre tra la risposta del modello e ogni variabili aleatoria del second'ordine e può essere rappresentata seguendo la metodologia proposta da Wiener (1998) come segue.

La discussione teoriche che segue si basa sui lavoro di Le Maitre (2010) e Formaggia (2010).

Sia Ω uno spazio di eventi casuali e Θ lo spazio di funzioni che associa ad ogni elemento $\omega \in \Omega$ un valore in \mathbb{R} . Una funzione $\theta: \omega \in \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ non vedo il simbolo è una variabile casuale. Sia $\{\xi_n\}_{n=1}^{\infty}$ un infinito ma numerabile insieme di variabili casuali normalizzate gaussiane. Definiamo inoltre:

- Γ_p lo spazio di tutti i polinomi di grado minore uguale a p in $\{\xi_n(\omega)\}_{n=1}^{\infty}$
- Γ_p l'insieme di polinomi di Γ_p che sono ortogonali ad Γ_{p-1}
- Γ_p lo spazio generato da Γ_p :
- $\Gamma_p = \Gamma_{p-1} \oplus \Gamma_p$, $\Theta = \bigoplus_{i=0}^{\infty} \Gamma_i$ (3.2.1)

Il sottospazio Γ_p di Θ è detto p -esimo caos omogeneo e Γ_p è detto caos polinomiale (PC) di ordine p . Di fatto il PC di ordine p è l'insieme di tutti i polinomi di grado p in tutte le possibili combinazioni delle variabili casuali contenute in $\{\xi_n\}_{n=1}^{\infty}$. L'espansione in caos polinomiale di un variabile random del secondo ordine $\theta(\omega)$ è :

$$\begin{aligned}
 y(\omega) = & a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} a_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1}(\omega)) \\
 & + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} a_{i_1 i_2} \Gamma_2(\xi_{i_1}(\omega), \xi_{i_2}(\omega)) \\
 & + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} a_{i_1 i_2 i_3} \Gamma_3(\xi_{i_1}(\omega), \xi_{i_2}(\omega), \xi_{i_3}(\omega)) + \dots
 \end{aligned}
 \tag{3.2.2}$$

Per il teorema di Cameron-Martin la decomposizione è convergente in L_2 (Xiu e Karniadakis,2002; Sudret, 2008; Fajraoui et al., 2011). Per semplificare la notazione e facilitare la manipolazione dell'espansione PC si definisce un'univoca relazione tra i funzionali $\Gamma()$ e nuovi funzionali $\Psi()$, che permettono di riscrivere l'espansione come :

$$y(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \theta_k \Psi_k(\xi(\omega)) \quad (3.2.3)$$

$$\xi = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots\}$$

Di seguito si adotta la classica assunzione che il polinomio di ordine zero è definito tale che $\Psi_0 = 1$. Nell'equazione (3.2.3) i coefficienti θ_k sono deterministici e vengono definiti come i coefficienti dell'espansione in PC della variabile random θ , mentre Ψ_k sono polinomi random, ortogonali nello spazio L_2 , rispetto al prodotto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ basato sulla misura gaussiana:

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \int \Psi_i(\xi) \Psi_j(\xi) \varphi(\xi) d\xi = \delta_{ij} \langle \Psi_i, \Psi_i \rangle \quad (3.2.4)$$

$$\varphi(\xi) = \prod_i \frac{\exp[-\xi_i^2 / 2]}{\sqrt{2\pi}}$$

Di fatto Ψ_i sono polinomi multivariati di Hermite (prodotto di polinomi univariati di Hermite). Per scopi pratici un insieme finito di variabili gaussiane deve essere usato, portando all'espansione in PC:

$$\theta(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) = \sum_{k=0}^{\infty} \theta_k \Psi_k(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) \quad (3.2.5)$$

Questa scelta non corrisponde a una limitazione in quanto molti problemi fisici dipendono da un insieme finito di parametri incerti. L'espansione risulta essere nuovamente convergente in quanto si è fissato uno spazio di Hilbert a dimensione finita e i polinomi di Hermite rappresentano un'opportuna base hilbertiana. Per scopi pratici l'espansione in PC deve essere troncata in termini di grado dei polinomi.

Denotando con p l'ordine dell'espansione in PC, si può scrivere l'espansione dimensionalmente finita e di ordine finito p della variabile θ come:

$$\theta(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) \approx \sum_{k=0}^{N_p} \theta_k \Psi_k(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) \quad (3.2.6)$$

La dimensione della base N_p , corrispondente al numero di termini che compaiono nella sommatoria, è legata ad p e d mediante:

$$N_p + 1 = \frac{(p+d)!}{p!d!} \quad (3.2.7)$$

In maniera alternativa la scrittura (3.2.2) può essere sviluppata utilizzando una notazione multi-indice:

$$y = \alpha_0 + \sum_{i=1}^d \sum_{\mathbf{m} \in M_i} \alpha_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi) + \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{\mathbf{m} \in M_{i,j}} \alpha_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi) + \dots \quad (3.2.8)$$

Dove M_i contiene tutti gli indici tali che solo i -esima componente è diversa da zero, i.e., $M_i = \{\mathbf{m} \in \mathbb{N}^d : m_i \neq 0, m_k = 0 \text{ per } k \neq i\}$ e così per $M_{i,j}$. Il polinomio di Hermite $\Psi_{\mathbf{m}}$ indica il polinomio multivariato costruito come prodotto di polinomi di Hermite uni-variati, con il grado m_n per la variabile n :

$$\Psi_{\mathbf{m}}(\xi) = \prod_{n=1}^d \Psi_{n, m_n}(\xi_n) \quad (3.2.9)$$

Il multi-indice \mathbf{m} deve riflettere l'assunzione sul grado massimo dei polinomi impiegati nella PCE.

$$TD(p) = \left\{ \mathbf{m} \in \mathbb{N}^d : \sum_{i=1}^d m_i \leq p \right\} \quad (3.2.10)$$

Dove $TD(p)$ viene detto *total degree*.

Il modello surrogato costruito mediante la PCE approssima quindi la variabile aleatori in uscita $y(\xi)$ mediante l'insieme di polinomi, uni-multi variati nelle d variabili considerate, che non superano il grado massimo imposto p . Tale insieme di polinomi può essere indicato come P_p .

3.2.1 ESEMPIO DI ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE

Di seguito si propone una generale scrittura di un'espansione in caos polinomiale a dimensione finita. Considerando un caso bidimensionale $\xi = \{\xi_1, \xi_2\}$ e troncando l'espansione al grado $p = 3$, utilizzando i polinomi di Hermite l'espressione (3.2.8) può essere riscritta come:

$$\begin{aligned}
 y \approx & \alpha_0 + \alpha_{10}\psi_1(\xi_1) + \alpha_{01}\psi_1(\xi_2) \\
 & + \alpha_{20}\psi_2(\xi_1) + \alpha_{11}\psi_1(\xi_1)\psi_1(\xi_2) + \alpha_{02}\psi_2(\xi_2) \\
 & + \alpha_{30}\psi_3(\xi_1) + \alpha_{21}\psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2) + \alpha_{12}\psi_2(\xi_2)\psi_1(\xi_2) + \alpha_{03}\psi_3(\xi_2)
 \end{aligned}
 \tag{3.2.11}$$

Dove ψ_n è l'n-esimo polinomio di Hermite univariato (Figura 3.2)

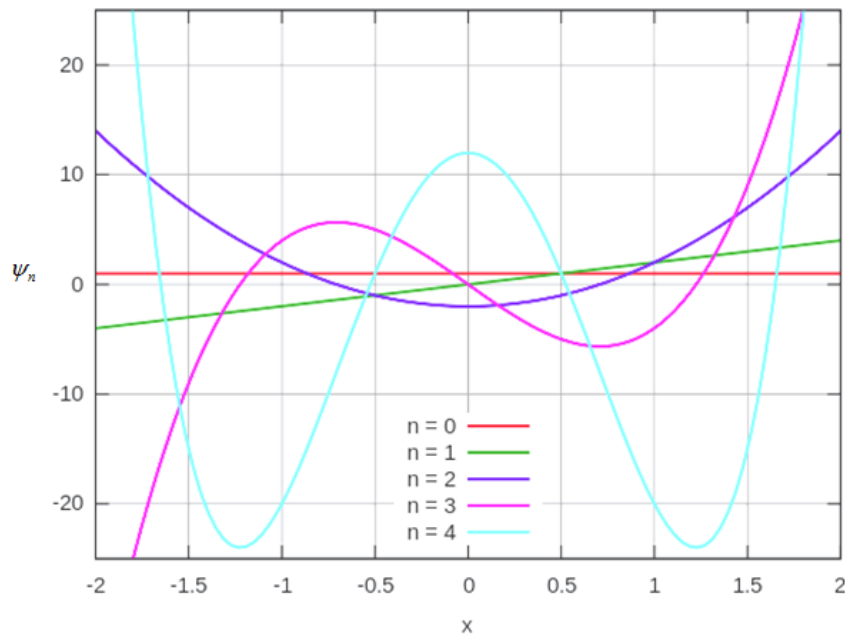


Figura 3.2. Polinomi di Hermite uni variati per n=0,1,...,4

L'espressione (3.2.11) può essere riscritta nella forma più compatta seguendo la scrittura (3.2.6) come:

$$y \approx \sum_{k=0}^9 \theta_k \Psi_k(\xi_1, \xi_2)
 \tag{3.2.12}$$

Si noti che nell'ambito della tesi i coefficienti della PCE sono stati indicati, secondo notazione multi-indice come $\alpha_{\mathbf{m}}$ con $\mathbf{m} \in \mathbb{N}^d$, o come θ_k secondo una numerazione

progressiva. In riferimento alla (3.2.11) e alla (3.2.12) vale quindi :

$$\alpha_{00} = \theta_0; \alpha_{10} = \theta_1; \alpha_{01} = \theta_2; \alpha_{20} = \theta_3; \dots; \alpha_{03} = \theta_9;$$

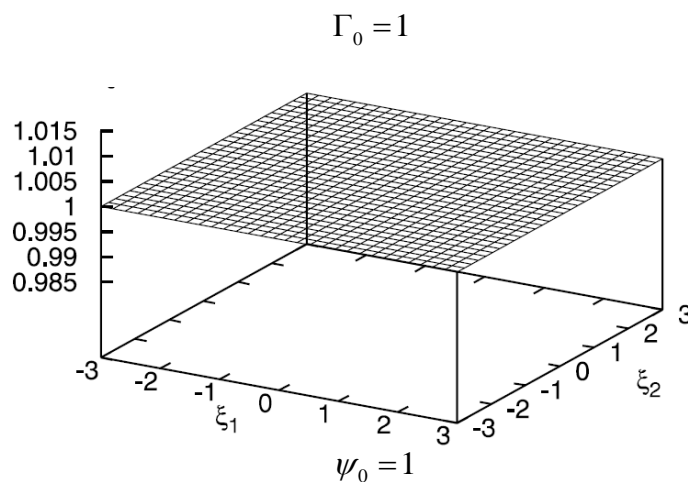
Possiamo quindi definire i caos omogenei coinvolti nell'esempio proposto.

Il caos omogeneo di ordine zero $\Gamma_{p=0}$ ha come base il polinomio multivariato di Hermite di ordine zero, Ψ_0 , quindi il caos polinomiale di ordine zero è $\Gamma_0 = 1$.

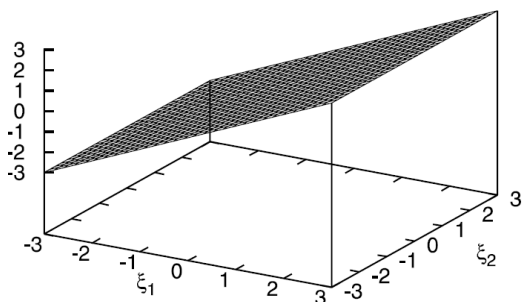
Il caos omogeneo di ordine uno $\Gamma_{p=1}$ ha come base i polinomi multivariati di Hermite di ordine uno, quindi $\Gamma_1 = \{\psi_1(\xi_1), \psi_1(\xi_2)\}$ è il caos polinomiale di ordine uno, cioè come definito precedentemente l'insieme di tutti i polinomi di grado $p = 1$ nelle varie combinazioni delle variabili indipendenti del vettore $\xi = \{\xi_1, \xi_2\}$.

Il caos omogeneo di ordine due $\Gamma_{p=2}$ ha come base i polinomi multivariati di Hermite di ordine due, quindi $\Gamma_2 = \{\psi_2(\xi_1), \psi_2(\xi_2), \psi_1(\xi_1)\psi_1(\xi_2)\}$ è il caos polinomiale di ordine due. Così di seguito per il caos omogeneo di ordine tre.

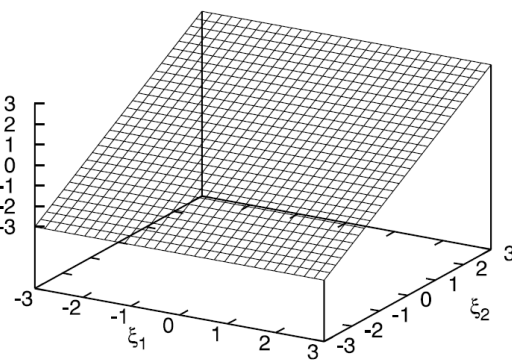
Di seguito si riporta una rappresentazione grafica dei caos polinomiali $\Gamma_{p=0,1,2,3}$ basata sull'uso dei polinomi di Hermite multivariati (Figura 3.3). Ognuno dei PC , Γ_p , costituisce la base per il p-esimo caos omogeneo. L'espansione in caos polinomiale è quindi una combinazione, mediante i coefficienti θ_k o α_m , delle differenti basi che generano i vari caos omogenei considerati.



$$\Gamma_1 = \{\psi_1(\xi_1), \psi_1(\xi_2)\}$$

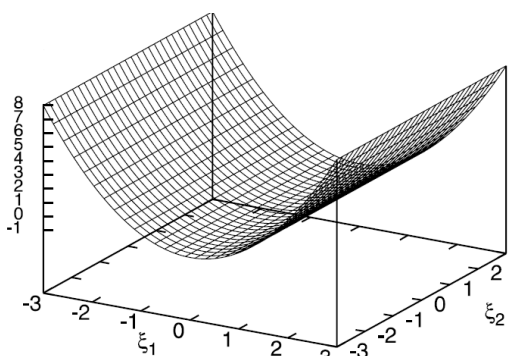


$$\Psi_1 = \psi_1(\xi_1) = \xi_1$$

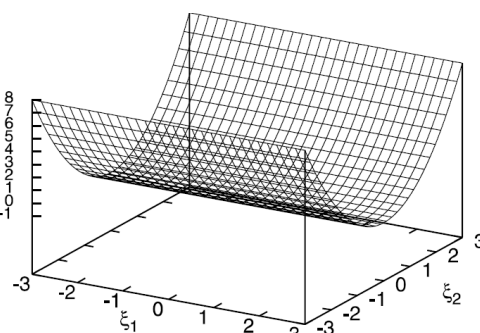


$$\Psi_2 = \psi_1(\xi_2) = \xi_2$$

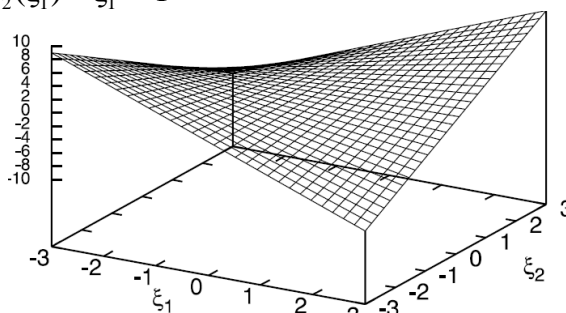
$$\Gamma_2 = \{\psi_2(\xi_1), \psi_2(\xi_2), \psi_1(\xi_1)\psi_1(\xi_2)\}$$



$$\Psi_3 = \psi_2(\xi_1) = \xi_1^2 - 1$$



$$\Psi_5 = \psi_2(\xi_2) = \xi_2^2 - 1$$



$$\Psi_4 = \psi_1(\xi_1)\psi_1(\xi_2) = \xi_1\xi_2$$

Figura 3.3. Caos Polinomiale di ordine $p=0,1,2$ utilizzando polinomi di Hermite multidimensionali (La Maitre,2010)

3.2.2 ESPANSIONE IN CAOS POLINOMIALE GENERALIZZATA

L'espansione in caos polinomiale può essere estesa anche a variabili aleatorie in ingresso con misure di probabilità non gaussiana, si parla in tal caso di PCE generalizzata (gPCE). In questo caso si ricorre a diverse famiglie di polinomi ortogonali appartenenti allo schema di Askey (Xiu 2003) (Tabella 3.1).

Poiché l'analisi contenuta nel presente lavoro ipotizza una distribuzione di probabilità uniforme per i parametri di input, nel seguito si farà riferimento ad una PCE generalizzata scritta attraverso la base polinomiale di Legendre. Come spazio dei parametri, tradotti come variabili aleatorie $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_d\}$, si utilizza l'ipercubo $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \times \dots \times \Omega_d$, dove $\Omega_i = [a_i, b_i]$ definisce il range di variazione per i -esimo parametro. La funzione di distribuzione di densità congiunta risulta quindi essere:

$$\varphi_d(\xi) = \prod_{i=1}^d \varphi_i(\xi_i) = \prod_{i=1}^d \frac{1}{b_i - a_i}.$$

Nello svolgimento della tesi il range di variazione dei parametri viene riscritto sull'intervallo $[-1, +1]$, lo spazio dei parametri diviene di fatto un ipercubo unitario $\Omega = [-1, +1]^d$.

Tabella 3.1. Relazione tra la distribuzione della variabile random e la famiglia di polinomi ortogonali [Xiu 2003]

Tipo	Distribuzione variabile aleatoria	Famiglia polinomi ortogonali	Supporto
Continua	Gaussiana	Hermite	$(-\infty, \infty)$
	Gamma	Laguerre	$[0, \infty)$
	Beta	Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Legendre	$[a, b]$
Discreta	Poisson	Charlier	$\{1, 2, \dots\}$
	Binomiale	krawtchouk	$\{1, 2, \dots, N\}$

Nell'ambito della tesi lo spazio dei parametri Ω , è definito come $\Omega = \Omega_{k_x} \times \Omega_{r_k} \times \Omega_{\alpha_L} \times \Omega_{\alpha_T}$. I parametri affetti da incertezza sono descritti da quattro variabili aleatorie indipendenti $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4\}$ caratterizzate da funzione di

distribuzione di probabilità uniforme. L'espansione generalizzata in caos polinomiale, gPCE, costruita nell'ambito della tesi sfrutta i polinomi di Legendre.

3.2.3 INDICI DI SENSITIVITA'

Con riferimento alle ipotesi precedenti (i, ii, e iii riferite alla (3.1.2)), è possibile rappresentare approssimativamente la risposta casuale, (3.1.1), in funzione della sua PCE generalizzata e troncata all'ordine p :

$$y = f(\vec{x}) \approx y(\xi) = \sum_{j=0}^{N_p} \theta_j \Psi_j(\xi), \quad (\vec{x}) \sim \Omega([-1,1]^d), (\xi) \sim \Omega([-1,1]^d) \quad (3.2.13)$$

Si noti che il vettore delle variabili \vec{x} introdotto nella sezione 3.1 di fatto coincide con il vettore ξ della trattazione in sezione 3.2.

Utilizzando la notazione multi-indice (3.2.8), si può riscrivere:

$$y = \alpha_0 + \sum_{i=1}^d \sum_{\mathbf{m} \in M_i} \alpha_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi) + \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{\mathbf{m} \in M_{i,j}} \alpha_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi) + \dots$$

Dove M_i contiene tutti gli indici tali che solo i -esima componente è diversa da zero, i.e., $M_i = \{\mathbf{m} \in \mathbb{N}^d : m_i \neq 0, m_k = 0 \text{ per } k \neq i\}$ e così per $M_{i,j}$. Il polinomio di Legendre $\Psi_{\mathbf{m}}$ indica il polinomio multivariato costruito come prodotto di polinomi di Legendre uni-variati, con il grado m_n per la variabile n :

$$\Psi_{\mathbf{m}}(\xi) = \prod_{n=1}^d \Psi_{n, m_n}(\xi_n)$$

Grazie all'ortonormalità delle basi è facile dimostrare che la media e la varianza della risposta sono rispettivamente:

$$y = E[f(\vec{x})] = E[y(\xi)] = \alpha_0 \quad (3.2.14)$$

$$D = Var \left[\sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{N}^d} \alpha_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi) \right] = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{N}^d} \alpha_{\mathbf{m}}^2 \quad (3.2.15)$$

La (3.2.14) indica che la media della risposta corrisponde alla costante che compare nella PCE .

La (3.2.15) indica che la varianza della risposta è calcolabile come somma di tutti I coefficienti, al quadrato, utilizzati nella PCE .

Confrontando l'equazione (3.1.2) con l'equazione (3.2.8) si evince l'equivalenza tra la decomposizione di Sobol e la PCE. Si possono quindi determinare gli indici di Sobol secondo le relazioni:

$$S_{i_1, \dots, i_s} = \sum_{\mathbf{m} \in M_{i_1, i_2, \dots, i_s}} \frac{\alpha_{\mathbf{m}}^2}{D} \quad (3.2.16)$$

$$S_i^T = \sum_{i_1, \dots, i_s \in \Lambda} S_{i_1, \dots, i_s} \quad (3.2.17)$$

Dove l'insieme Λ contiene tutti gli effetti misti in cui compare la variabile ξ_i .

In conclusione, nel lavoro di Sobol [Sobol,2001] si mostra che, una volta nota la rappresentazione di una risposta scalare d'interesse mediante la PCE , è possibile determinare l'elenco completo degli indici di Sobol, con quasi nessun costo aggiuntivo. In effetti, il calcolo degli indici richiede in questo caso soltanto delle operazioni matematiche elementari. Rappresentare la risposta del modello attraverso un'espansione di tipo PCE, porta quindi due vantaggi [Sudret ,2008; Fajraoui,2011]:

- Si ottengono gli indici di sensitività di Sobol, in maniera semplice, perché si ottengono dal post-processing dei coefficienti della PCE;
- Fornisce un modello surrogato, utile per ridurre i costi computazionali ed effettuare simulazioni Monte Carlo sulla risposta indagata.

3.2.4 COEFFICIENTE DI CORRELAZIONE DI PEARSON

Definita l'espansione in caos polinomiale per due grandezze è possibile derivare l'espressione del coefficiente di correlazione di Pearson sfruttando l'ortogonalità delle basi polinomiali introdotte. Ricordando la definizione del coefficiente di correlazione di Pearson :

$$\rho_{Pearson} = \frac{\text{cov}(y_i, y_j)}{\sigma_{y_i} \sigma_{y_j}} \quad (3.2.18)$$

Dove y_i è la generica grandezza con scarto quadratico medio σ_{y_i} e $\text{cov}(y_i, y_j)$ rappresenta la covarianza tra le due grandezze. Riscrivendo le generiche grandezze y_i e y_j mediante la loro espansione in caos polinomiale (3.2.6), la covarianza diviene:

$$\text{cov}(y_{i-PCE}, y_{j-PCE}) = E \left[\sum_{k=1}^{N_p} \sum_{t=1}^{N_p} \theta_k^i \Psi_k(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) \theta_t^j \Psi_t(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_d) \right] \quad (3.2.19)$$

Dove il simbolo θ_k^i rappresenta il coefficiente k-esimo per la variabile y_i . Grazie alla ortonormalità delle basi polinomiali nell'espressione (3.2.19) il prodotto tra polinomi differenti, $k \neq t$, si annulla. L'espressione della covarianza diviene quindi:

$$\text{cov}(y_{i-PCE}, y_{j-PCE}) = \sum_{k=1}^{N_p} \sum_{t=k}^{N_p} \theta_k^i \theta_t^j \quad (3.2.20)$$

Impiegando l'espressione della varianza per la generica grandezza y_i (3.2.15), il calcolo del coefficiente di Pearson diventa :

$$\rho_{Pearson} = \frac{\text{cov}(y_i, y_j)}{\sigma_{y_i} \sigma_{y_j}} = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \sum_{t=k}^{N_p} \theta_k^i \theta_t^j}{\sqrt{\sum_{k=1}^{N_p} \theta_k^i} \sqrt{\sum_{t=1}^{N_p} \theta_t^j}} \quad (3.2.21)$$

Mediante il coefficiente di Pearson è possibile definire l'intensità della relazione lineare che intercorre tra due grandezze. La scrittura (3.2.21) si basa su l'espansione in caos polinomiale di due grandezze che dipendone dallo stesso insieme di parametri incerti e hanno medesimo grado massimo dei polinomi. Il coefficiente di Pearson è stato utilizzato nell'ambito della tesi per valutare la correlazione tra le *variabili di stato globali* introdotte.

3.3 SPARSE GRID

Come mostrato in precedenza gli indici di Sobol sono facilmente calcolabili a partire dai coefficienti dell'espansione in caos polinomiale. Per ricavare questi coefficienti è possibile utilizzare essenzialmente due strategie differenti (Sudret,2008;Le Maitre,2009) :

- *Metodi intrusivi:* sostituendo al modello matematico completo, $M(y(\xi);D(\xi))$ con $y(\xi)$ la risposta scalare e $D(\xi)$ i dati in input, la sua espansione in caos polinomiale si introduce un errore. Imponendo l'ortogonalità tra tale errore e le N_p polinomi impiegati nell'espansione, che sono poi le basi del caos polinomiale considerato, si ottiene la scrittura: $\left\langle M\left(\sum_{i=0}^{N_p} \theta_i \Psi_i; D(\xi)\right), \Psi_k \right\rangle \quad \forall k = 0, \dots, N_p$ dove la scrittura $M\left(\sum_{i=0}^{N_p} \theta_i \Psi_i; D(\xi)\right)$ rappresenta la risposta fornita dalla PCE.

Il metodo prende il nome di *Proiezione di Galerkin* e richiede una modifica del codice che implementa il modello matematico completo, prendendo quindi l'appellativo di *metodo intrusivo*.

- *Metodi non-intrusivi:* Due metodologie sono tipicamente utilizzate l'approssimazione mediante minimi quadrati e la proiezione spettrale. Nei minimi quadrati i coefficienti della PCE possono essere stimati, $\underline{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_{N_p})$, generando un campione di punti nello spazio dei parametri $\{\xi^i\}$, ricavando la relativa soluzione mediante il modello completo $\{y^i\}$ ed imponendo poi la minimizzazione dei minimi quadrati:

$$\underline{\theta} = \arg \min_{\theta} \sum_{i=1}^n \left(y^{(i)} - \sum_{k=0}^{N_p} \theta_k \Psi_k(\xi^{(i)}) \right)^2 \quad \text{con } n > N_p + 1 \quad \text{il numero di punti}$$

campionati, tipicamente mediante strategie del tipo Monte Carlo, Hypercube Latin Sampling, etc . Mediante questo approccio non è possibile, ad oggi, definire la dimensione e la struttura del campionamento se non per via

empirica. Usuali test statistici sono utilizzati per valutare la stima dei coefficienti e per evitare problemi di over-fitting.

Nella proiezione spettrale si sfrutta l'ortogonalità dei polinomi utilizzati per costruire la PCE. Si moltiplica la risposta del modello, $y(\xi)$, per il k -esimo polinomio e se ne prende poi il valore atteso:

$$E[y(\xi)\Psi_k(\xi)] = E\left[\sum_{i=0}^{N^p} \theta_k \Psi_i(\xi)\Psi_k(\xi)\right] \quad (3.3.1)$$

sfruttando l'ortogonalità dei polinomi $E[\Psi_i\Psi_j] = 0$ per $i \neq j$ si ottiene

$$\theta_k = \frac{E[y(\xi)\Psi_k(\xi)]}{E[\Psi_k(\xi)\Psi_k(\xi)]} \quad (3.3.2)$$

La quantità al denominatore è facilmente calcolabile per via analitica, mentre il valore atteso al numeratore corrisponde a valutare l'integrale multi-dimensionale:

$$E[y(\xi)\Psi_k(\xi)] = \int_{\Xi} y(\xi)\Psi_k(\xi)\varphi_d(\xi)d\xi \quad (3.3.3)$$

con Ξ lo spazio d -dimensionale delle variabili aleatorie indipendenti $\xi = \{\xi_1, \dots, \xi_d\}$, che parametrizzano i parametri in input e $\varphi_d(\xi)$ la funzione di densità di probabilità (pdf) d -dimensionale, calcolabile come il prodotto delle pdf delle singole variabili aleatorie indipendenti.

Il calcolo dell'integrale multi-dimensionale sopra presentato può essere effettuato secondo varie metodologie :

- Campionamento *Monte Carlo* (MC) presenta caratteristiche di robustezza e convergenza anche per funzioni integrate poco regolari ed il tasso di convergenza è indipendente dalla dimensionalità del problema, ma è asintoticamente prossimo a $1/\sqrt{n}$.
- Campionamento *Quasi Monte Carlo* (QMC) è meno robusto rispetto a MC in quanto richiede una certa regolarità dell'integranda ma mostra un tasso di convergenza pari a $\log(n)^d/n$.

- *Prodotto tensoriale completo (PTC)* di formule di quadratura monodimensionali, mostrano una convergenza rapida per integrande regolari, ma hanno un costo che cresce esponenzialmente con la dimensione del problema .
- Formule di cubatura e interpolazione basate sull'uso di *Sparse Grids(SG)* . Sfruttano le formule di quadratura monodimensionali estendendole in più dimensioni tramite il prodotto tensoriale generando griglie tensoriali appositamente. Le varie griglie tensoriali sono poi combinate linearmente producendo la *Sparse Grids*. Questo approccio ha lo scopo di ottimizzare il rapporto accuratezza/numero di nodi rispetto all'approccio *Prodotto tensoriale completo* .

L'utilizzo di *Sparse Grids* consente sia di approssimare integrali multi-dimensionali, sia di ricavare un'approssimazione polinomiale (differente dalla PCE) della risposta del modello $y(\xi) \approx y_{SG}(\xi)$. Ricavata l'approssimazione polinomiale su *Sparse Grids* è poi possibile convertire tale approssimazione nell'espansione in caos polinomiale, ricavando quindi i coefficiente incogniti della PCE. Il beneficio nell'uso di *Sparse Grids* in entrambi gli approcci risiede nel basso costo computazionale richiesto rispetto a tecniche quali *MC, QMC e PTC* a parità di accuratezza (Figura 3.4).

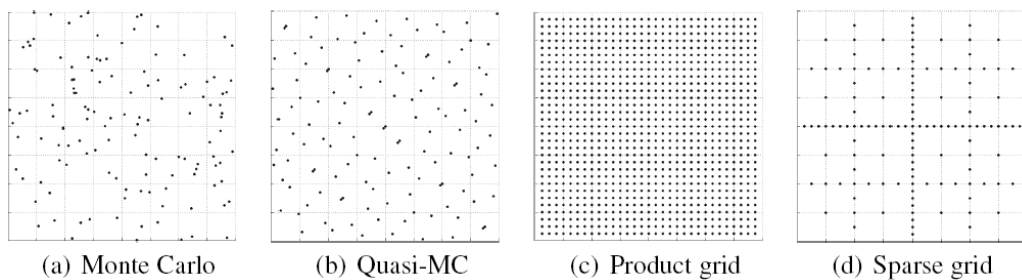


Figura 3.4. Esempio di griglie di campionamento per la risoluzione di un integrale bidimensionale (Bungartz,2004)

Di seguito si descrivono brevemente i concetti fondamentali nell'approccio mediante *Sparse Grids*. Maggiori dettagli possono essere trovati in Smolyak (1963), Bungartz (2004), Barthelmann (2000), Gebriel (2005) e nei riferimenti ivi contenuti.

Considerando l'approssimazione di una generica funzione monodimensionale si possono definire i nodi utilizzati nell'interpolazione come:

$$H_n^{l_n} = \{x_{n,1}, x_{n,2}, \dots, x_{n,l_n}\} \subset \Omega_n \quad (3.3.4)$$

Nel caso in studio $H_n^{l_n}$ rappresenta quindi l'insieme dei nodi scelti per la variabile aleatoria n -esima, ξ_n .

Si noti che questi nodi appartengono ad Ω_n , cioè l'intervallo di definizione di ξ_n e che l'apice $l_n \in \mathbb{N}$ indica il livello di accuratezza adottato per la variabile n -esima. La scelta dei nodi viene dettata dal tipo di distribuzione di probabilità associata alla variabile ξ_n . Per distribuzioni di probabilità uniformi si impiegano i nodi di Gauss-Legendre (Trefethen 2008). Scelti i nodi $H_n^{l_n}$ è poi possibile determinare l'insieme di polinomi di Lagrange monodimensionale associati, come:

$$L_k(x_{n,j}) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_{n,j} = x_{n,k} \\ 0 & \text{se } x_{n,j} \neq x_{n,k} \end{cases} \quad (3.3.5)$$

Tali polinomi sono di grado $l_n - 1$ e valgono 1 nel nodo associato e 0 nei restanti nodi.

L'interpolazione procede poi imponendo che nei vari nodi $H_n^{l_n}$ i polinomi di Lagrange coincidano con il valore assunto dalla funzione stessa. Questo porta a definire l'espressione interpolante monodimensionale:

$$y(\xi_n) \approx \sum_{x_i \in H_n^{l_n}} y(x_{n,i}) L_i(x_{n,i}) \quad (3.3.6)$$

La generica interpolazione monodimensionale richiede quindi di valutare la funzione monodimensionale $y(\xi_n)$ in l_n punti.

Volendo ora estendere l'interpolazione alle d dimensioni, si calcola il prodotto cartesiano dei d insiemi di nodi scelti, $H_n^{l_n}$, per ogni parametro e si costruisce la griglia tensoriale :

$$H_I = H_1^{l_1} \times H_2^{l_2} \times \dots \times H_d^{l_d} \quad (3.3.7)$$

Dove $I \in \mathbb{N}^d$ rappresenta il multi-indice che specifica il livello l_n per i vari parametri coinvolti nell'analisi. Introduciamo inoltre la notazione multi-indice $\mathbf{x}_i = (x_{1,i_1}, x_{2,i_2}, \dots, x_{d,i_d}) \in H_I$ per $\mathbf{i} \in \mathbb{N}^d, 1 \leq i_n \leq l_n$ per identificare ogni nodo sulla griglia tensoriale. Si noti che ora un nodo appartenente ad H_I specifica le d coordinate necessarie nell'ipercubo Ω .

Successivamente alla determinazione dell'insieme dei nodi H_I si procede all'interpolazione della funzione $y(\xi_1, \dots, \xi_d)$ mediante l'uso di polinomi di Lagrange multidimensionali, definiti come prodotto dei polinomi di Lagrange monodimensionali:

$$L_k(\mathbf{x}) = \prod_{n=1}^d L_{k_n}(x_n) \quad (3.3.8)$$

Con la proprietà che $L_k(\mathbf{x}_j) = 1$ se $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_j$ mentre vale 0 negli altri nodi di H_I .

Il polinomio Lagrangiano multidimensionale associato al t -esimo nodo della griglia tensoriale è quindi il prodotto tra i polinomi di Lagrange monodimensionali associati ai nodi, prescritti per i singoli parametri come precedentemente descritto, che dettano le d coordinate del t -esimo nodo.

L'approssimazione sulla griglia tensoriale diviene quindi:

$$y_{\text{TG,I}}(\xi) = \sum_{\mathbf{x}_i \in H_I} y(\mathbf{x}_i) L_i(\xi) \quad (3.3.9)$$

La costruzione di questa approssimazione richiede di valutare la funzione $y(\xi)$ in $l_1 \times l_2 \times \dots \times l_d$ nodi. Considerando ad esempio 4 parametri e 5 punti per ogni parametro si richiedono 1024 punti, che corrispondono in pratica a 1024 simulazioni con il modello completo. Questo approccio è definito come *Prodotto tensoriale completo (PTC)* e si nota come all'incremento delle dimensioni del problema il costo computazionale cresca esponenzialmente. Tale problematica in letteratura è

generalmente dominata come *curse of dimensionality* (maledizione della dimensionalità).

Per ovviare a tale problematica si ricorre alla costruzione di *Sparse Grids* definite come combinazioni lineari di diverse griglie tensoriali, ciascuna composta da un numero di nodi limitato.

L'approssimazione su *Sparse Grids* può quindi essere scritta come :

$$y_{SG}(\xi) = \sum_{I \in \Upsilon} c_I y_{TG,I}(\xi) \quad (3.3.10)$$

Dove $\Upsilon \in \mathbb{N}^d$ è l'insieme di multi-indici che selezionano l'insieme di griglie tensoriali che costituiscono la *SG* e c_I sono opportuni coefficienti. L'insieme dei multi-indici Υ deve essere scelto in modo opportuno al fine di garantire l'accuratezza dell'interpolazione con costi computazionali contenuti [4,6]. Una possibile scelta per Υ , che risulta semplice ed efficace allo scopo è:

$$\Upsilon = \left\{ I \in \mathbb{N}^d : \sum_{n=1}^d l_n - 1 \leq p, \quad p \in \mathbb{N} \right\} \quad (3.3.11)$$

Con p definito come il grado massimo dei polinomi utilizzati nella PCE. Si definisce il livello della *sparse grid*, l_{SG} come il grado massimo assunto dai polinomi interpolanti, sia uni-variati che multi-variati. Di fatto vale la relazione $l_{SG} = p$.

Utilizzando la (3.3.11) di fatto si impone che il grado massimo dei monomi impiegati nell'approssimazione non ecceda p . Considerando ad esempio un caso bidimensionale, $d = 2$, e imponendo $p = 3$ si avranno solamente i monomi nella parte triangolare inferiore in Tabella 3.2. I restanti monomi rappresentano termini in 'eccesso' che si ottengono mediante *prodotto tensoriale completo*.

Tabella 3.2. Rappresentazione dei monomi impiegati nella sparse grid e nel prodotto tensoriale completo per il caso bidimensionale, $d = 2$ e grado massimo $p = 3$.

$d = 2 \quad p = 3$				
ξ_2^3	ξ_2^3	$\xi_1 \xi_2^3$	$\xi_1^2 \xi_2^3$	$\xi_1^3 \xi_2^3$
ξ_2^2	ξ_2^2	$\xi_1 \xi_2^2$	$\xi_1^2 \xi_2^2$	$\xi_1^3 \xi_2^2$
ξ_2	ξ_2	$\xi_1 \xi_2$	$\xi_1^2 \xi_2$	$\xi_1^3 \xi_2$
1	1	ξ_1	ξ_1^2	ξ_1^3
	1	ξ_1	ξ_1^2	ξ_1^3

L'idea alla base dell'approccio mediante *sparse grid* risiede nel combinare diversi livelli di accuratezza, quindi l_n nodi, per le diverse variabili coinvolte, i.e., selezionato un elevato numero di nodi per una variabile si impongono meno nodi le altre variabili. Tale scelta si riflette sui multi-indici I , che determinano la struttura delle varie griglie tensoriale, le quali di volta in volta saranno più 'ricche' di nodi in una variabile e meno nelle restanti. La struttura finale della *sparse grid* sarà quindi caratterizzata da una maggiore sparsità rispetto ad una costruita mediante *prodotto tensoriale completo*. I nodi di interpolazione appartenenti alle *sparse grid* prendono il nome di *collocation points*

Un'osservazione chiave è che l'approssimazione mediante *SG* e la PCE appartengono allo stesso spazio di polinomi P_p , precedentemente definito. L'approssimazione mediante *SG* non gode però delle proprietà indicate per la PCE nella sezione 2.1.

Notando che l'approssimazioni su *SG*, $y_{SG}(\xi)$, si compone di una combinazione lineare di approssimazioni su griglie tensoriali (3.3.10), la conversione tra $y_{SG}(\xi)$ e la PCE si basa su due step:

- a. l'interpolazione Lagrangiana costruita per ogni griglia tensoriale che compone la *SG* viene convertita in termini di polinomi di Legendre;
- b. i polinomi di Legendre associati a diverse griglie tensoriali vengono sommati tra di loro per ricavare i coefficienti incogniti della PCE.

Con riferimento al primo passaggio consideriamo la I – esima griglia tensoriale, H_I . La corrispondente interpolazione Lagrangiana $y_{\text{TG},I}(\xi)$ è una somma di polinomi multidimensionali il cui grado rispetto al parametro n – esimo non eccede $l_n - 1$, si può quindi riformulare come una combinazione lineare dei polinomi di Legendre, uni-multi variati nelle possibili combinazione delle variabili $\xi = \{\xi_1, \dots, \xi_d\}$, il cui grado rispetto al parametro n – esimo non eccede $l_n - 1$ ed il grado massimo non ecceda p :

$$y_{\text{TG},I}(\xi) = \sum_{\mathbf{m} \in \chi_I} \beta_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\xi), \quad (3.3.12)$$

$$\chi_I = \left\{ \mathbf{m} \in \mathbb{N}^d : m_n \leq l_n - 1 \ ; \ \sum_{n=1}^d l_n - 1 \leq p, \ p \in \mathbb{N} \ , n = 1, \dots, d \right\}$$

I coefficienti $\beta_{\mathbf{m}}$ possono essere ricavati risolvendo il sistema di equazioni ottenuto imponendo:

$$y_{\text{TG},I}(\mathbf{x}_j) = \sum_{\mathbf{m} \in \chi_I} \beta_{\mathbf{m}} \Psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{x}_j) \quad \forall \mathbf{x}_j \in H_I \quad (3.3.13)$$

La conversione procede risolvendo il sistema (3.3.13) per le varie griglie tensoriali generate e collezionando poi i vari coefficienti $\beta_{\mathbf{m}}$ associati al polinomio di Legendre $\Psi_{\mathbf{m}}$, ricavando infine i coefficienti incogniti dell'espansione in caos polinomiale $\theta_{\mathbf{m}}$. La procedura prende il nome di *conversione modale*.

3.3.1 ESEMPIO DI COSTRUZIONE *SPARSE GRID* E *CONVERSIONE MODALE*

Di seguito si riporta un esempio di costruzione della *sparse grids* di livello $l_{SG} = 2$, considerando 2 dimensioni e i nodi di Gauss-Legendre. Segue la procedura di *conversione modale* per il calcolo dei coefficienti della PCE.

Avendo scelto come livello di accuratezza $l_{SG} = 2$, il grado massimo dei polinomi considerati risulta $p = 2$ e l'insieme dei multi-indici Υ utilizzato è $\Upsilon = \{(1,1), (1,2), (1,3), (2,1), (3,1), (2,2)\}$.

Quindi avremo 6 griglie tensoriali che combinate linearmente fra di loro forniscono la *sparse grid* finale. Per ogni multi-indice di Υ si costruisce la relativa griglia tensoriale secondo la (3.3.7) (Figura 3.5).

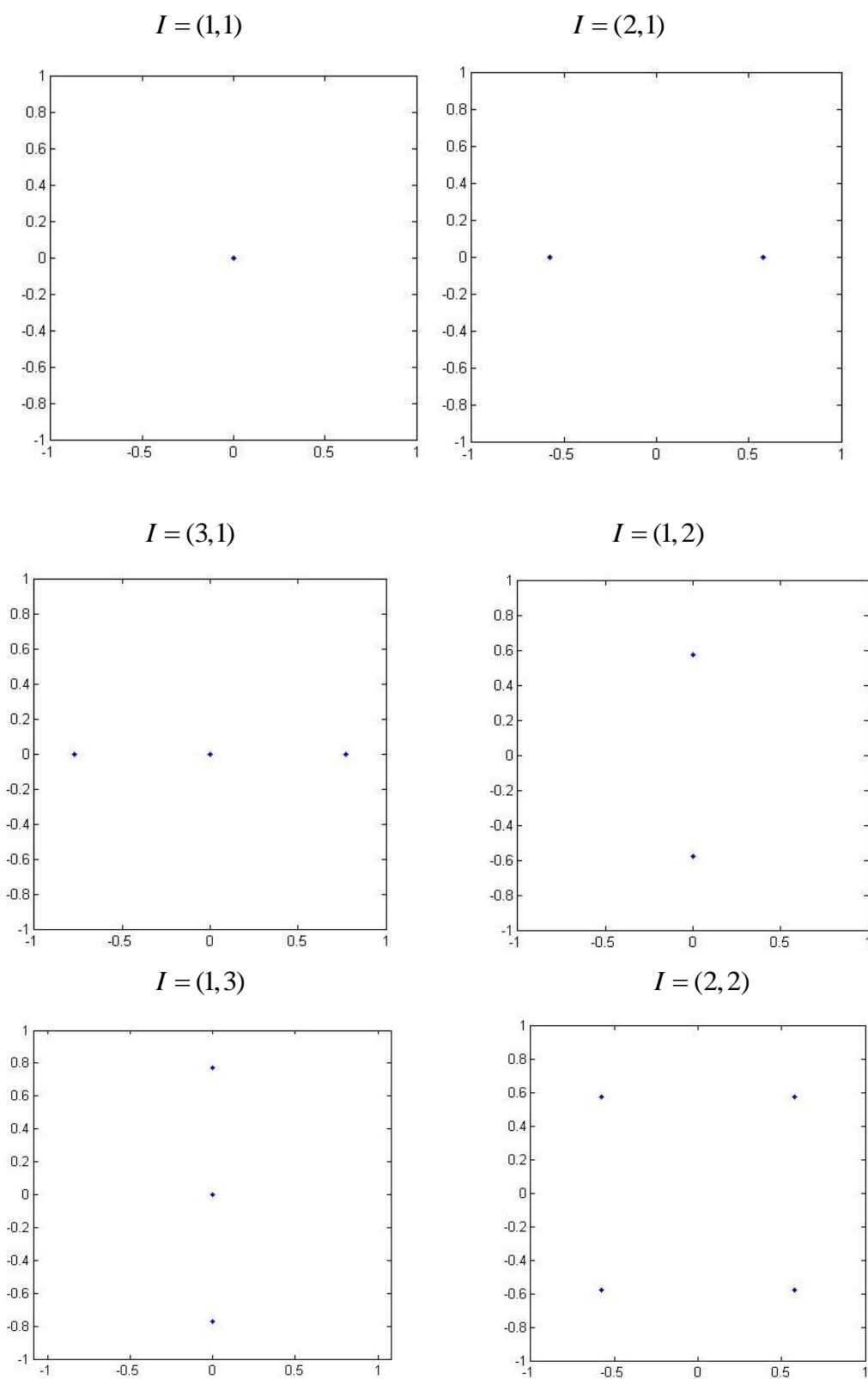


Figura 3.5. Griglie tensoriali bidimensionali associate alla *sparse grid* di livello $I_{SG} = 2$. Nodi interpolanti di Gauss-Legendre.

La *sparse grid* che si ottiene può essere rappresentata come in Figura 3.6 .

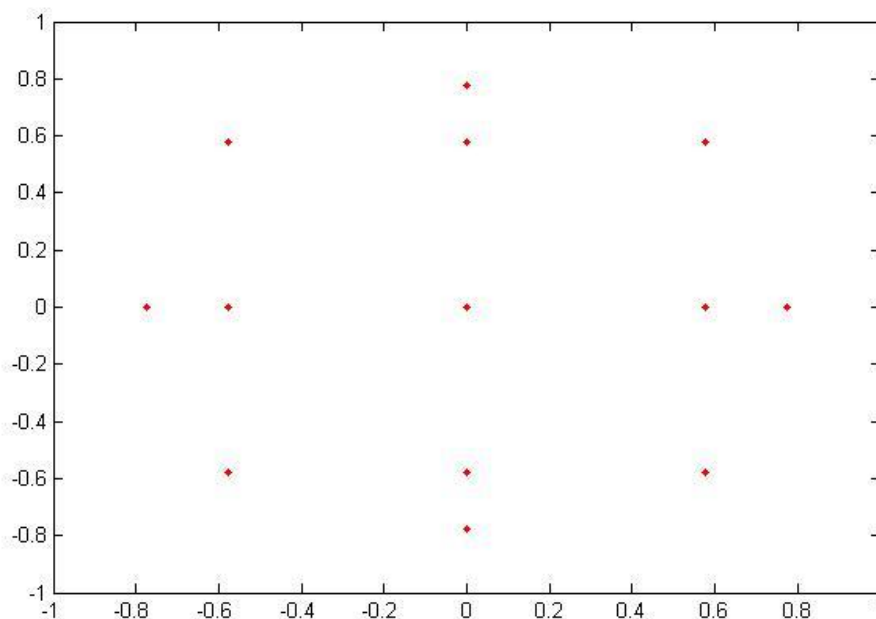


Figura 3.6. Sparse grid di livello $I_{SG} = 2$. Nodi interpolanti di Gauss-Legendre.

Ricavati i nodi della *sparse grid* si procede alla *conversione modale* . Per ogni griglia tensoriale si può riscrivere l'approssimazione Lagrangiana $y_{TG,I}(\xi)$ come una combinazione lineare di polinomi di Legendre secondo la (3.3.12). A partire dall'insieme dei multi-indici $\Upsilon = \{(1,1), (1,2), (1,3), (2,1), (3,1), (2,2)\}$ si costruisce per ogni griglia tensoriale l'insieme dei multi-indici χ_I che indica i polinomi di Legendre associati alla griglia tensoriale con multi-indice I .

Per l'approssimazione Lagrangiana sulla griglia tensoriale contraddistinta da $I = (1,1)$ si ha $\chi_I = (0,0)$ e si può scrivere l'equazione:

$$\{y_{TG,(1,1)}(x_{1,1}, x_{2,1}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,1}, x_{2,1})$$

Per comodità il multi-indice $\mathbf{m} = (0,0)$ si è riscritto come pedice 0, facendo riferimento al polinomio di Legendre $\Psi_0 = 1$.

Per la griglia tensoriale con multi-indice $I = (2,1)$ si può scrivere:

$$\begin{cases} y_{TG,(1,2)}(x_{1,1}, x_{2,1}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,1}, x_{2,1}) + \beta_1 \Psi_1(x_{1,1}, x_{2,1}) \\ y_{TG,(1,2)}(x_{1,2}, x_{2,2}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,2}, x_{2,2}) + \beta_1 \Psi_1(x_{1,2}, x_{2,2}) \end{cases}$$

Nuovamente il multi-indice $m = (1,0)$ è stato ridotto al pedice $_1$, facendo riferimento al polinomio di Legendre $\Psi_1 = \xi_1$.

Per la griglia tensoriale con multi-indice $I = (1,3)$ si può scrivere:

$$\begin{cases} y_{TG,(1,2)}(x_{1,1}, x_{2,1}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,1}, x_{2,1}) + \beta_1 \Psi_1(x_{1,1}, x_{2,1}) + \beta_3 \Psi_3(x_{1,1}, x_{2,1}) \\ y_{TG,(1,2)}(x_{1,2}, x_{2,2}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,2}, x_{2,2}) + \beta_1 \Psi_1(x_{1,2}, x_{2,2}) + \beta_3 \Psi_3(x_{1,2}, x_{2,2}) \\ y_{TG,(1,2)}(x_{1,3}, x_{2,3}) = \beta_0 \Psi_0(x_{1,3}, x_{2,3}) + \beta_1 \Psi_1(x_{1,3}, x_{2,3}) + \beta_3 \Psi_3(x_{1,3}, x_{2,3}) \end{cases}$$

Si noti che nell'ultimo sistema viene coinvolto il polinomio $\Psi_3 = \psi_2(\xi_1) = \xi_1^2 - 1$.

Procedendo in maniera analoga per le restanti griglie tensoriali si ricavano i vari β_m coinvolti.

Infine si procede a sommare i β_m , contraddistinti dallo stesso pedice m per le varie griglie tensoriali, al fine di ottenere i coefficienti dell'espansione in caos polinomiale θ_m . Ottenuti i coefficienti si possono calcolare immediatamente gli indici di Sobol'.

Mediante la procedura descritta si può quindi costruire un modello surrogato, PCE, sfruttando i nodi dettati dalla *sparse grid*. Con il modello surrogato PCE è poi possibile effettuare simulazioni Monte Carlo per le grandezze d'interesse con un costo computazionale ridotto rispetto all'uso del modello completo. Inoltre si possono ora calcolare agevolmente gli indici di Sobol' mediante le equazioni (3.2.16) e (3.2.17).

4 **RISULTATI**

Nel seguente capitolo si presentano i risultati ottenuti nello studio delle *grandezze globali d'interesse* presentate nel paragrafo 2.2 .

Il capitolo è strutturato come segue. Nel paragrafo 3.1 si presenta l'analisi di sensitività globale condotta mediante gli Indici di Sobol relativi alle *grandezze globali d'interesse* per i *parametri* del modello considerati incerti ,paragrafo 2.1 . Per la determinazione di tali indici si è ricorso alla tecnica di collocazione stocastica delle *sparse grids*, paragrafo 3.3 , e alla costruzione della PCE, paragrafo 3.2.

Nel paragrafo 3.3 vengono presentati i risultati dell'analisi Monte Carlo, condotta sfruttando la PCE per le *grandezze globali d'interesse*. In particolare si presentano le funzioni di distribuzioni di probabilità marginali ,congiunte e condizionate ricavate.

4.1 INDICI DI SOBOL

In questo paragrafo vengono riportati gli indici di Sobol calcolati per le *variabili di stato globali* considerate. Si riportano gli indici di Sobol totali definiti nell'equazione (3.2.17). Tali indici sono espressione del contributo di ogni parametro, preso singolarmente e nei mutui effetti con gli altri parametri, alla varianza della *variabile di stato globale* analizzata.

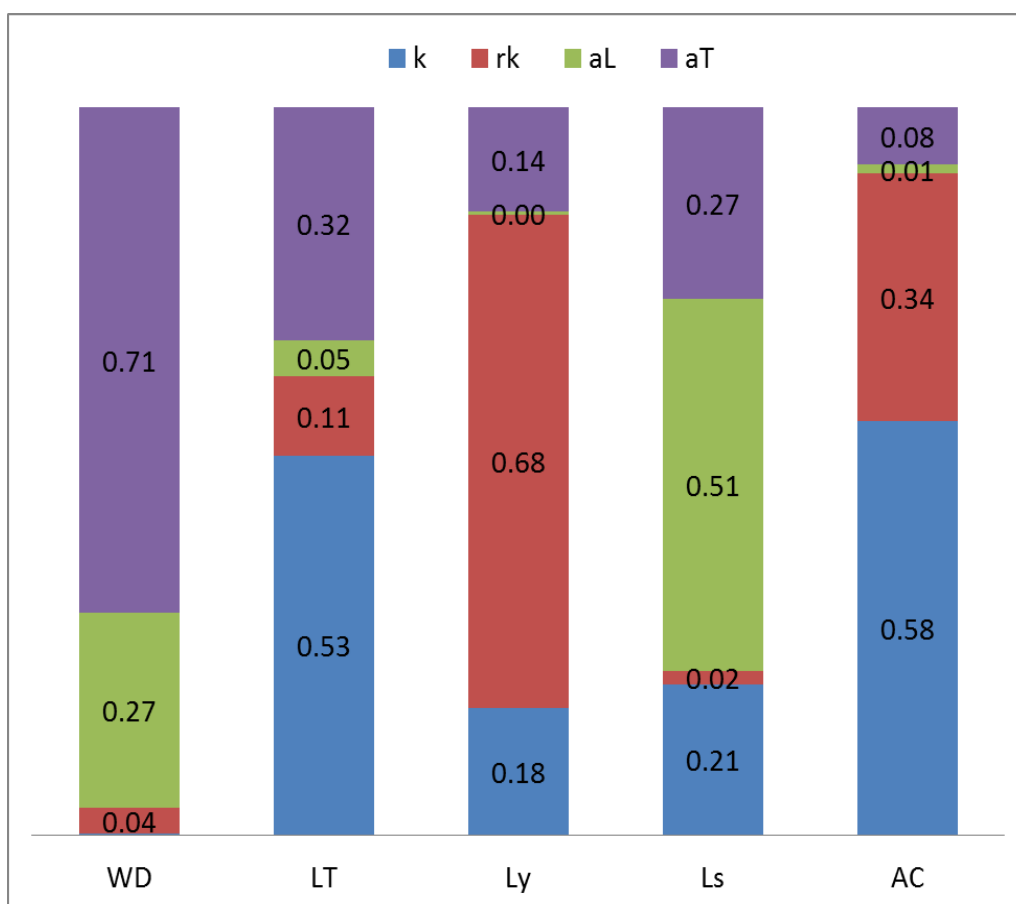


Figura 4.1. Indici di Sobol per le *variabili di stato globali*. Livello della griglia *sparse grid* $l_{SG} = 2$.

In Figura 4.1 si riportano i risultati ottenuti con un livello delle *sparse grid* pari a due, $l_{SG} = 2$. In tale configurazione si ottengono 41 *collocation points*. Come descritto nel paragrafo 3.3 il livello della *sparse grid* coincide con il grado massimo dei polinomi utilizzati nell'espansione in caos polinomiale.

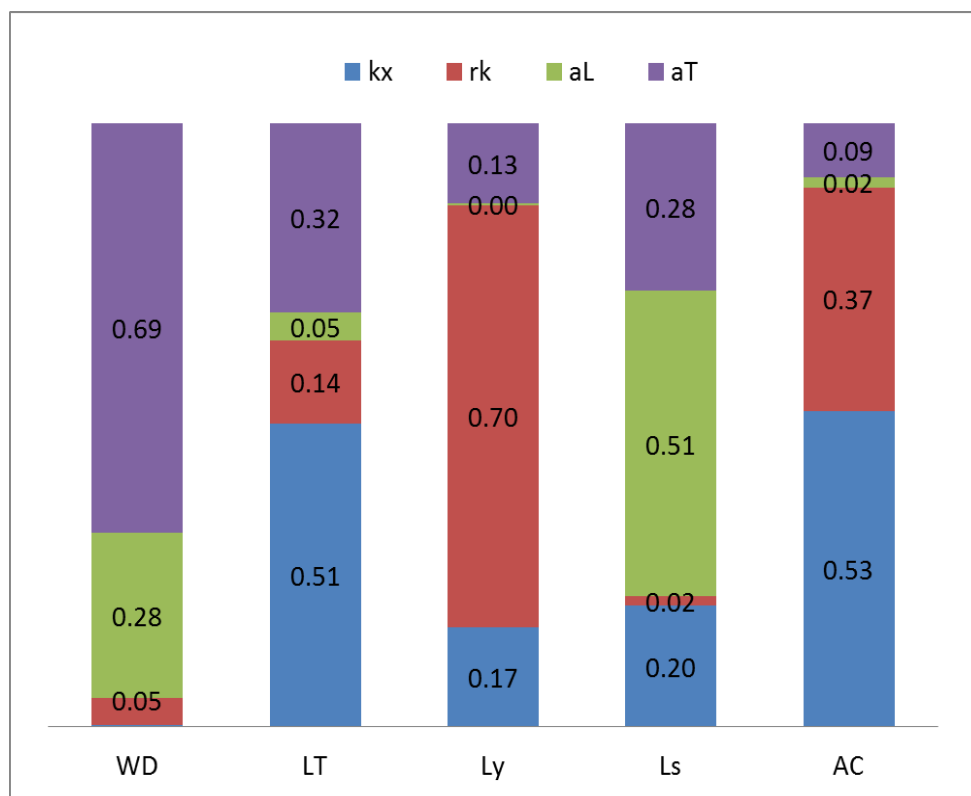


Figura 4.2. Indici di Sobol per le *variabili di stato globali*. Livello della griglia *sparse grid* $l_{SG} = 3$.

In Figura 4.2 sono riportati gli indici di Sobol per le *variabili di stato globali* con un livello delle *sparse grid* pari a tre, $l_{SG} = 3$. Per lo spazio dei parametri utilizzato e per il livello pari a due si ottengono 137 *collocation points*.

Dal confronto tra Figura 4.2 e Figura 4.1 si evince che gli indici di Sobol totali calcolati sulla base delle espansioni in caos polinomiale di grado massimo $p = 2$ e $p = 3$ sono praticamente analoghi. Questo risultato ci permette di stabilire l'avvenuta convergenza nella scelta del grado massimo per la costruzione della PCE. Passando da grado massimo 2 a grado massimo 3 di fatto si aggiungono termini nell'espansione polinomiale. Questi termini aggiuntivi descrivono gli effetti di ordine superiore imputabili ai parametri presi singolarmente o in muta iterazione. Se all'aumentare del grado il contributo di tali termini è poco rilevante, si può concludere che la risposta è ben approssimata dalla PCE di grado inferiore. Non si rende quindi necessario aumentare il grado ulteriormente. Nell'ambito della tesi si è scelto di utilizzare la PCE di grado 3.

Nelle Figura 4.3-4.7 si riportano le *variabili di stato globali* (WD in Figura 4.3, L_D in Figura 4.4, L_y in Figura 4.5, L_s in Figura 4.6, AC in Figura 4.7) ottenuti mediante PCE ,con grado massimo $p = 2$ e $p = 3$ e mediante simulazioni dirette con il modello completo (SUTRA), per 30 combinazioni di parametri non appartenenti ai *location points* ,ma compresi negli intervalli di variabilità considerati.. La buona corrispondenza tra la tre soluzioni permette di concludere che (a) le PCE di grado 2 e 3 sono un buon modello surrogato per la descrizione delle variabili di stato globali e (b) la PCE di ordine 3 è sufficiente per l'analisi proposta in questa tesi.

In Tabella 4.1 sono inoltre riportati la media μ , lo scarto quadratico medio (s.q.m.) σ ed il coefficiente di variazione $C.V. = \frac{\sigma}{|\mu|}$ ottenuti per le *variabili di stato globali* con la

PCE (di ordine 2 e 3) e con il modello completo. Tutte e tre le metodologie forniscono valori di μ , σ and CV praticamente coincidenti, confermando la bontà del modello surrogato e la rispettata convergenza nella scelta del grado massimo da adottare per le PCE.

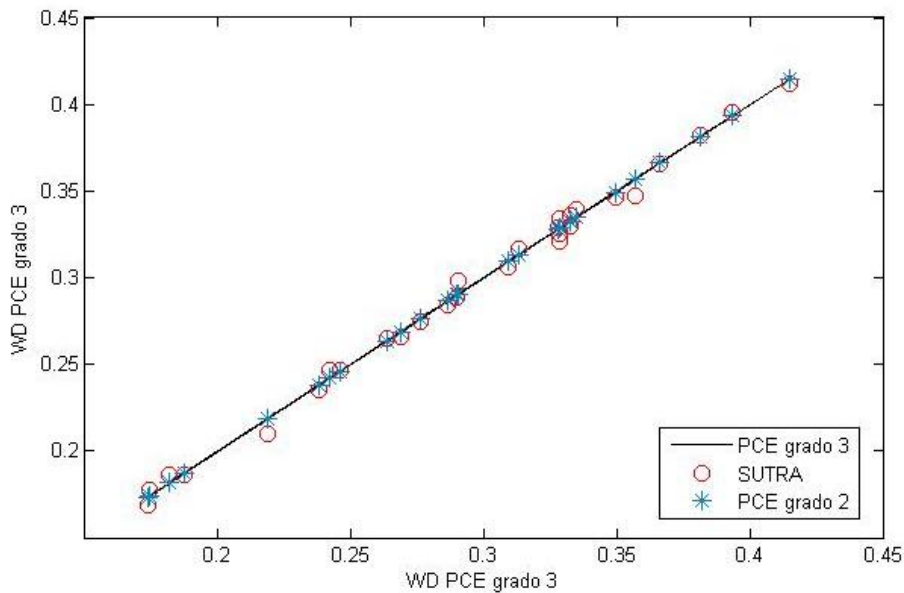


Figura 4.3. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p = 2$, $p = 3$ e modello completo SUTRA per la *variabile di stato globale* larghezza media della zona di transizione WD

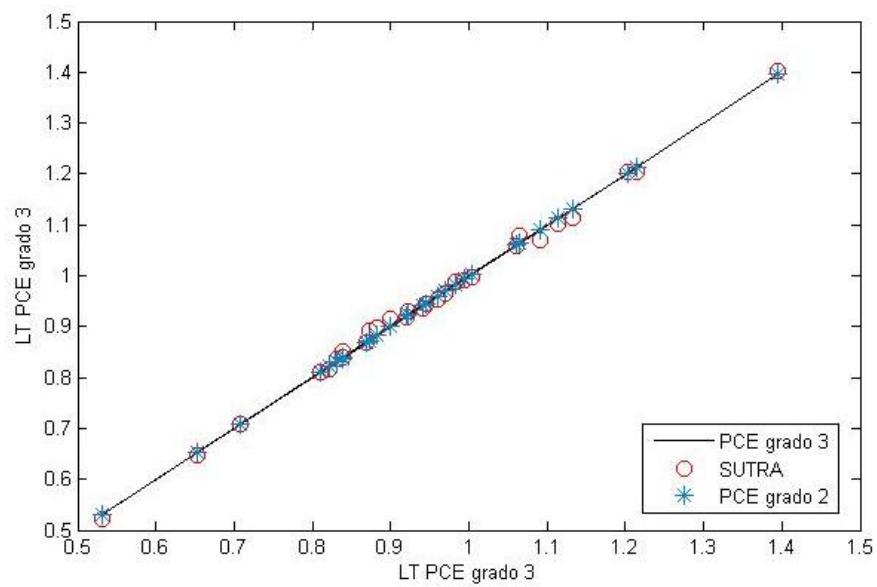


Figura 4.4. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p=2$, $p=3$ e modello completo SUTRA per L_T .

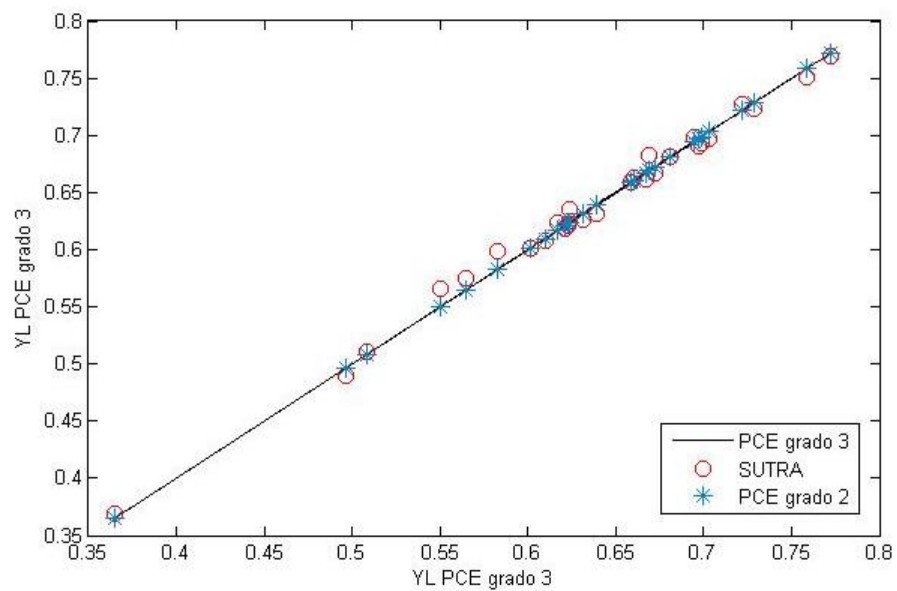


Figura 4.5. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p=2$, $p=3$ e modello completo SUTRA per la variabile di stato globale posizione L_y .

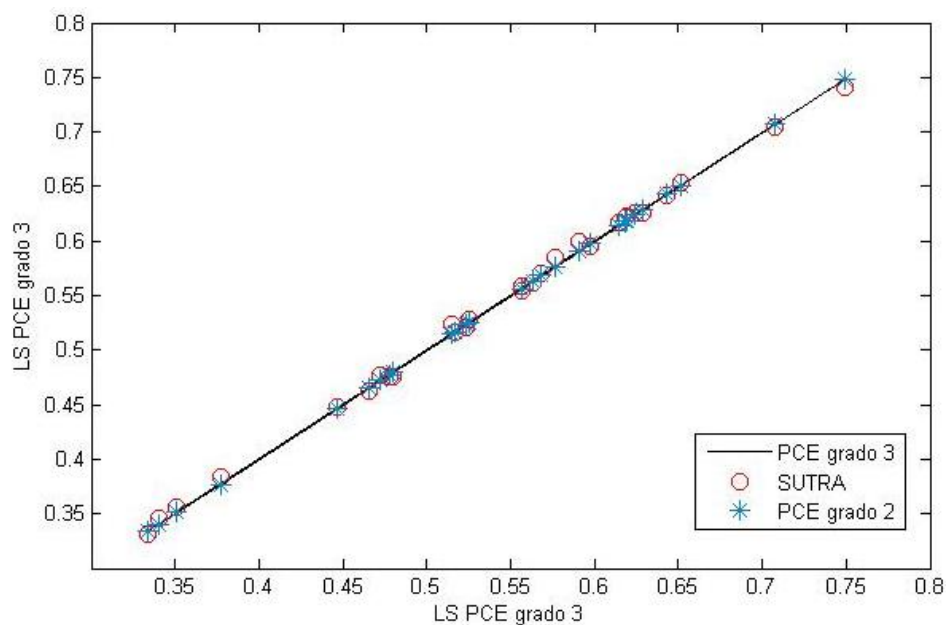


Figura 4.6. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p=2$, $p=3$ e modello completo SUTRA per la variabile di stato globale L_s

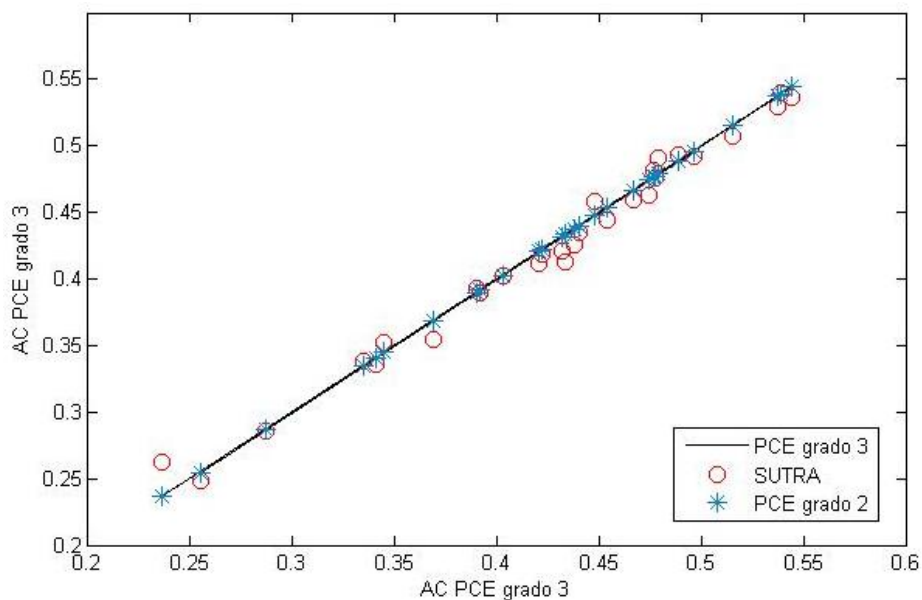


Figura 4.7. Confronto tra i valori ottenuti con PCE $p=2$, $p=3$ e modello completo SUTRA per la variabile di stato globale AC

Tabella 4.1. Confronto della Media, s.q.m. e coefficiente di variazione per le variabili di stato globali calcolati con PCE di grado massimo due e tre.

Variabile di stato globale	μ			σ			C.V.		
	$p = 2$	$p = 3$	SUTRA	$p = 2$	$p = 3$	SUTRA	$p = 2$	$p = 3$	SUTRA
<i>WD</i>	0.270	0.272	0.294	0.067	0.067	0.066	0.246	0.248	0.225
L_T	0.935	0.938	0.947	0.210	0.203	0.196	0.220	0.216	0.210
L_y	0.607	0.608	0.636	0.105	0.101	0.082	0.173	0.167	0.129
L_S	0.519	0.518	0.542	0.100	0.099	0.103	0.193	0.191	0.191
<i>AC</i>	0.388	0.390	0.422	0.083	0.088	0.079	0.213	0.2267	0.186

Analizzando gli indici Sobol totali riportati nelle Figura 4.2-4 si posso dedurre le seguenti osservazioni

- La larghezza della zona di transizione delle concentrazioni *WD* è controllata principalmente dai coefficienti di dispersività ed in particolare, come atteso, α_T gioca un ruolo fondamentale. Questo comportamento può essere ulteriormente chiarito osservando l'andamento delle linee di flusso e delle curve di iso-concentrazione riportate in Figura 4.8. Si noti come le linee di flusso si posizionano prevalentemente in direzione parallela alle linee ad iso-concentrazione. La dispersione dei soluti in direzione parallela alla velocità, controllata da α_L , influenza solo in modo marginale *WD* ad eccezione della parte inferiore del dominio dove le velocità sono perpendicolari alle linee ad iso-concentrazione (Figura 4.10). In tale zona, comunque, le velocità sono relativamente basse e l'effetto di α_L è pertanto contenuto. Si ricorda infatti che l'effetto della dispersività dipende linearmente dal modulo della velocità (equazione (1.5.4)). Si nota inoltre che l'effetto della variabilità della conduttività idraulica su *WD* è praticamente trascurabile.

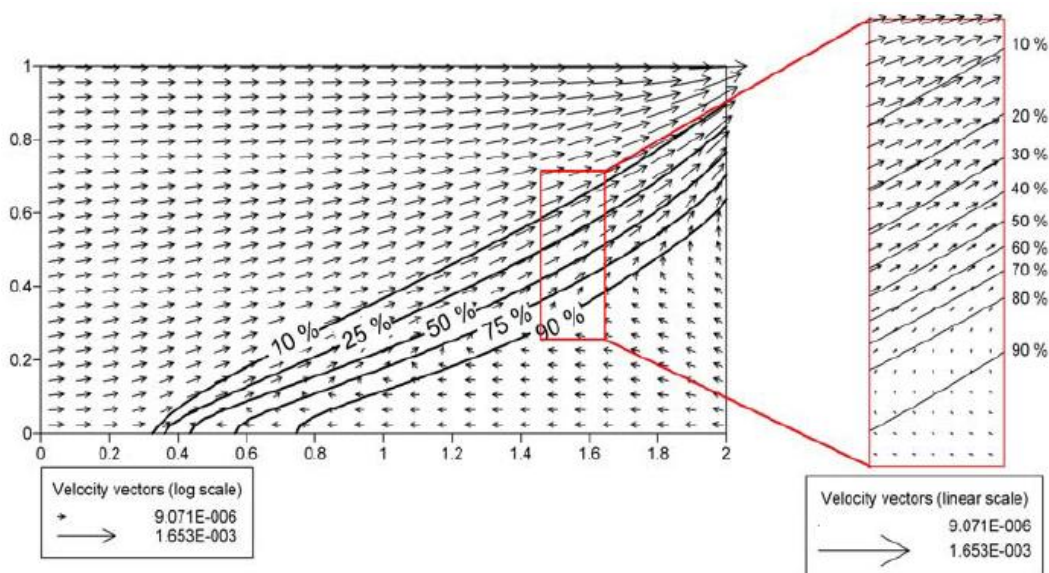


Figura 4.8. Soluzione del problema di Henry dispersivo-anisotropo in termini di iso-concentrazioni relative e campo di velocità [Abarca 2005]. I parametri utilizzati sono riportati in Tabella 1.4.

- La posizione della linea ad iso-concentrazione al 50% sul fondo del dominio, L_T , è fortemente influenzata dal valore delle permeabilità idraulica orizzontale: maggiore è k_x maggiore è l'intrusione del cuneo salino (Figura 4.11). Medesime considerazioni valgono per la permeabilità verticale, anche se l'IS per il rapporto d'anisotropia è minore (Figura 4.12). Si nota un IS per la dispersività trasversale elevato. Aumentando α_T si incrementa la dispersione dei soluti diminuendo il carico idraulico all'interno del cuneo salino e di conseguenza si ha una recessione di L_T (Figura 4.9). La dispersività longitudinale ha un ruolo marginale.
- La posizione della iso-concentrazione al 50% sul lato mare, L_y , è fortemente influenzata dal valore del rapporto d'anisotropia (Figura 4.12). All'aumentare di r_k si ha un generale innalzamento delle linee ad iso-concentrazione, legato alla maggior facilità di circolazione del flusso in direzione verticale. Effetti marginali sono imputabili ad α_T che influenza la dispersione dei soluti nella parte 'alta'

del cuneo (Figura 4.9). Un incremento di k_x influenza L_y in due modi: direttamente portando in generale ad un'intrusione più sviluppata e indirettamente imponendo una k_y più elevata a parità di r_k (Figura 4.11).

- La dispersione delle concentrazioni attorno alla posizione della iso-concentrazione al 50% , L_s , è principalmente controllata dalla dispersività longitudinale α_L . Sul fondo del dominio le velocità sono perpendicolari alle linee ad iso-concentrazione più elevate (Figura 4.8): la dispersione di soluti è quindi controllata da α_L . Si nota inoltre come le linee ad iso-concentrazioni maggiori di 50% sul fondo del dominio si distribuiscono in una zona in cui le velocità sono basse essendo in prossimità del punto di ristagno. In generale la conformazione del cuneo salino nei pressi dei punti di ristagno è insensibile a variazioni dei coefficienti di dispersività (Figura 4.8). Le variazioni di L_s sono quindi imputabili a variazioni nelle distribuzioni delle linee ad iso-concentrazione più elevate (Figura 4.10).
- La percentuale di area contaminata per concentrazioni relative maggiori del 5% , AC , è principalmente determinata dal valore della permeabilità orizzontale che di fatto controlla la profondità di penetrazione del cuneo salino (Figura 4.11). Una rilevanza importante assume il rapporto d'anisotropia, definendo di fatto la permeabilità in direzione verticale (Figura 4.12). La dispersività longitudinale riveste un ruolo marginale, controllando la distribuzione delle concentrazioni nella parte 'bassa' del cuneo salino. La dispersività trasversale assume un ruolo controverso: da una parte aumenta la dispersione dei soluti aumentando l'area contaminata, d'altro canto riduce l'estensione della zona contaminata agendo negativamente sulla profondità d'intrusione del cuneo salino (Figura 4.9).

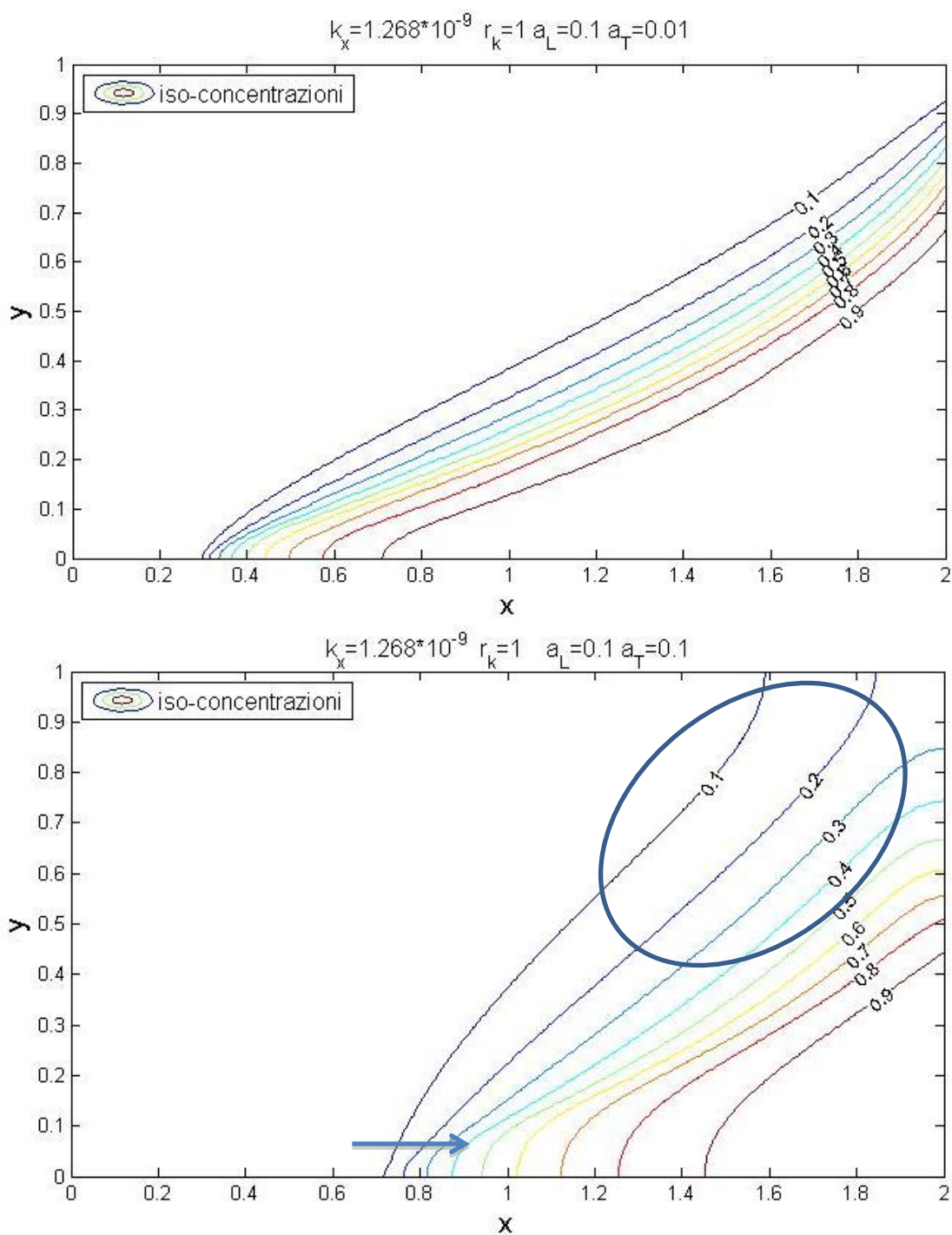


Figura 4.9. Effetti della variazione della dispersività trasversale α_T

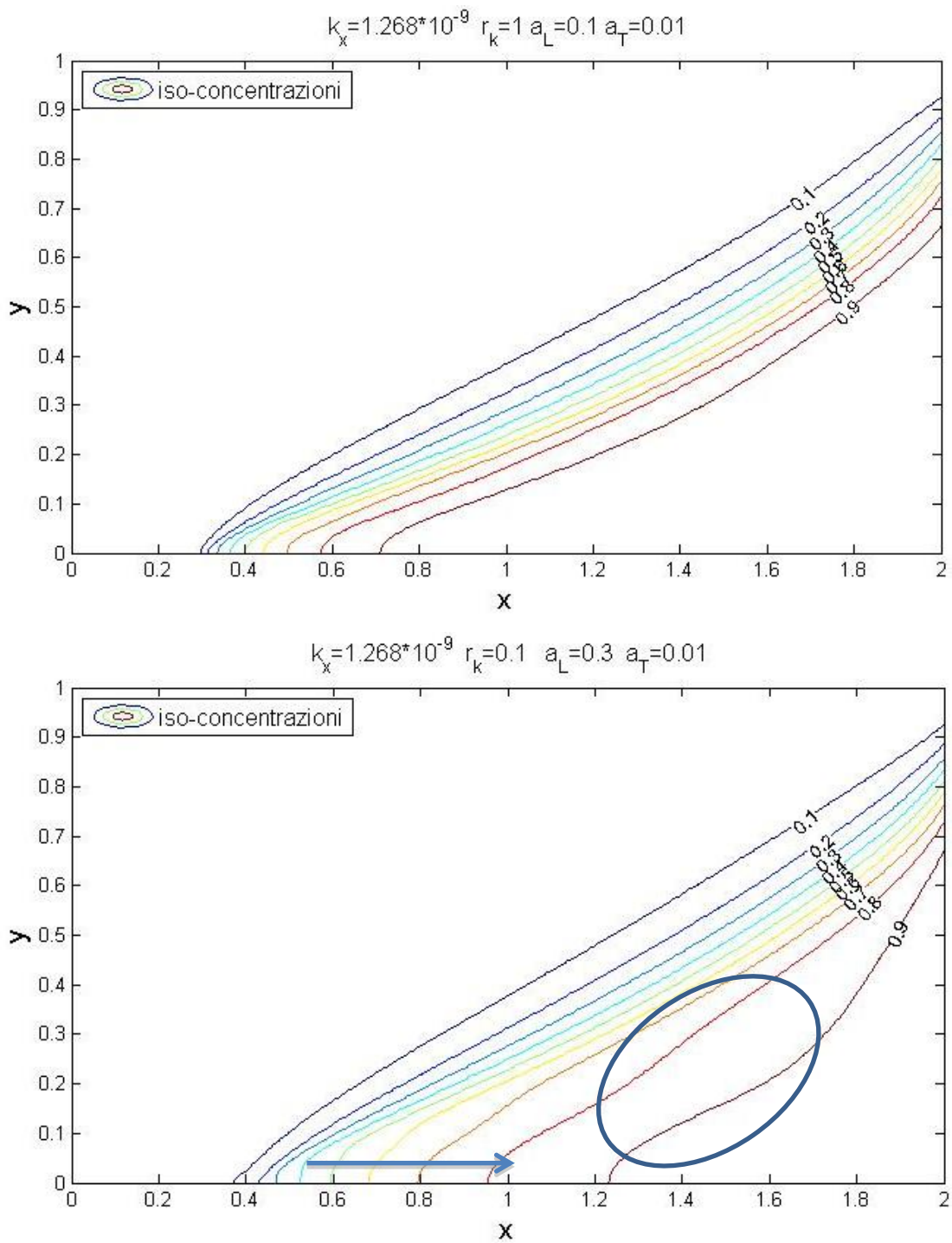


Figura 4.10. Effetti della variazione della dispersività longitudinale α_L

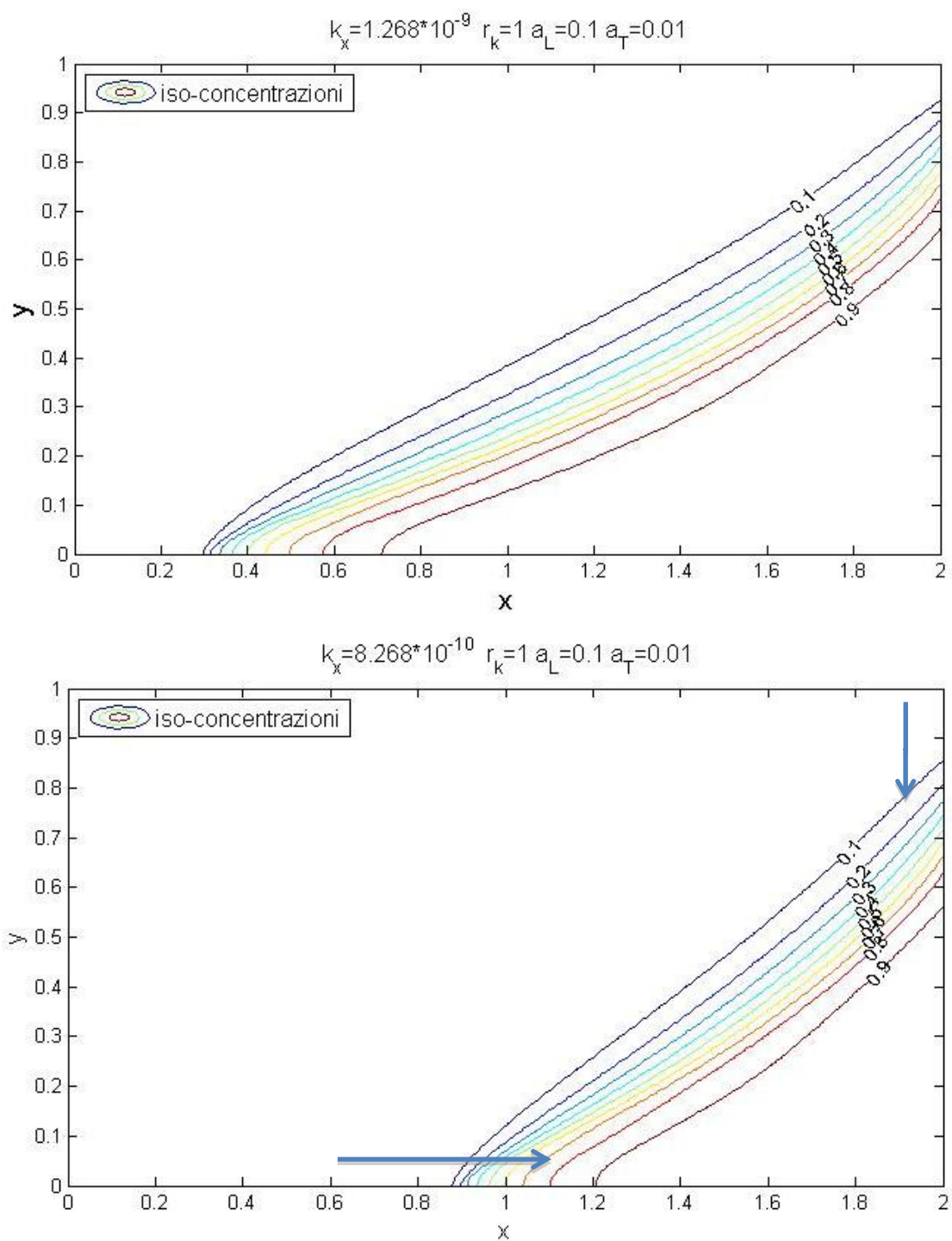


Figura 4.11. Effetti della variazione della permeabilità idraulica k_x

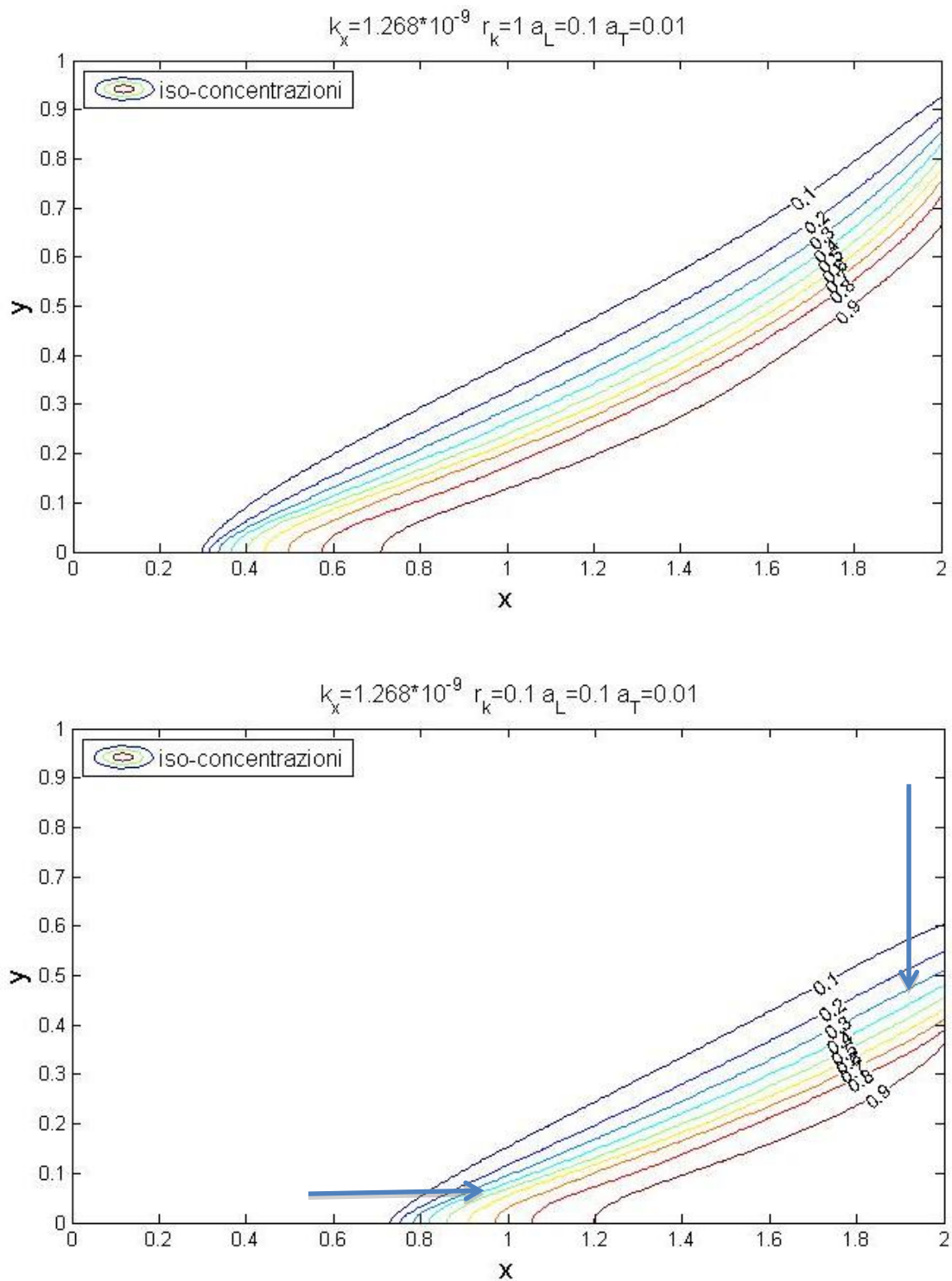


Figura 4.12. . Effetti della variazione del rapporto d'anisotropia delle permeabilità r_k .

In generale possiamo concludere :

- La permeabilità orizzontale k_x e quella verticale k_y , mediante il rapporto d'anisotropia, controllano direttamente la profondità d'intrusione :ad un loro aumento corrisponde un'intrusione maggiore. I coefficienti di dispersività influiscono negativamente sulla profondità di penetrazione del cuneo salino: ad un loro aumento corrisponde una diminuzione della profondità d'intrusione del cuneo.
- La permeabilità idraulica verticale k_y influenza fortemente la posizione verticale della linea ad iso-concentrazione 50% nei pressi del lato mare.
- La dispersività trasversale α_T controlla principalmente la parte 'alta' del cuneo promuovendo fortemente un'estensione della zona di transizione delle concentrazioni.
- La dispersività longitudinale α_L agisce principalmente sulla parte 'bassa' del cuneo salino regolando la distribuzione delle iso-concentrazioni più elevate.
- L'estensione dell'area contaminata dipende in maniera principale dai valori della permeabilità idraulica nelle sue due componenti. Il ruolo svolto da α_T è controverso: promuove la dispersione dei soluti ma riduce la profondità dell'intrusione.

4.2 DISTRIBUZIONI DI PROBABILITA'

La costruzione di un modello surrogato permette di effettuare analisi di tipo Monte Carlo per le variabili di stato globali con costi computazionali ridotti.

Sono state quindi ricavate le distribuzioni di probabilità marginali delle variabili di stato globali utilizzando 600'000 realizzazioni per ciascuna variabile, sfruttando la PCE di grado tre, costruita per ciascuna di esse. Il numero delle realizzazioni è stato scelto in modo tale da ottenere un numero consistente di dati nell'analisi delle distribuzioni condizionate esposte in seguito. La combinazione dei parametri, per ogni simulazione, è stata ricavata tramite campionamento casuale dallo spazio dei parametri. L'approccio probabilistico adottato permette di trattare le variabili di stato globali come variabili aleatorie e la costruzione della distribuzione di probabilità marginale permette di rispondere a domande del tipo: qual è la probabilità che la larghezza della zona di transizione sia maggiore di un determinato valore? . Le distribuzioni di probabilità ottenute mediante l'analisi MC basata sulla PCE, sono state confrontate con delle funzioni di densità di probabilità (pdf) e funzioni di probabilità cumulata (cdf) aventi un andamento simile, i cui parametri sono stimati attraverso il metodo della massima verosimiglianza (*Maximum Likelihood*, ML). In futuro è possibile prevedere l'utilizzo di criteri di discriminazione di modelli, per la selezione della distribuzione più appropriata.

Sulla base dei coefficienti di correlazione di Pearson, definiti nel paragrafo 3.2.4, si è analizzata la correlazione tra le variabili di stato globali. Per le variabili di stato globali maggiormente correlate si sono poi costruite le distribuzioni di probabilità congiunte sfruttando le 600'000 realizzazioni ottenute mediante PCE. A partire dalle distribuzioni congiunte si sono poi esplorate le distribuzioni condizionate. Tali distribuzioni sono uno strumento utile per ottenere informazioni su una variabile di stato globale a partire da conoscenze relative ad una o più delle restanti variabili di stato globali analizzate.

Nel paragrafo 4.2.1 vengono riportate le distribuzioni di densità di probabilità marginali e le distribuzioni di densità di probabilità cumulate marginali ottenute. Nel paragrafo 4.2.2 si riportano le distribuzioni di probabilità congiunte e condizionate ricavate.

4.2.1 DISTRIBUZIONI DI PROBABILITA MARGINALI

Per la larghezza della zona di transizione i risultati sono riportati in Figura 4.13 . In Tabella 4.2 si riportano i parametri della distribuzione Normale calcolati mediante

M.L.E.

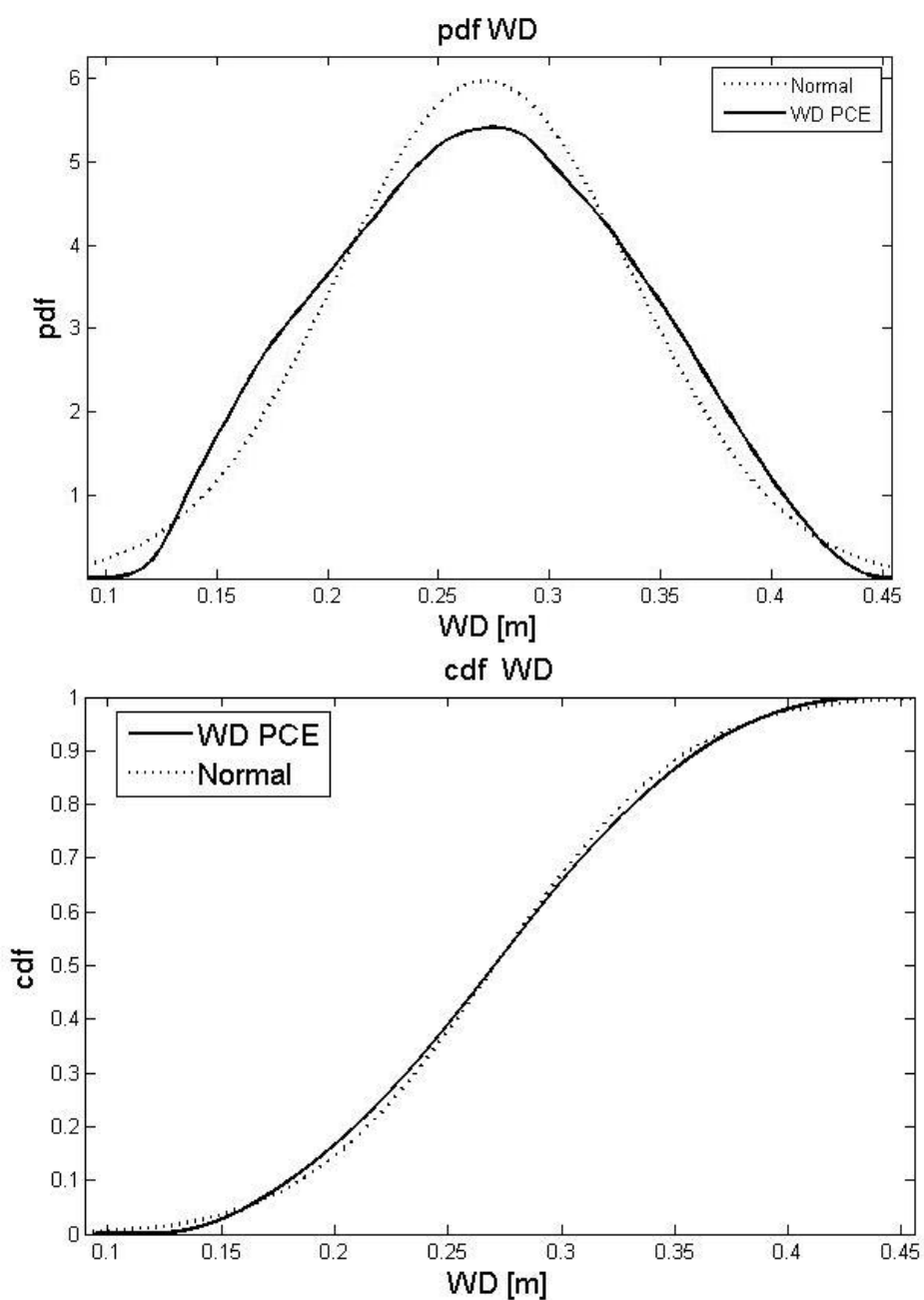


Figura 4.13. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per WD

Tabella 4.2. Parametri della distribuzione Normale relativa a WD stimati mediante ML.

<i>Variabile di stato globale</i>	Normale	
	μ	σ
WD	0.271	0.0669

La larghezza della zona di transizione assume un andamento prossimo ad una normale. I valori sono debolmente dispersi attorno al valore medio. Per la variabilità dei parametri assunta è quindi possibile ricavare un'informazione sull'andamento medio della zona di transizione e sulla dispersione dei valori attorno alla media. Sfruttando la cdf possiamo poi definire quale sia la probabilità che WD sia inferiore ad un assegnato valore. Ricaviamo ad esempio $P_{PCE}(WD < 0.3) = 0.671$ direttamente dalla cdf costruita con la PCE ed $P_{Normal}(WD < 0.3) = 0.6686$ con la cdf espressa da una normale.

Per la posizione della linea ad iso-concentrazione relativa al 50% sul fondo del dominio i risultati sono riportati in Figura 4.14. In Tabella 4.3 si riportano i parametri della distribuzione Gamma calcolati mediante ML.

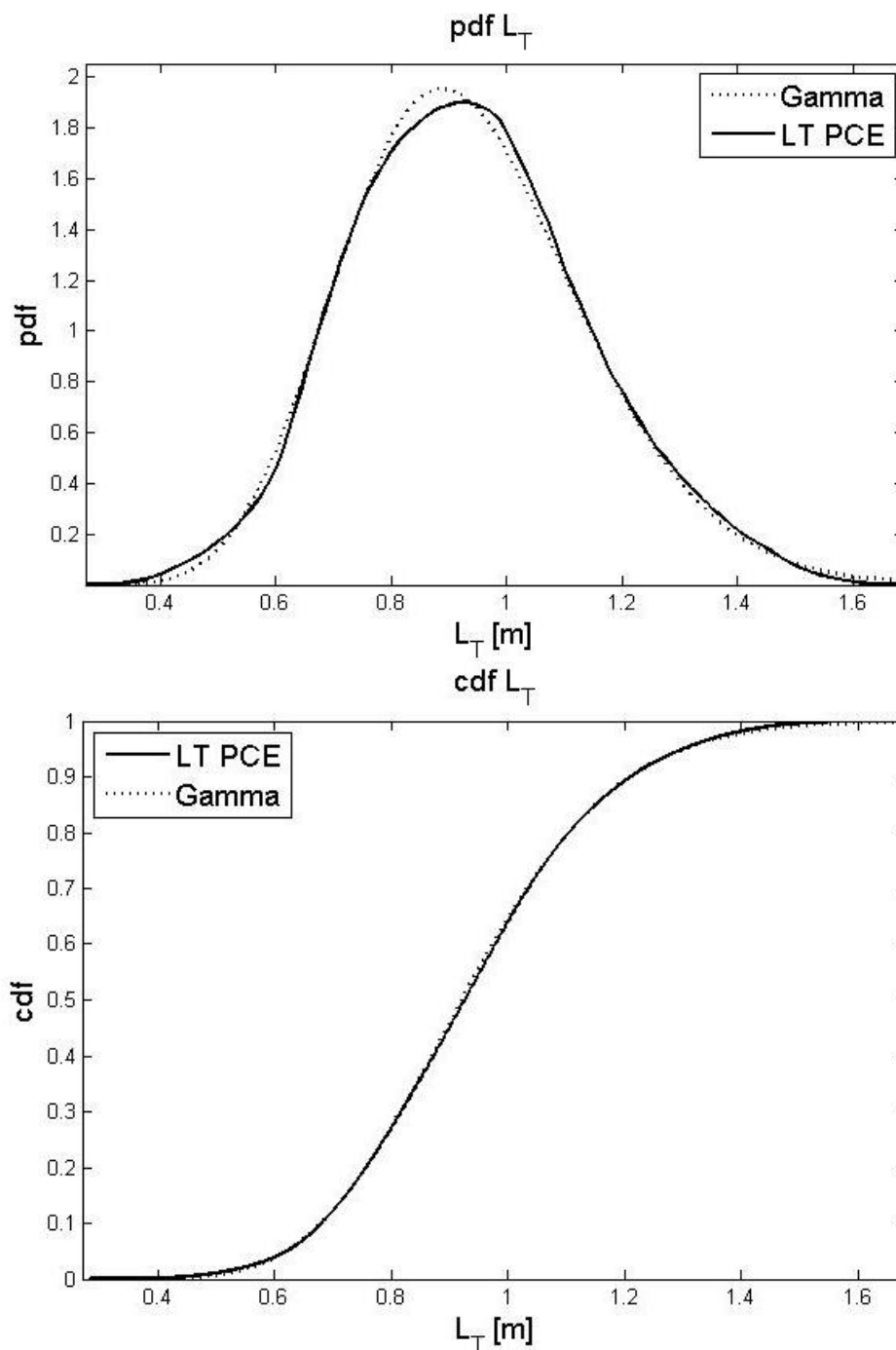


Figura 4.14. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per L_T .

Tabella 4.3. Parametri della distribuzione Gamma relativa a L_T stimati mediante ML.

<i>Variabile di stato globale</i>	α	Gamma β
L_T	20.16	0.046

La variabile di stato globale che caratterizza la profondità dell'intrusione salina ha un andamento prossimo ad una distribuzione Gamma. I valori dell'estensione dell'intrusione salina mostrano una dispersione attorno ad un valore centrale.

Mediante la cdf possiamo definire ad esempio quale sia la probabilità che L_T sia inferiore ad un determinato valore. Otteniamo ad esempio $P_{PCE}(0.9 < L_T < 1) = 0.638 - 0.449 = 0.189$ direttamente dalla cdf costruita con la PCE ed $P_{Gamma}(0.9 < L_T < 1) = 0.647 - 0.461 = 0.186$ con la cdf espressa da una distribuzione Gamma .

Per la posizione verticale della linea ad iso-concentrazione relativa al 50% su lato mare i risultati sono riportati in Figura 4.15. In Tabella 4.4 si riportano i valori della distribuzione Valore Estremo calcolati mediante ML.

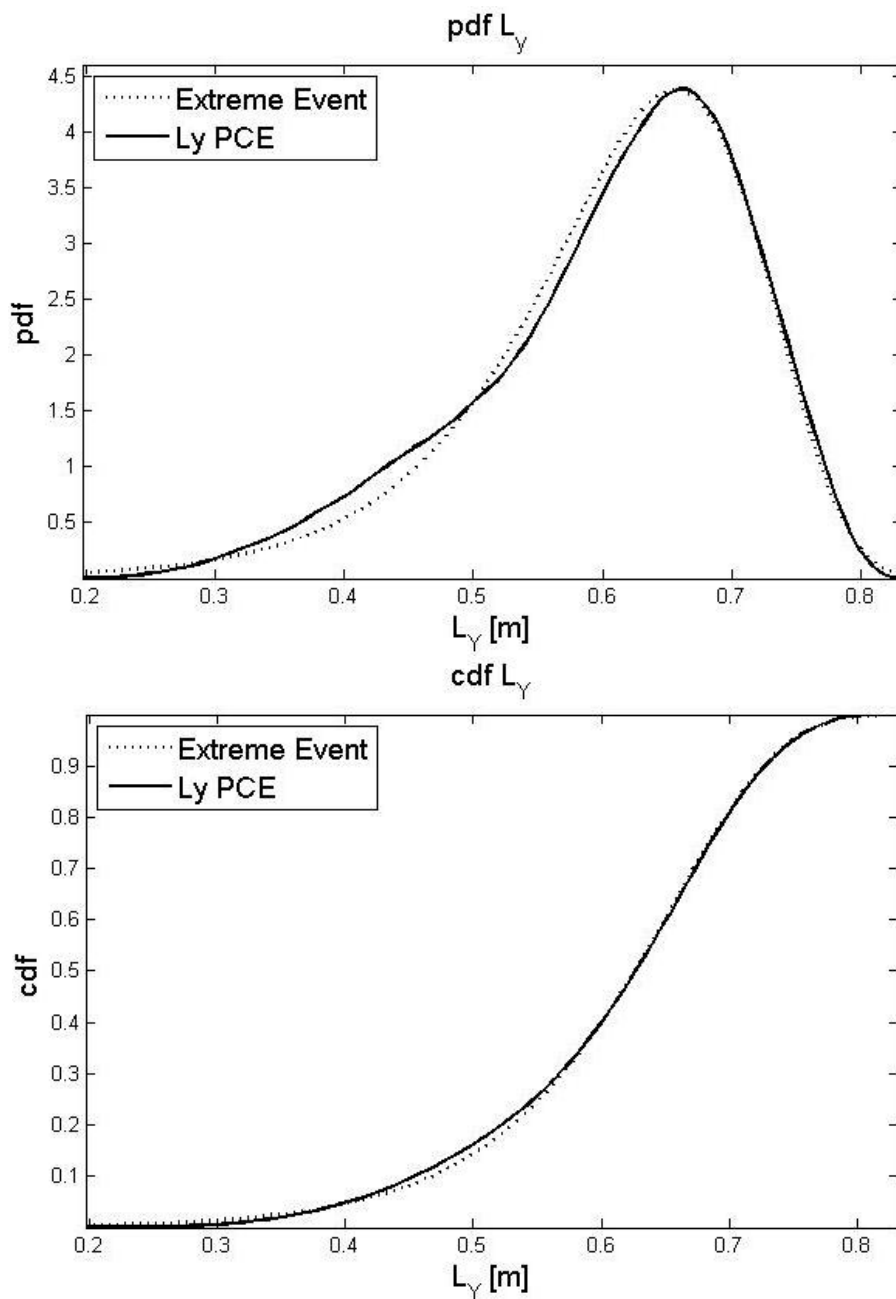


Figura 4.15. Funzione di distribuzione di probabilità e funzione di distribuzione di probabilità cumulata per L_Y

Tabella 4.4. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a L_Y stimati mediante ML.

Variabile di stato globale	Valore Estremo	
	μ	σ
L_Y	0.656	0.084

La variabile di stato globale che caratterizza la posizione verticale lato mare del cuneo salino ha un andamento prossimo ad una distribuzione Valore Estremo. Generalmente una tale distribuzione viene utilizzata per analizzare l'andamento di valori massimi. I valori di L_Y sono fortemente concentrati attorno alla media. Una giustificazione fisica risiede nel rispetto della continuità: il flusso d'acqua fresca imposto, q_b , deve defluire a mare, così facendo si oppone al cuneo d'acqua salata

Mediante la cdf possiamo definire ad esempio quale sia la probabilità che L_Y sia inferiore ad un determinato valore. Otteniamo ad esempio $P_{PCE}(0.7 < L_Y < 0.8) = 0.998 - 0.809 = 0.189$ direttamente dalla cdf costruita con la PCE ed $P_{ValoreEstremo}(0.7 < L_Y < 0.8) = 0.991 - 0.814 = 0.177$ con la cdf espressa da una distribuzione Valore Estremo.

Per la dispersione delle concentrazioni sul fondo del dominio i risultati ottenuti sono riportati in Figura 4.15. In Tabella 4.5 si riportano i parametri della distribuzione Normale calcolati mediante ML.

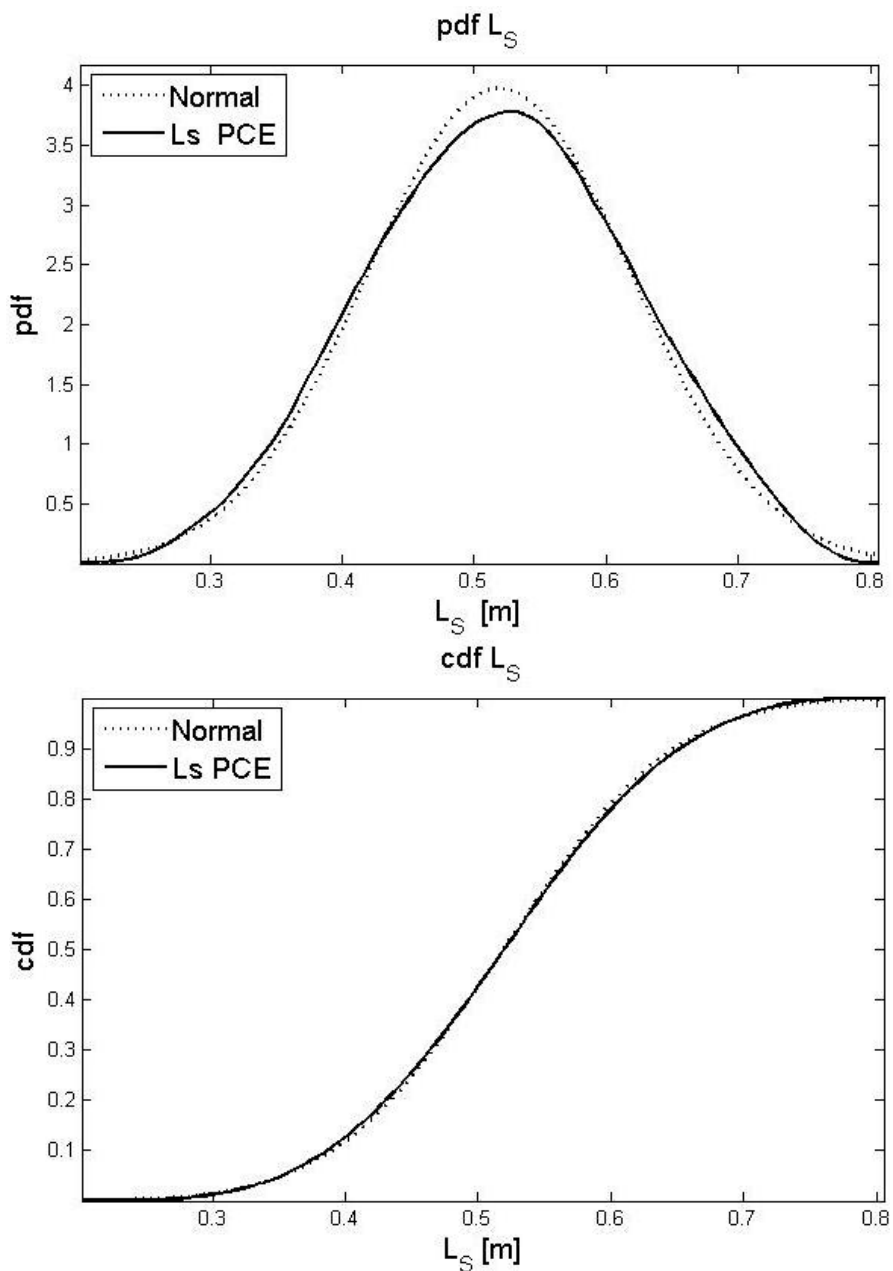


Figura 4.16. Funzioni di distribuzione di probabilità e funzioni di distribuzione di probabilità cumulata per L_S

Tabella 4.5. Parametri della distribuzione Normale relativa a L_S stimati mediante ML.

Variabile di stato globale	Normale	
	μ	σ
L_S	0.519	0.100

La dispersione delle concentrazioni sul fondo del dominio assume un andamento prossimo ad una normale. I valori di L_S sono debolmente dispersi attorno ad un valore medio. Per l'insieme di parametri esplorato è possibile quindi caratterizzare L_S con la media è il suo s.q.m ,vedi Tabella 4.1.

Sfruttando la cdf possiamo definire ad esempio:
 $P_{PCE}(0.4 < L_S < 0.6) = 0.778 - 0.125 = 0.653$ direttamente dalla cdf costruita con la PCE ed $P_{Normal}(0.4 < L_S < 0.6) = 0.789 - 0.174 = 0.672$ con la cdf espressa secondo una Normale.

Per la percentuale di area contaminata con una concentrazione relativa superiore al 5% i risultati ottenuti sono riportati in Figura 4.17. In si riportano i parametri della distribuzione Normale calcolati mediante ML. Risultati migliori si sono ottenuti mediante una trasformazione logaritmica dei valori di AC .

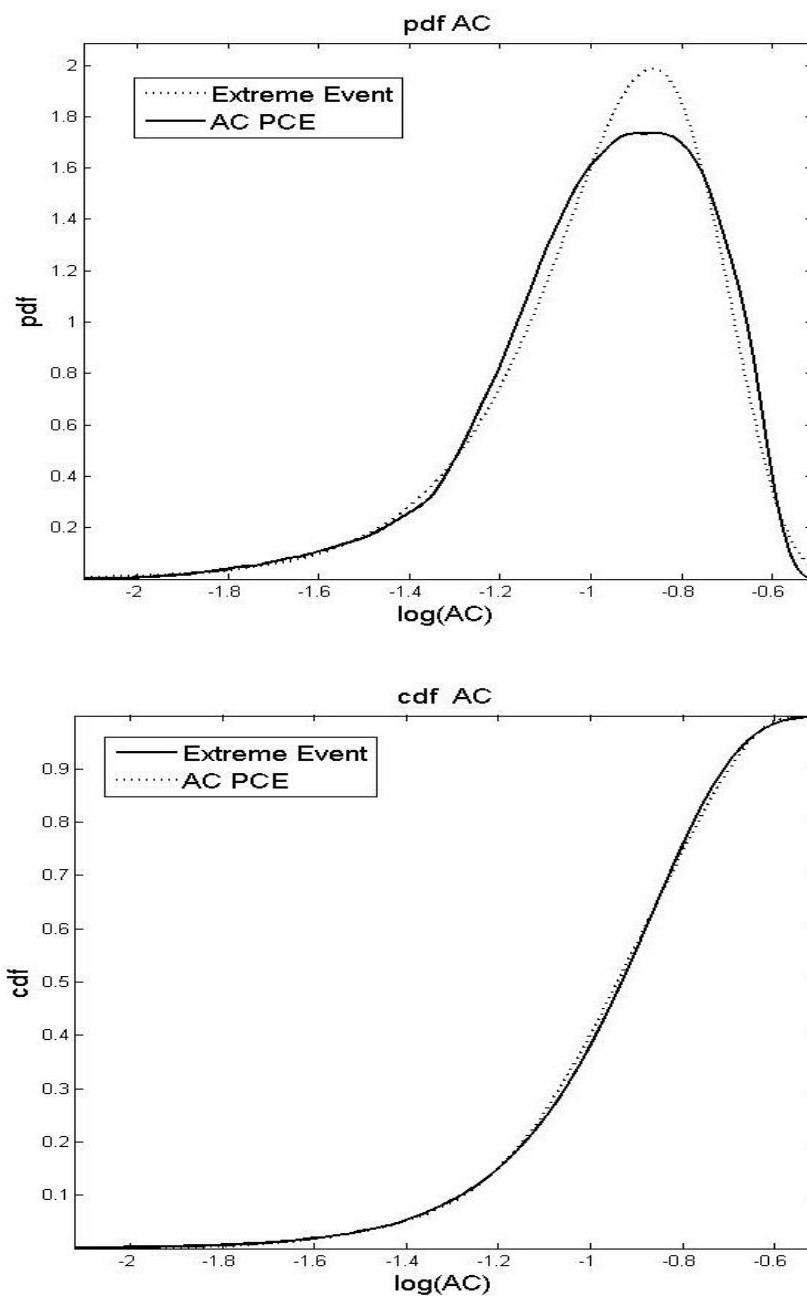


Figura 4.17. Funzione di distribuzione di probabilità e funzione di distribuzione di probabilità cumulata per AC

Tabella 4.6. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a AC stimati mediante ML.

<i>Variabile di stato globale</i>	Valore Estremo	
	μ	σ
AC	-0.8642	0.185

La percentuale di area contaminata con una concentrazione relativa superiore al 5% ha un andamento prossimo ad una distribuzione Valore Estremo. Questo andamento è giustificato dal fatto che nei processi di SWI investigati nella tesi, una percentuale di area contaminata si è sempre ricavata ottenuta. Inoltre il valore di AC può crescere sia per effetto della dispersione sia per effetto delle permeabilità idrauliche, giustificando la tendenza della pdf ricavata.

Mediante la pdf possiamo definire, ad esempio: esempio $P_{PCE}(AC < 0.5) = 0.921$ direttamente dalla cdf costruita con la PCE ed $P_{ValoreEstremo}(AC < 0.5) = 0.8836$ con la cdf espressa da una distribuzione Valore Estremo .

4.2.2 DISTRIBUZIONI DI PROBABILITÀ CONGIUNTE E CONDIZIONATE

In questo paragrafo vengono analizzate le distribuzioni di probabilità congiunte per le *variabili di stato globali* maggiormente correlate, secondo il valore del coefficiente di Pearson. I coefficienti di correlazione di Pearson calcolati mediante i coefficienti delle PCE per le *variabili di stato globali*, equazione (3.2.21), sono riportati in Tabella 4.7 nella parte inferiore. Nella parte superiore si riportano i coefficienti di Pearson calcolati sulla base delle 30 realizzazioni ricavate mediante SUTRA. Vengono evidenziati i coefficienti di Pearson più elevati.

Tabella 4.7. Coefficienti di correlazione di Pearson per le *variabili di stato globali* ottenuti mediante i coefficienti delle PCE (blu) e mediante simulazioni in SUTRA (verde).

	WD	L_T	L_S	L_Y	AC
WD	1	-0.487	0.744	-0.210	0.492
L_T	-0.506	1	-0.022	0.818	0.498
L_S	0.763	-0.181	1	-0.026	0.649
L_Y	-0.132	0.774	-0.081	1	0.578
AC	0.416	0.551	0.487	0.698	1

Dalla Tabella 4.7 si nota come i coefficienti calcolati mediante i coefficienti della PCE e tramite simulazioni dirette in SUTRA sono molto prossimi. Valutando i coefficienti elaborati possiamo dedurre che:

- L_T e WD sono inversamente correlate. Questo andamento è giustificabile ricordando come la dispersione aumenti la larghezza della zona di transizione e al contempo riduca la penetrazione dell'intrusione salina.
- WD e L_S sono positivamente correlati. Incrementando i coefficienti di dispersione queste due grandezze aumentano.
- L_T e L_Y sono correlati positivamente. All'aumentare dei valori della permeabilità idraulica, in direzione verticale e orizzontale, si ha un'intrusione

maggiore sia come profondità d'intrusione sia come elevazione del cuneo salino.

- AC risulta essere correlato positivamente con le varie grandezze analizzate. Questo andamento è chiaramente giustificato dal fatto che al crescere di ognuna delle *variabili di stato globali* inevitabilmente si ha un aumento della area contaminata. In seguito questa grandezza non è stata quindi analizzata.

Di seguito si presentano le funzioni di distribuzione di densità di probabilità congiunta (j-pdf, joint probability distribution function) e le distribuzioni di probabilità cumulata congiunta (j-cdf) per le coppie di grandezze sopra evidenziate. Le funzioni di distribuzione di densità di probabilità congiunta vengono presentate in termini di linee ad iso-probabilità relativa rispetto alla massima densità di probabilità ottenuta di caso in caso. Le funzioni di distribuzione di probabilità cumulata sono presentata in termini di linee ad iso-probabilità cumulata.

In Figura 4.18 si riporta la j-pdf e in Figura 4.19 la j-cdf per L_T e WD .

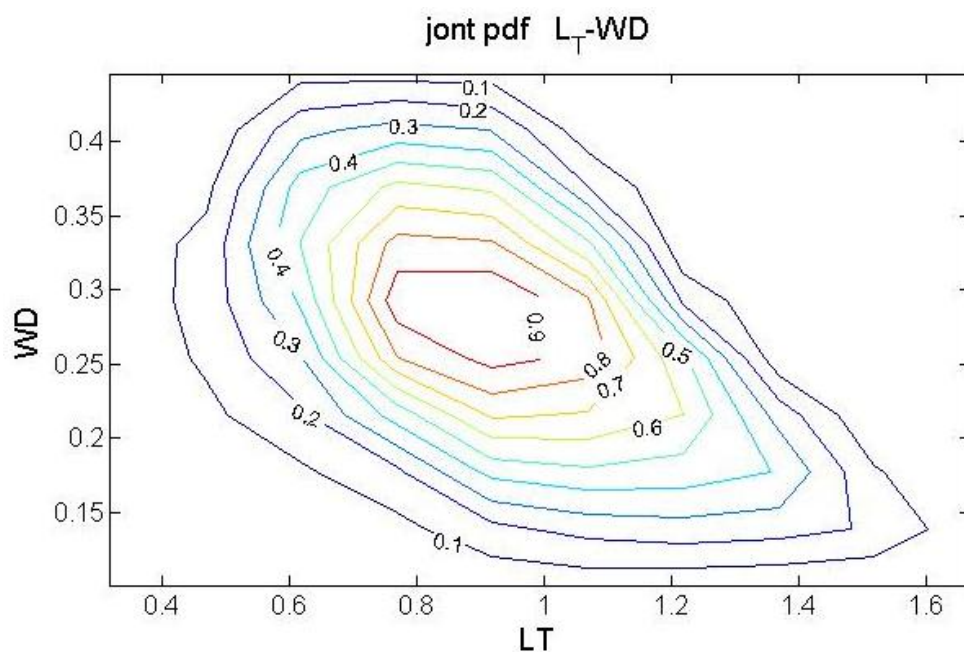


Figura 4.18. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di *variabili di stato globali* L_T e WD

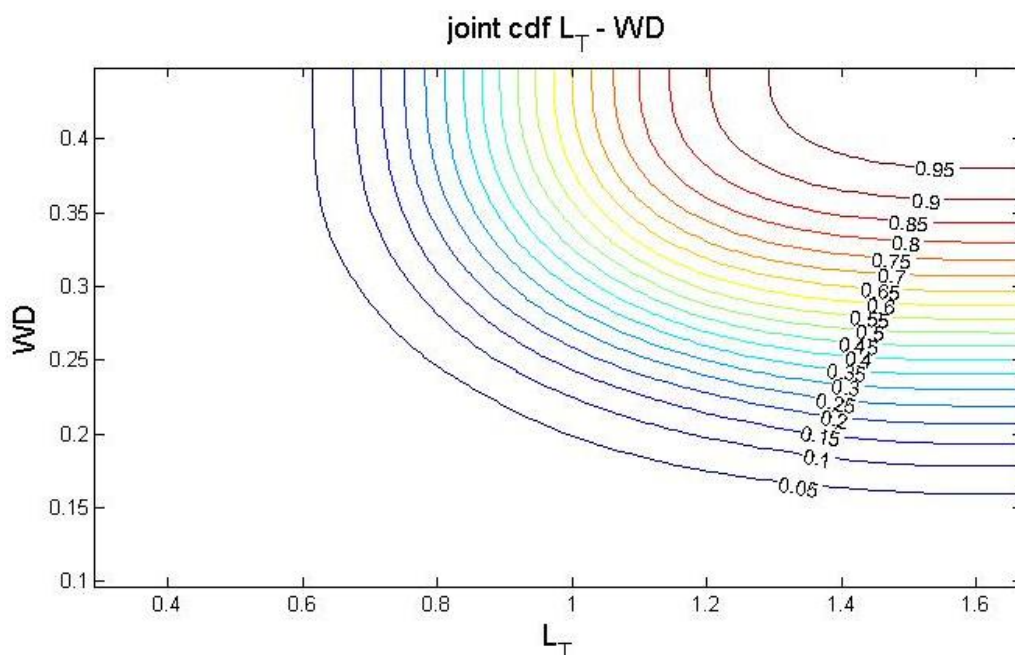


Figura 4.19 Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di variabili di stato globali L_T e WD

Dalla Figura 4.18 si nota come le due grandezze siano inversamente correlate. Inoltre si osserva come le regioni del piano (L_T, WD) esterne alla linea ad iso-probabilità 0.1, cioè dove la densità di probabilità è minore, si possano ritenere poco probabili. Sfruttando la j-cdf proposta in Figura 4.19 è possibile definire la probabilità che L_T e WD siano contemporaneamente inferiori a determinati valori, oppure siano compresi tra intervalli di valori fissati. Ad esempio $\Pr(1.4 < L_T < 1.6; 0.25 < WD < 0.3) = 0.708\%$, il basso valore di probabilità ottenuto indica che l'intervallo di valori scelto è estremamente improbabile, infatti la regione del piano (L_T, WD) così delimitata è caratterizzata da bassi valori di densità di probabilità congiunta. Scegliendo invece una regione associata a valori di densità di probabilità congiunta elevata si ottengono valori di probabilità maggiori, ad esempio $\Pr(0.8 < L_T < 1; 0.25 < WD < 0.3) = 10.6\%$.

In Figura 4.20 si riporta la j-pdf e in Figura 4.21 la j-cdf per WD e L_S .

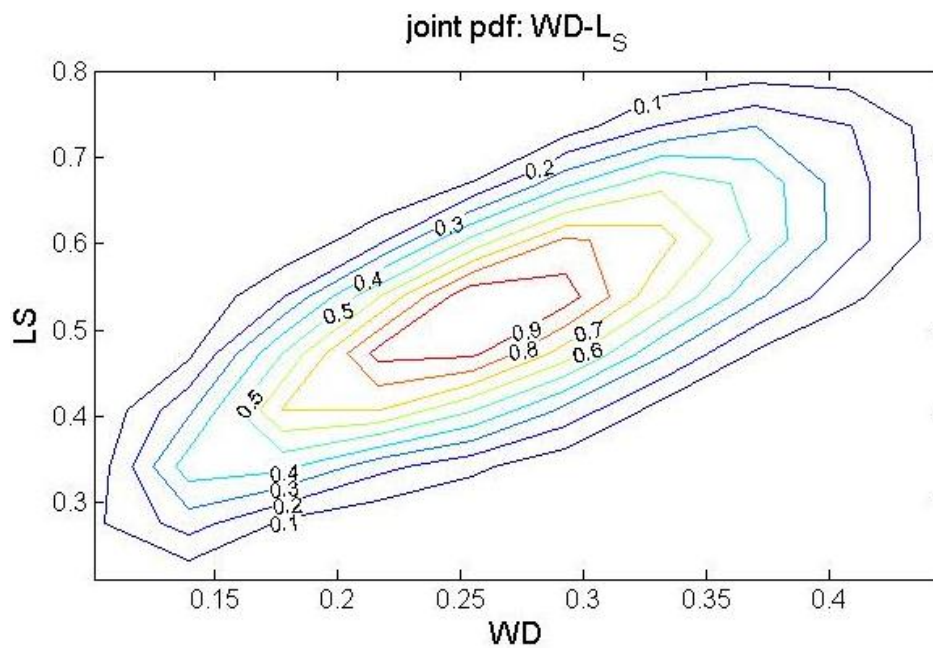


Figura 4.20. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di variabili di stato globali WD e L_S .

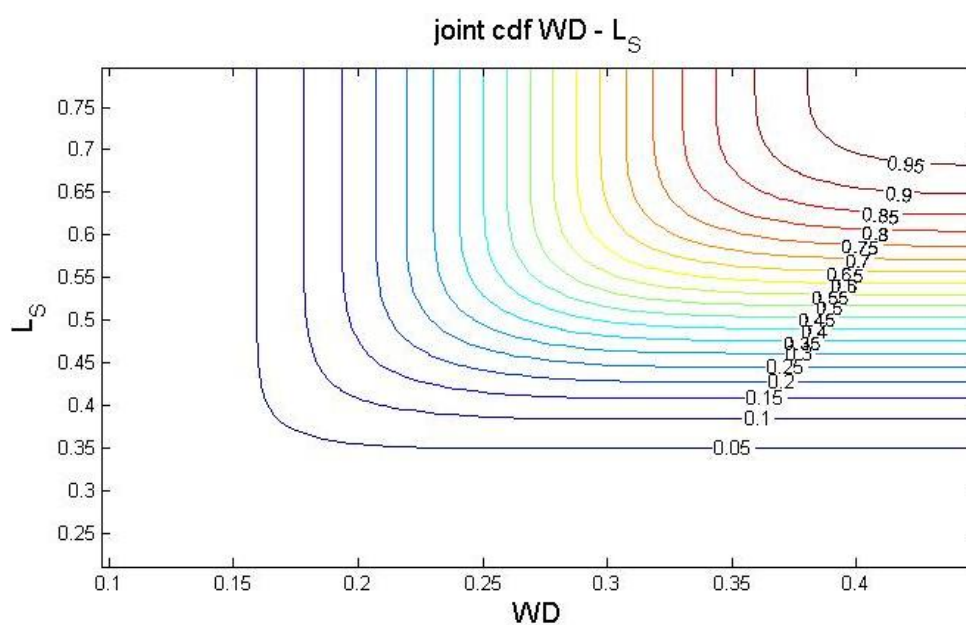


Figura 4.21 Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di variabili di stato globali WD e L_S .

Dalla Figura 4.20 si nota come le due grandezze siano positivamente correlate. La distribuzione delle linee ad iso-probabilità risulta meno dispersa rispetto a quanto

accade per L_T e WD , alla luce della maggiore correlazione che intercorre tra WD e L_S . Inoltre si osserva come le regioni del piano (WD, L_S) esterne alla linea ad isoprobabilità 0.1, cioè dove la densità di probabilità è minore, si possano ritenere poco probabili. Sfruttando la j-cdf proposta in Figura 4.21 è possibile definire la probabilità che WD e L_S siano contemporaneamente inferiori a determinati valori, oppure siano compresi tra intervalli di valori fissati. Ad esempio $\Pr(0.35 < WD < 0.4; 0.4 < L_S < 0.45) = 0.208\%$, il basso valore di probabilità ottenuto indica che l'intervallo di valori scelto è estremamente improbabile, infatti la regione del piano (WD, L_S) così delimitata è caratterizzata da bassi valori di densità di probabilità.

In Figura 4.22 si riporta la j-pdf e in Figura 4.23 la j-cdf per L_T e L_Y .

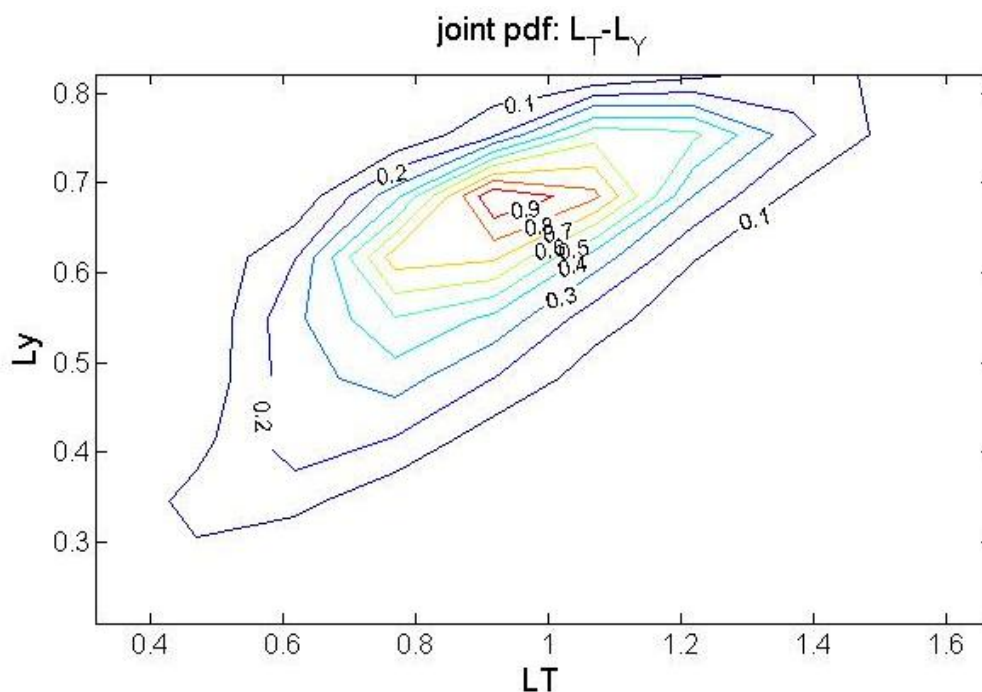


Figura 4.22. Distribuzione di densità di probabilità congiunta per la coppia di variabili di stato globali L_T e L_Y .

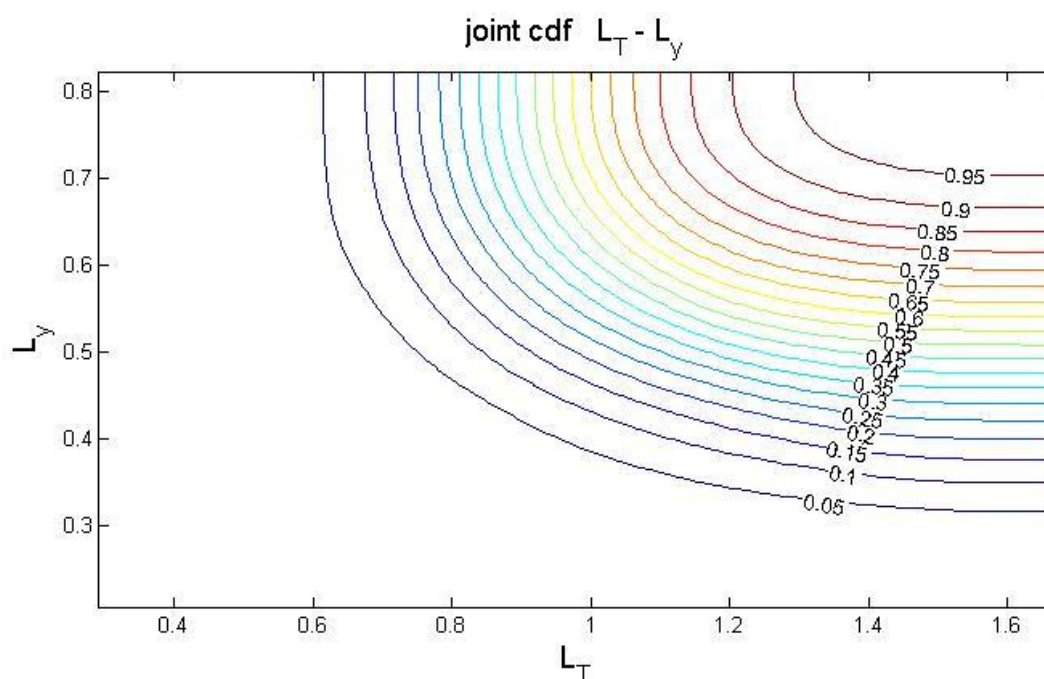


Figura 4.23 Distribuzione di probabilità cumulata congiunta per la coppia di variabili di stato globali L_T e L_Y .

Dalla Figura 4.22 si nota come le due grandezze siano positivamente correlate. La distribuzione delle linee ad iso-probabilità risulta meno dispersa rispetto a quanto accade per L_T e WD , alla luce della maggiore correlazione che intercorre tra L_T e L_Y . Inoltre si osserva come le regioni del piano (WD, L_Y) esterne alla linea ad iso-probabilità 0.1, cioè dove la densità di probabilità è minore, si possano ritenere poco probabili. Sfruttando la j-cdf proposta in Figura 4.23 è possibile definire la probabilità che L_T e L_Y siano contemporaneamente inferiori a determinati valori, oppure siano compresi tra intervalli di valori fissati. Ad esempio $\Pr(L_T < 1; L_Y < 0.6) = 43.3\%$.

Il passo successivo è stata la costruzione di densità di probabilità condizionate. Quest'ultime sono strumenti utili a rispondere a domande del tipo: conoscendo la posizione della iso-concentrazione al 50% sul fondo del dominio, quale è la probabilità che la larghezza della zona di transizione sia minore di un dato valore. Mediante questa procedura la qualità dell'informazione che si ottiene per una *variabile di stato globale*, conoscendo il valore di una seconda, è più elevata quanto più sono correlate. Maggiori dettagli sulle funzioni di distribuzione di probabilità condizionate si sono trovati nell'appendice B.

Di seguito si riporta un esempio della procedura utilizzata. Supponendo di conoscere il valore $L_T = 1m$ è possibile condizionare le distribuzioni di probabilità delle restanti *variabili di stato globali*, identificando, tra le 600'000, le realizzazioni caratterizzate da un valore di L_T prossimo a 1m. Nell'esempio proposto si è scelto uno scarto di +6cm. Utilizzando dati di campo reali si potrebbe impiegare l'errore di misura associato ad L_T . Le realizzazioni condizionate al valore L_T sono rappresentabili come una nuvola di punti nello spazio (WD, L_Y, L_S) , vedi Figura 4.24. Si possono ora costruire le pdf marginali condizionate per WD, L_Y, L_S . Avendo scelto come dato di partenza una grandezza fortemente correlata con L_Y , per questa grandezza si ottiene una pdf marginale condizionata caratterizzata da una minor variabilità, rispetto alla pdf marginale di Figura 4.15. I risultati per L_Y sono riportati in Figura 4.25 e in

Tabella 4.8. Tramite la pdf marginale condizionata di L_Y si possono definire nuovi livelli di probabilità ottenendo grossi miglioramenti per quanto riguarda la riduzione delle code. In maniera analoga si possono costruire le pdf marginali condizionate per WD, L_S , ma alla luce della minor correlazione con L_T , specialmente per L_S , la riduzione della dispersione dei valori non risulta così marcata. I valori condizionati di L_Y ed WD sono nuovamente correlati $\rho_{Pearson} = 0.52$, si può scegliere quindi di condizionare ulteriormente la pdf di WD al valore della moda per la pdf di L_Y condizionata ad $L_T = 1m$, cioè $mod a(L_Y | L_T) = 0.668m$. Il risultato è riportato in Figura 4.26 e Tabella 4.9. Come si osserva in Figura 4.26 la distribuzione si allontana da una distribuzione normale. Il procedimento può essere iterato in maniera analoga

per ricavare la pdf di L_S condizionando nell'ordine rispetto a L_T , alla moda di $L_Y | L_T$ e rispetto alla media della distribuzione di $WD | (L_T, \text{mod } a(L_Y | L_T))$, che nell'esempio proposto vale 0.274m.

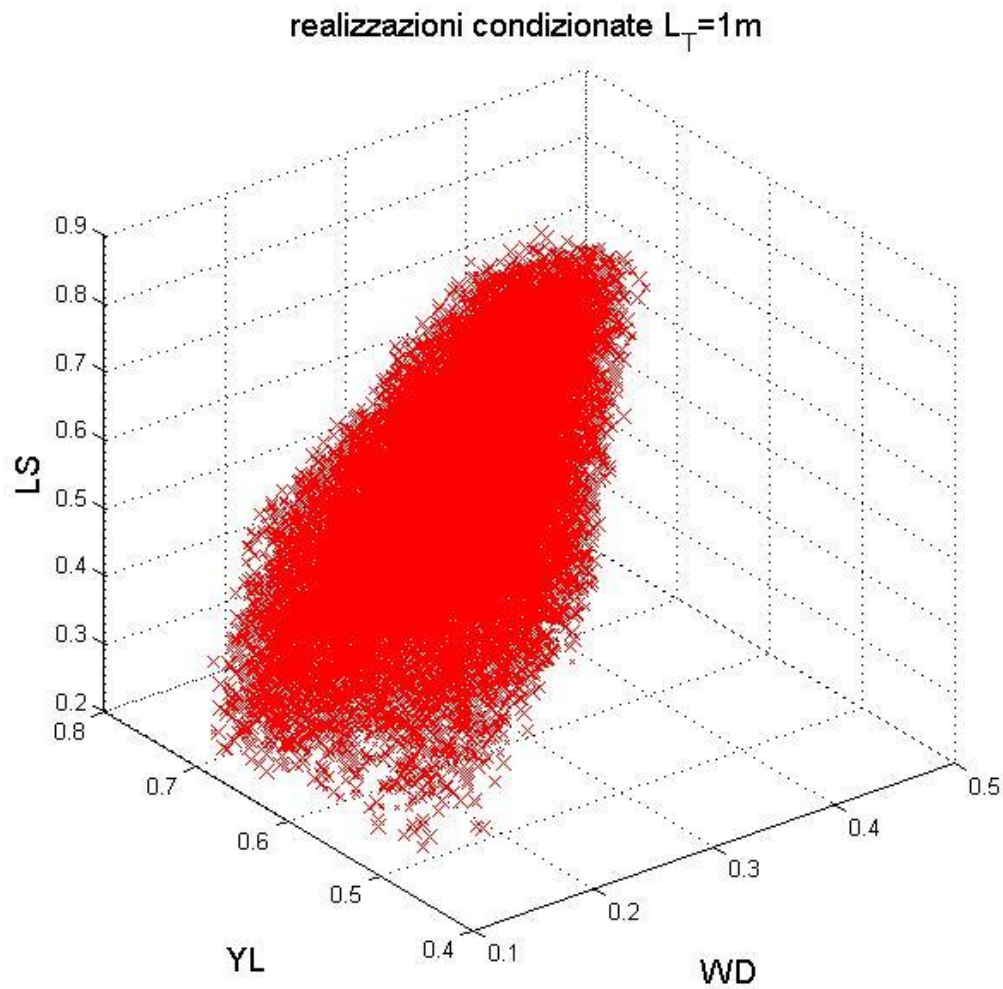


Figura 4.24. Rappresentazione delle realizzazioni condizionate ad L_T

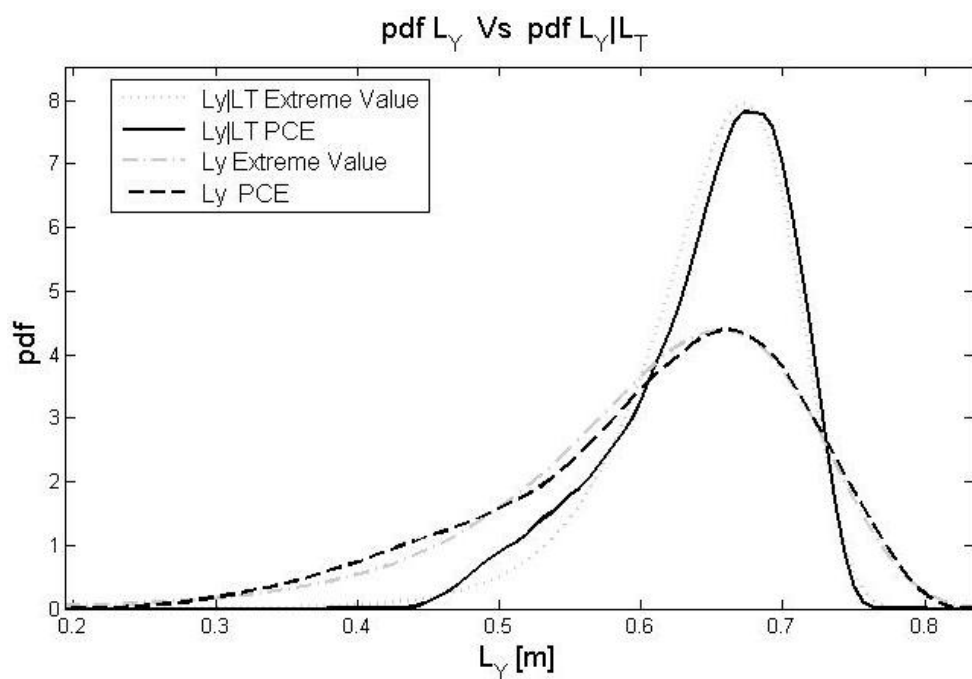


Figura 4.25. Confronto funzione di distribuzione di probabilità di L_Y condizionata su L_T ed funzione di distribuzione di probabilità marginale di L_Y .

Tabella 4.8. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a L_Y condizionato su L_T stimati mediante ML.

Variabile di stato globale	Valore Estremo	
	μ	σ
L_Y	0.672	0.047

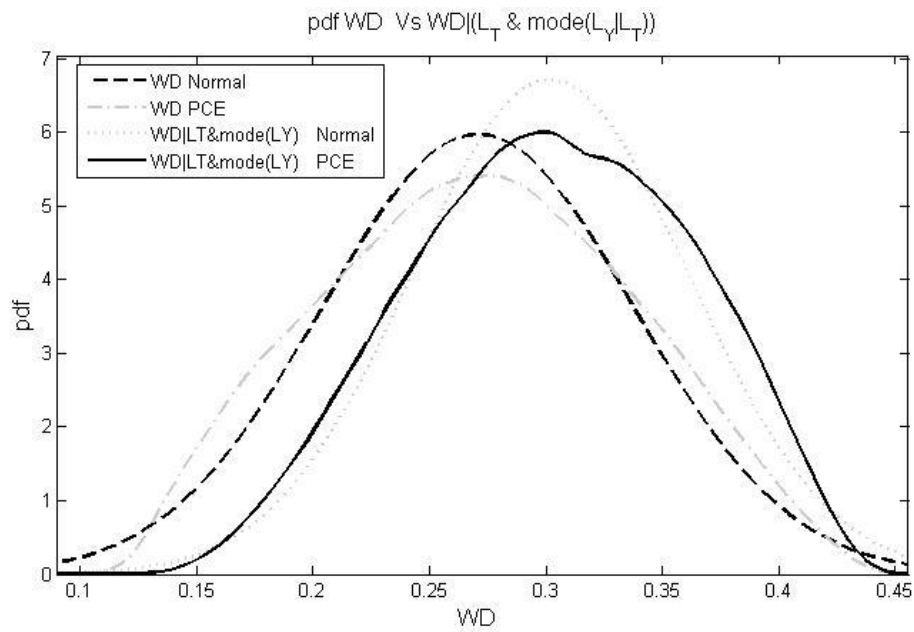


Figura 4.26. Confronto tra la funzione di distribuzione di probabilità di WD condizionata su L_T e la moda di $L_Y | L_T$ e la distribuzione di probabilità marginale di WD .

Tabella 4.9. Parametri della distribuzione Valore Estremo relativa a WD condizionata su L_T e la moda di $L_Y | L_T$.

Variabile di stato globale	Normale	
	μ	σ
WD	0.284	0.06

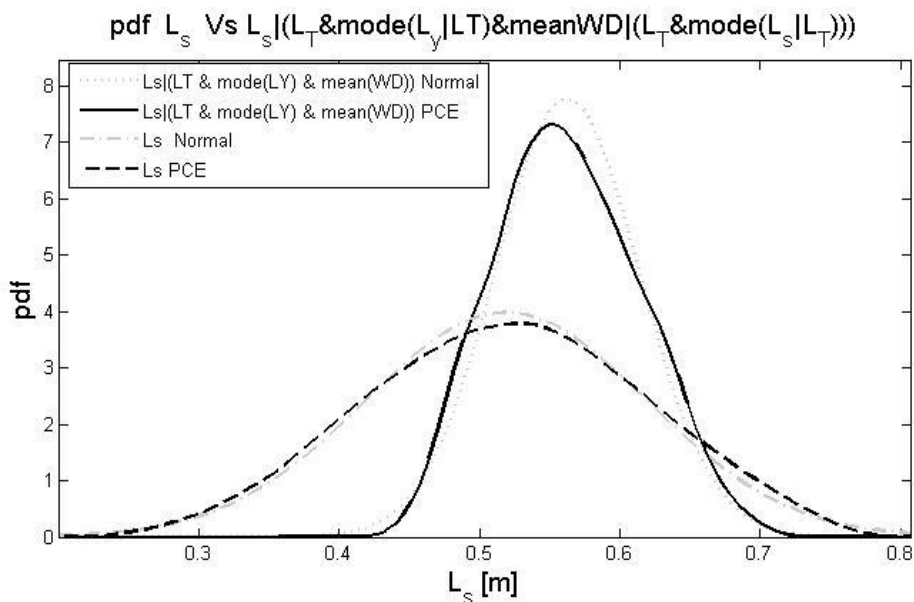


Figura 4.27. confronto tra funzione di distribuzione di probabilità di L_S condizionata su L_T e la moda di $L_Y | L_T$ e la media di $WD | (L_T, \text{moda}(L_Y | L_T))$ e tra la funzione di distribuzione di probabilità marginale di L_S .

La procedura ora esposta può essere applicata per differenti valori e tipologie di grandezza di partenza. Il condizionamento successivo può essere effettuato o meno in base alla tipologia di correlazione che si evidenzia tra le grandezze. Si ricorda che la procedura fornisce risultati di tipo statistico. La procedura proposta può essere sfruttata per ricavare informazioni pratiche conoscendo un valore una *variabile di stato globale* si possono caratterizzare le restanti ed eventualmente pianificare indagini di campo successive.

Di seguito si riportano il confronto tra i risultati ottenuti con la procedura ora proposta e i valori calcolati mediante SUTRA, per 30 configurazioni differenti. I risultati sono riportati in Tabella 4.10 e in

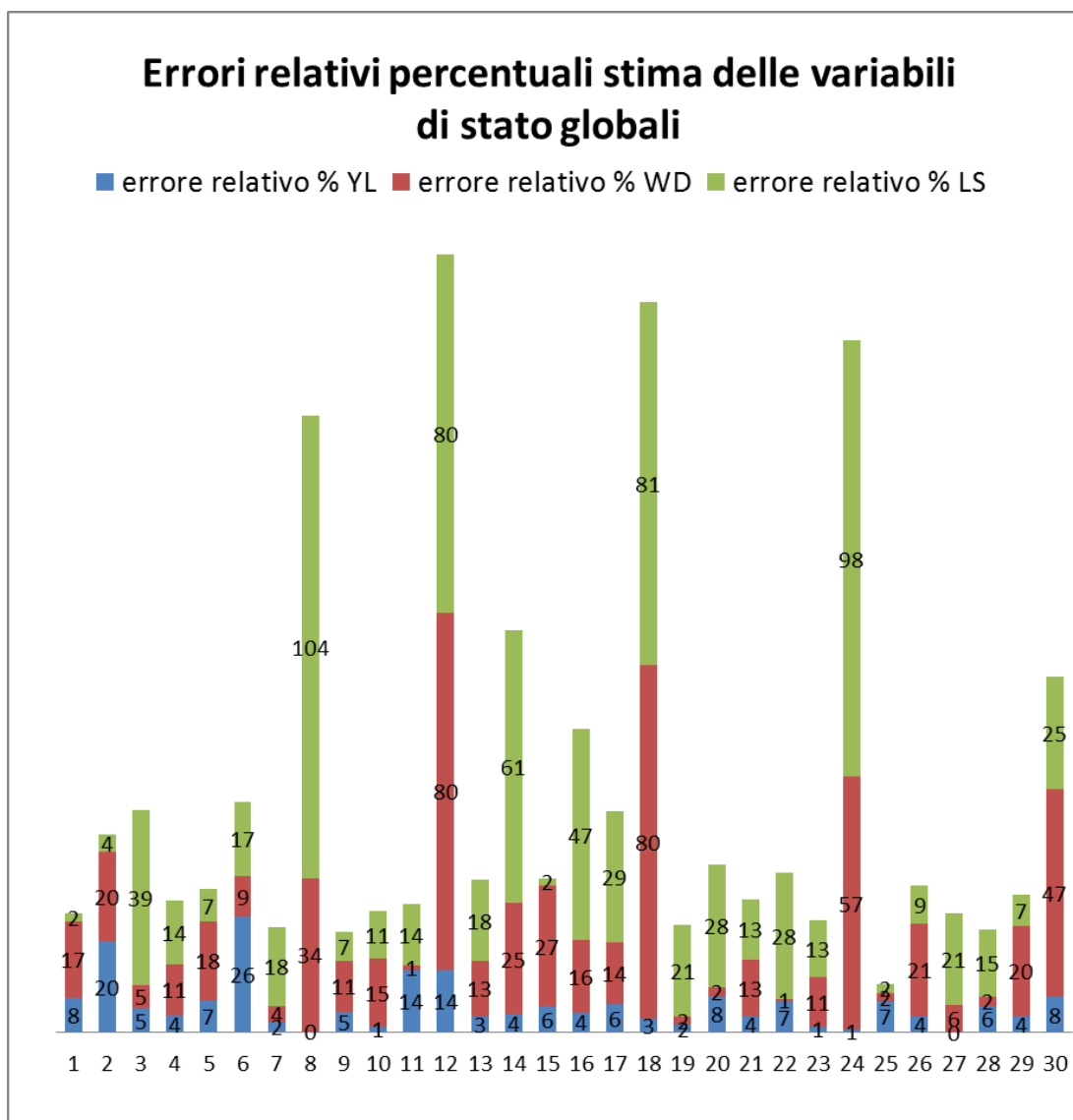
Figura 4.28 si riportano i valori dell'errore relativo percentuale tra la stima effettuata con l'uso delle pdf condizionate e il valore ricavato mediante SUTRA. Si evidenziano piccoli errori relativi nella stima di L_Y . Si nota come gli errori relativi maggiori siano per WD e per L_S vista la minor correlazione con la grandezza iniziale scelta. Inoltre per errori relativi elevati di WD , in generale seguono errori relativi elevati di L_S . Si

può notare come la procedura sia soddisfacente in termini probabilistici: grandi errori relativi sono riportati per 9 casi dei 30 analizzati.

Tabella 4.10. Confronto tra i valori della variabili di stato globali calcolate con SUTRA e ricavate mediante le pdf condizionate

L_T	$L_{Y-SUTRA}$	WD_{SUTRA}	$L_{S-SUTRA}$	L_{Y-pdf}	WD_{pdf}	L_{S-pdf}
0.5231	0.3684	0.3207	0.5622	0.3404	0.2651	0.5718
0.5795	0.3137	0.2419	0.5096	0.3778	0.2904	0.5287
0.6479	0.5109	0.3340	0.4768	0.4833	0.3508	0.6640
0.7074	0.6073	0.3822	0.5286	0.5843	0.3388	0.6043
0.8117	0.6233	0.3395	0.6173	0.6687	0.2800	0.6620
0.8162	0.4892	0.3476	0.7415	0.6157	0.3160	0.6172
0.8359	0.6012	0.3288	0.5546	0.6152	0.3171	0.6525
0.8410	0.6209	0.2357	0.3320	0.6196	0.3163	0.6767
0.8526	0.5989	0.2985	0.5992	0.6268	0.3323	0.6385
0.8679	0.6633	0.3952	0.6209	0.6547	0.3350	0.6872
0.8918	0.5748	0.3359	0.6257	0.6550	0.3328	0.7131
0.8986	0.5662	0.1772	0.3841	0.6446	0.3193	0.6927
0.9165	0.6820	0.3655	0.5954	0.6584	0.3196	0.7031
0.9179	0.6818	0.2652	0.4485	0.6550	0.3316	0.7224
0.9294	0.6983	0.4119	0.7043	0.6578	0.3005	0.6921
0.9346	0.6310	0.2841	0.4751	0.6590	0.3300	0.7000
0.9456	0.6177	0.2656	0.4629	0.6570	0.3021	0.5993
0.9533	0.6593	0.1686	0.3559	0.6783	0.3027	0.6451
0.9662	0.6670	0.3064	0.5215	0.6786	0.3013	0.6294
0.9896	0.6250	0.2744	0.5171	0.6753	0.2799	0.6598
0.9912	0.6935	0.3463	0.6265	0.6687	0.3020	0.7110
0.9957	0.6256	0.3170	0.5704	0.6687	0.3190	0.7320
1.0587	0.6620	0.3299	0.6417	0.6707	0.2937	0.7242
1.0710	0.6904	0.1866	0.3465	0.6862	0.2923	0.6856
1.0797	0.6354	0.2890	0.6235	0.6799	0.2940	0.6365
1.1026	0.7238	0.3257	0.6540	0.6983	0.2579	0.7100
1.1143	0.6975	0.2469	0.5236	0.6981	0.2617	0.6318
1.2041	0.7698	0.2468	0.5854	0.7240	0.2516	0.6742
1.2053	0.7506	0.2100	0.5580	0.7239	0.2523	0.5972
1.4034	0.7266	0.1867	0.4755	0.6687	0.2736	0.5954

Figura 4.28. Errori relativi percentuali della stima delle variabili di stato globali mediante l'uso delle pdf condizionate.



5 **MODELLAZIONE INVERSA**

Nel presente capitolo, dopo una breve introduzione descrittiva sull'impiego e le criticità legate ai problemi di stima dei parametri, o problemi inversi, si procede con la descrizione della procedura di modellazione inversa implementata all'interno dei codici matematici in nostro possesso, utilizzati per le successive analisi.

Successivamente vengono riportati i risultati ottenuti per la procedura d'inversione. Inizialmente si è eseguita la stima dei quattro parametri caratterizzati da incertezza $(k_x, r_k, \alpha_L, \alpha_T)$, basandosi su quattro *variabili di stato globali* (L_T, WD, L_y, L_s) ma il problema è risultato mal posto. Successivamente sono presentati i risultati relativi alla stima di α_L e di α_T basandosi sempre sulle medesime quattro *variabili di stato globali*.

I paragrafi 5.1 e 5.2 del seguente capitolo sono stati scritti in collaborazione con Ivo Colombo nell'ambito della tesi ' Modellazione inversa di processi di compattazione geochimica in bacini sedimentari'.

5.1 INTRODUZIONE AI PROBLEMI DI STIMA DEI PARAMETRI

Un modello matematico volto a riprodurre un determinato fenomeno del mondo reale è generalmente utilizzato per predire il responso del sistema indagato ad una determinata sollecitazione. Condizione necessaria per poter applicare un modello matematico ad un particolare caso di interesse è la possibilità di assegnare i valori numerici a tutti i coefficienti che compaiono in esso. A tal proposito, anche eventuali condizioni iniziali e/o al contorno devono essere incluse nella lista dei coefficienti del modello e dei parametri da identificare.

Mentre gli aspetti matematici e computazionali delle predizioni di tale responso sono ragionevolmente ben sviluppati, la questione di come scegliere valori appropriati dei parametri per uno specifico dominio d'indagine non è ancora stata completamente risolta (Carrera&Neumann, 1986).

L'attività di identificazione dei valori dei coefficienti di questi modelli prende il nome di problema di stima dei parametri (*parameter estimation problem*), o problema inverso (*inverse problem*).

La risoluzione di un problema di stima dei parametri, cioè la determinazione dei valori dei coefficienti di un modello per un particolare dominio, quale può essere un acquifero, passa attraverso l'indagine del dominio stesso, sia con misurazioni di campo sia ricorrendo alla consultazione di archivi storici. L'obiettivo consiste nell'individuare intervalli spaziali e/o temporali sufficientemente estesi per i quali siano disponibili le seguenti informazioni:

- a) condizioni iniziali del sistema;
- b) sollecitazioni del sistema, ad esempio nella forma di pompaggi, ricariche naturali (infiltrazioni da precipitazione), introduzione di contaminanti, cambiamenti nelle condizioni al contorno;
- c) osservazioni (misure) dei responsi del sistema, ad esempio nella forma di distribuzioni spaziali e temporali delle variabili di stato.

Individuati tali intervalli, si assumono alcuni valori di prova (*trial values*), o di primo tentativo, dei coefficienti ricercati, si impongono nel modello le condizioni iniziali (a) e le sollecitazioni (b) note del sistema reale e si deriva il responso del

modello a tali sollecitazioni. Si comparano a questo punto i responsi osservati/misurati (c) e i responsi del modello: i valori ottimali dei coefficienti ricercati sono quelli che renderebbero identici i due set di valori delle variabili di stato. Vale la pena di ricordare che il modello è solo un'approssimazione del sistema reale, quindi non ci si deve mai aspettare che questi due set di valori siano realmente identici, inoltre, diversamente dai modelli in avanti che sono matematicamente ben-posti, i problemi inversi sono generalmente mal-posti, questo comporta che la soluzione è non unica (nonunique) e/o non stabile (unstable). Per tale ragione, quello che si cerca è il valore dei parametri indagati in grado di garantire il migliore adattamento (*best fit*) tra gli andamenti dei responsi modellati ed osservati.

Esistono varie tecniche per determinare i valori "migliori", o "ottimali", di questi coefficienti, cioè i valori che rendono i responsi misurati e predetti sufficientemente (o accettabilmente) vicini gli uni agli altri. Si noti che i valori dei coefficienti eventualmente accettati come i "migliori" per un dato modello dipendono dal criterio selezionato per valutare la bontà di adattamento (*goodness of fit*) tra i valori osservati e i valori predetti delle variabili di stato. Tale scelta è ovviamente influenzata dall'obbiettivo della modellazione.

Alcune tecniche usano l'approccio base *trial-and error*, mentre altri impiegano metodi di ottimizzazione più sofisticati (Bear,2010).

All'interno del paragrafo 5.2 viene presentata un'introduzione generale riguardante la metodologia di inversione basata sul metodo della massima verosimiglianza ML (*Maximum Likelihood*) e la procedura di stima di alcuni parametri incogniti del modello attraverso una procedura di inversione basata sulla massima verosimiglianza ML abbinandola all'utilizzo delle *sparse grid* e all'approssimazione gPCE del sistema. Come parametri incerti del modello sono scelti i valori della permeabilità orizzontale, il rapporto d'anisotropia e i coefficienti di dispersività.

Prima di descrivere la procedura di modellazione inversa implementata all'interno dei modelli matematici utilizzati per le analisi, si ritiene opportuno richiamare l'attenzione su quali siano le principali criticità legate alla modellazione inversa:

La non unicità e/o la non stabilità della soluzione di un problema di stima dei parametri in quanto, diversamente dai modelli in avanti che sono matematicamente ben-posti, i problemi inversi sono generalmente mal-posti;

La necessità che la variabile di stato (di cui si possiedono alcune misure) mostri buona sensibilità nei confronti del parametro da stimare, altrimenti, per quanto dettagliate possano essere le nostre misure, diventa impossibile stimare il parametro in questione. In altre parole, non importa quanto un dato sia fornito in maniera completa: condizione necessaria per la buona stima di un parametro incognito è che tale parametro sia legato alla variabile di stato osservata, o che la variabile di stato sia caratterizzata da elevata sensibilità nei confronti del parametro. Appurato questo legame, è possibile affermare che più accurate e complete sono le misure, migliore sarà la stima;

Le difficoltà risultanti dall'insufficienza dei dati osservati e dalla poca accuratezza di questi dati (l'effetto dovuto agli errori nei dati). I dati osservati contengono sempre degli errori. Ciò che importa è capire quanto questi errori nei dati si ripercuotano sulla stima dei parametri. La disponibilità di dati di buona qualità è essenziale per una stima dei parametri ragionevole.

5.2 PROCEDURA DI MODELLAZIONE INVERSA

Nel seguito si riporta un'introduzione generale riguardante la metodologia di inversione basata sul metodo della massima verosimiglianza ML, per lo più tratta da (Carrera&Neumann, 1986).

Si consideri un modello matematico in grado di restituire il valore di una generica variabile di stato \mathbf{Y} una volta noti i valori di tutti i parametri che compiono nel modello stesso. Si supponga di disporre di N_Y misure della variabile di stato \mathbf{Y} e di riunire in un vettore \mathbf{p} i parametri del modello da cui la variabile \mathbf{Y} dipende.

Lo scopo della modellazione inversa è quello di restituire le stime migliori di \mathbf{p} , p , basandosi sui valori misurati Y^* della variabile di stato. Mentre il valore "vero" della variabile Y rimane incognito, la soluzione inversa è tuttavia in grado di fornire una stima modificata di questa quantità: Y .

Si definiscono le seguenti quantità:

- $Y^* - Y$: "errori di misura", differenza tra il valore misurato e il valore reale incognito;
- $Y^* - \hat{Y}$: "residui", differenza tra il valore misurato e il valore stimato o calcolato;

La teoria della massima verosimiglianza è sviluppata in termini di "prior errors" che, in letteratura, sono generalmente assunti pari agli errori di misura. Nella pratica, la stima è realizzata minimizzando un criterio facente riferimento ai residui. Questi ultimi sono una combinazione degli errori di misura e degli errori dovuti all'utilizzo di un modello numerico, $Y - \hat{Y}$ (errore del modello che non può essere stimato). Perciò le quantità statistiche che entrano nel criterio di stima dovrebbero riflettere entrambe le tipologie di errore.

La discrepanza tra valori misurati Y^* e valori calcolati \hat{Y} della variabile di stato \mathbf{Y} , è dovuta a molteplici cause, tra le quali si possono annoverare ad esempio errori di lettura degli strumenti, variazioni caratterizzate da una frequenza maggiore di quella misurabile, discretizzazioni numeriche, semplificazioni sulle condizioni iniziali e/o al contorno, ecc. Questo grande numero di fattori contribuenti e l'apparente limitatezza degli errori suggerisce, sulla base del Teorema Centrale del Limite (Feller, 1970, p.240), l'ipotesi che i *prior errors* delle misure di Y siano Gaussiani con media nulla. Il fatto che

non tutti i fattori contribuenti possano essere statisticamente quantificati all'inizio, suggerisce di adottare l'atteggiamento di Neuman and Yakowitz (1979) i quali scrivono la covarianza dei *prior errors* delle misure, C_Y , come:

$$C_Y = \sigma_Y^2 V_Y \quad (5.2.1)$$

Dove V_Y è una matrice simmetrica definita positiva, inoltre può essere:

- una matrice non diagonale, se le misure presentano tra loro una qualche forma di correlazione;
- una matrice diagonale, se le misure non presentano correlazione spaziale né temporale, ottenendo:

$$C_Y = \begin{bmatrix} \sigma_{Y1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{Y2}^2 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_{Y_{Ny}}^2 \end{bmatrix} \quad (5.2.2)$$

- la matrice identità \mathbf{I} , se le misure, oltre a non presentare correlazione spaziale né temporale, sono caratterizzate dalla stessa varianza, nel qual caso avremmo

$$C_Y = \sigma_Y^2 \mathbf{I} = \begin{bmatrix} \sigma_Y^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_Y^2 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_Y^2 \end{bmatrix} \quad (5.2.3)$$

A questo punto è possibile esporre alcuni aspetti della teoria della massima verosimiglianza, ML. Sia $\mathbf{z}^* = (Y^*)$ un vettore contenente le misure disponibili della variabile di stato \mathbf{Y} , sia $\boldsymbol{\vartheta} = (\sigma_Y^2)$ un vettore di parametri statistici incogniti caratterizzanti i *prior errors*.

Se $\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\vartheta})^T$ è il vettore contenente tutti i parametri incogniti, allora la verosimiglianza, $L(\boldsymbol{\beta}/\mathbf{z}^*)$, di un ipotesi riguardante il valore di $\boldsymbol{\beta}$ data \mathbf{z}^* , cioè una struttura di modello specifica (metodo numerico), è proporzionale a $f(\mathbf{z}^*/\boldsymbol{\beta})$, la densità di probabilità di una \mathbf{z}^* osservata se $\boldsymbol{\beta}$ è vera. Dal momento che $L(\boldsymbol{\beta}/\mathbf{z}^*)$ è una funzione di parametri, essa è chiamata funzione di verosimiglianza.

Poiché la funzione di verosimiglianza è definita per una struttura di modello specifica, non è possibile effettuare una comparazione tra risultati di modelli differenti.

Tale comparazione può tuttavia essere fatta sulla base di "model identification" criteria che sono basati sul concetto di verosimiglianza.

Per una data struttura di modello, le stime ottime dei parametri sono quelle che massimizzano $L(\hat{\beta}/z^*)$, dal momento che $\hat{\beta}$ è una stima di β . Il supporto teorico a ciò è fornito dall'assioma di verosimiglianza (Edward, 1972) e da alcune delle proprietà di uno stimatore di massima verosimiglianza, specialmente la sua efficienza asintotica (Weiss and Wolfowitz, 1974). Il fatto che le stime ML non siano affette dalle one-by-one transformation dei dati permette a quest'ultime di essere trasformate (da lognormali a normali) così che $f(z^*/\beta)$ e la funzione di verosimiglianza, abbiano una conveniente forma come (o proporzionale a) una Gaussiana.

La definizione di $f(z^*/\beta)$ come la probabilità di osservare z^* se β è vera implica che i parametri sono quantità deterministiche incognite. In accordo con il concetto di verosimiglianza, l'incertezza nei parametri del modello non è dovuta alla loro natura casuale (essendo β deterministico) ma è dovuta all'insufficienza dei dati e al fatto che sono corrotti dal rumore.

Ricordando l'ipotesi secondo cui tutti i dati sono stati adeguatamente trasformati in modo da ottenere distribuzioni Gaussiane dei *prior errors*, la funzione di verosimiglianza può essere scritta come:

$$L(\beta|z^*) = f(z^*|\beta) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi|C_z|)}} \exp\left[-\frac{1}{2}(z^* - z)^T C_z^{-1}(z^* - z)\right] \quad (5.2.4)$$

dove $C_z = C_Y$ è la matrice di covarianza dei *prior errors*.

Nella pratica, le stime ML sono generalmente ottenute attraverso la minimizzazione del *Negative Log-Likelihood criterion*, NLL:

$$S = -2 \ln\left[L(\beta|z^*)\right] \quad (5.2.5)$$

Questo criterio ha la desiderabile proprietà secondo cui la log-verosimiglianza di una ipotesi, forniti tutti i dati, è la somma delle log-verosimiglianze della stessa ipotesi, ottenute considerando ogni set di dati separatamente. Perciò è relativamente semplice introdurre informazioni a priori (sui parametri o su altre variabili di stato eventualmente presenti nel modello) all'interno dello schema di stima.

Nel caso considerato, in cui i dati di calibrazione vengono presi da quattro delle *variabili di stato globali* introdotte L_T, WD, L_y, L_s e non si assumono stime a priori dei parametri incogniti, NLL assume la seguente forma:

$$NLL = \sum_{Y \in \{L_T, WD, L_y, L_s\}} \left(\frac{J_Y}{\sigma_Y^2} + N_Y \ln \sigma_Y^2 \right) + N_D \ln(2\pi) \quad (5.2.6)$$

dove:

$$J_Y = (Y - Y^*)^T V_Y^{-1} (Y - Y^*) \quad (5.2.7)$$

Il pedice Y è stato introdotto per indicare la *variabile di stato globale*, J_Y è uno scalare in quanto costituisce la somma del quadrato degli scarti, N_Y sono le misure disponibili per la *variabile di stato globale*, N_D è il numero totale di misure disponibili, e σ_Y^2 è l'errore a priori incognito della *variabile di stato globale*. Per la matrice di covarianza degli errori si è scelto la matrice identità imponendo l'assenza di correlazione spaziale e temporale tra i *prior errors*.

Dal momento che le *variabili di stato globali* dipendono dal vettore di parametri \mathbf{p} è chiaro che la minimizzazione di NLL richiede la risoluzione del problema in esame per un numero elevato (alcune migliaia) di valori di \mathbf{p} , cioè per un elevato numero di set di parametri. Nella pratica si tratta di applicare una metodologia Monte Carlo in cui vengono ottenute N simulazioni facendo girare il modello in avanti N volte, per ciascuna delle quali si prende in considerazione una differente combinazione di valori dei parametri incogniti raggruppati in \mathbf{p} . A partire dagli N responsi ottenuti attraverso la minimizzazione di NLL, è possibile trovare il set di valori \mathbf{p} che corrisponde alla stima ML di \mathbf{p} .

Appare evidente come il conseguimento di tale obiettivo possa risultare estremamente oneroso dal punto di vista computazionale, specialmente in presenza di forti non linearità del modello. Per ovviare a tale inconveniente si sfrutta il modello surrogato gPCE definito per ognuna delle *variabili di stato globale* in grado di fornire valori adeguati delle stesse per ogni combinazione dei parametri appartenente all'ipercubo utilizzato nella definizione dello spazio dei parametri.

Alla luce di tali considerazioni è lecito affermare che σ_Y^2 include sia l'errore di misura che l'errore del modello, quest'ultimo dovuto all'uso dell'approssimazione gPCE.

Un aspetto importante della stima dei parametri è l'analisi degli errori delle stime. Asintoticamente, le stime ML sono distribuite normalmente e sotto tale assunzione la distribuzione di probabilità congiunta delle stime dei parametri è completamente descritta dalla loro media e dalla matrice di covarianza. Mentre la media è la stima stessa, è possibile dimostrare come il *limite asintotico del minimo valore di varianza* (minimum variance bound asymptotic limit) della matrice di covarianza sia l'inverso della matrice di Fisher, \mathbf{F} . Nel caso in cui non siano presenti informazioni a priori, è possibile scrivere questa matrice di covarianza dei parametri Σ_p come:

$$\Sigma_p = \mathbf{F}^{-1} = \sigma_{L_T}^2 \left(\mathbf{J}_{L_T}^T V_{L_T}^{-1} \mathbf{J}_{L_T} + \sum_{Y \in \{WD, L_y, L_s\}} \lambda_Y \mathbf{J}_Y^T V_Y^{-1} \mathbf{J}_Y \right)^{-1} \quad (5.2.8)$$

Dove σ_Y^2 rappresenta la varianza delle variabile di stato Y , $\lambda_Y = \frac{\sigma_{L_T}^2}{\sigma_Y^2}$ esprime il rapporto tra la varianza degli errori per la *variabile di stato globale* Y e L_T e \mathbf{J} rappresenta la matrice Jacobiana, cioè la matrice contenente le derivate della variabile di stato in uscita (Y) rispetto ai parametri del modello valutata nei punti di misura al valore di p :

$$\mathbf{J}_Y = \begin{bmatrix} \frac{\partial Y_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Y_1}{\partial p_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial Y_m}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial Y_m}{\partial p_n} \end{bmatrix} \quad (5.2.9)$$

Σ_p è una misura della qualità delle stime dei nostri parametri ed è opportuno che essa sia la più piccola possibile. Una misura parziale della taglia di Σ_p è fornita dai suoi termini diagonali. L' i -esimo termine diagonale è il limite inferiore sulla varianza attuale della stima dell' i -esimo parametro, ma esso rappresenta solamente quello che accade quando nulla è noto riguardo tutti gli altri parametri. Quando le stime sono correlate, il

corrispondente termine diagonale di Σ_p (cioè l'i-esima varianza) può essere una misura povera dell'incertezza del parametro.

Nel caso in cui σ_Y^2 siano noti, minimizzare la (5.2.6) equivale a minimizzare il criterio generale dei minimi quadrati (general least squares criterion):

$$J = J_{L_T} + \sum_{Y \in \{WD, L_y, L_s\}} \lambda_Y J_Y \quad (5.2.10)$$

$$\lambda_Y = \frac{\sigma_{L_T}^2}{\sigma_Y^2} \quad (5.2.11)$$

Da tali relazioni è possibile constatare come piccoli valori di λ_Y implicino che i dati di L_T siano più affidabili dei dati relativi alla $Y \in \{WD, L_y, L_s\}$ *variabile di stato globale*, e perciò la minimizzazione di J sarà essenzialmente equivalente alla minimizzazione di J_{L_T} , vale il viceversa per grandi valori di λ_Y .

In generale però $\sigma_{L_T}^2$ e i σ_Y^2 (e quindi i λ_Y) sono sconosciuti *a priori*. Queste quantità statistiche potrebbero essere stimate congiuntamente con \mathbf{p} minimizzando (5.2.6). In ogni caso, tale stima è spesso instabile [Carrera and Neuman, 1986].

Per ovviare a tale inconveniente, Carrera and Neuman [1986] suggeriscono di applicare una metodologia esecutiva suddivisibile nei seguenti sei passi:

- 1) si scelgono n_{λ_Y} valori di λ_Y : $\bar{\lambda}_Y$;
- 2) per ciascun valore di $\bar{\lambda}_Y$, si minimizza la (5.2.10) rispetto al vettore di parametri \mathbf{p} ottenendo n_{λ_Y} vettori $\hat{\mathbf{p}}$;
- 3) per ciascuna coppia $(\mathbf{p}, \bar{\lambda}_Y)$ si ottiene un valore di $J_{\min} = J(\mathbf{p}, \lambda_Y)$;
- 4) per ciascuna coppia $(\mathbf{p}, \bar{\lambda}_Y)$ si ottengono le corrispondenti stime ML di $\sigma_{L_T}^2$ e di σ_Y^2 come: $\hat{\sigma}_{L_T}^2 = \frac{J_{\min}}{N_D}$; $\hat{\sigma}_Y^2 = \frac{\hat{\sigma}_{L_T}^2}{\bar{\lambda}_Y}$
- 5) si valuta NLL dalla PRIMA per ciascun set $(\mathbf{p}, \sigma_{L_T}^2, \sigma_Y^2)$ ottenendo n_{λ_Y} valori di NLL;
- 6) si sceglie il set $(\mathbf{p}, \sigma_{L_T}^2, \sigma_Y^2)$ per il quale NLL è il minimo.

Riva et al. (2009,2011) hanno dimostrato che un miglioramento della stima di λ_Y può essere ottenuto sulla base del criterio di Bayes (Bayesian criterion) (Kashyap, 1982)

$$KIC = NLL - N_p \ln(2\pi) - \ln|\Sigma_p| \quad (5.2.12)$$

dove $|\Sigma_p|$ è il limite inferiore dell'approssimazione Cramer-Rao del determinante della matrice di covarianza degli errori delle stime (5.2.8) .

Si noti che la valutazione di $\mathbf{J}_{L_T}, \mathbf{J}_Y$ generalmente richiede di risolvere alcune volte il modello in avanti per approssimare le derivate delle variabili di stato nel rispetto dei parametri del modello.

Un punto chiave della struttura gPCE è che $\mathbf{J}_{L_T}, \mathbf{J}_Y$ possono essere ottenuti analiticamente, tramite l'approssimazione polinomiale gPCE. Per una discussione estensiva della fattibilità (applicabilità) di KIC e NLL nel guidare la scelta di λ_y si veda, e.g., Ye et al. (2008), Tsai and Li (2008), Riva et al. (2011).

Nell'ambito del lavoro di tesi si è scelto, per semplicità, di assumere note le varianze, $\sigma_{L_T}^2$ e σ_Y^2 con $Y \in \{WD, L_y, L_s\}$, che caratterizzano i *prior error*. La stima dei parametri viene eseguita quindi tramite la minimizzazione dell'equazione (5.2.10).

5.3 RISULTATI MODELLAZIONE INVERSA

Come primo approccio si è voluto risolvere il problema inverso considerando quattro *variabili di stato globali*, WD, L_T, L_y, L_s per la stima dei quattro parametri assunti incerti : la conducibilità idraulica orizzontale ,il rapporto d'anisotropia e i coefficienti di dispersività longitudinale e trasversale.

Per definire la misura di campo Y^* in maniera rappresentativa si è generato un errore di misura ε , per ognuna delle *variabili di stato globali*, estraendo da una distribuzione Gaussiana con media zero e s.q.m., σ_{L_T} o σ_Y con $Y \in \{WD, L_y, L_s\}$, pari all'uno per cento della misura reale. La misura reale, Y , viene sostituita con la misura fornita mediante il modello completo SUTRA. Gli intervalli di confidenza della stima dei parametri, $\pm\sigma_p$, sono definiti come la radice quadrata dei termini sulla diagonale della matrice di covarianza degli errori di stima, Σ_p .

Per questa configurazione il problema però è risultato mal posto, ed in particolare instabile: al variare del dato iniziale i risultati della stima dei parametri differiscono fortemente. In Figura 5.1 e in Figura 5.2, è riportato un esempio che denota la forte instabilità del problema. I valori utilizzati nell'esempio sono riportati in Tabella 5.1 e Tabella 5.2.

Tabella 5.1. Valori delle misure fornite da modello Y e s.q.m. degli errori di misura per le variabili di stato globali

Variabili di stato globali		
L_T	1.079	m
σ_{L_T}	$1.079 \cdot 10^{-4}$	m
WD	0.289	m
σ_{WD}	$2.89 \cdot 10^{-3}$	m
L_y	0.635	m
σ_{L_y}	$6.35 \cdot 10^{-3}$	m
L_s	0.623	m
σ_{L_s}	$6.23 \cdot 10^{-3}$	m

Tabella 5.2. Valori del dato iniziale.

Dato iniziale		
Parametro	Caso 1	Caso 2
k_0	$9 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$	$8.25 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$
r_{k0}	0.5	0.5
α_{L0}	0.2 m	0.1 m
α_{T0}	0.02 m	0.02 m

Di seguito si riportano i risultati ottenuti in forma grafica. Si riportano i valori dei parametri stimati, \hat{p} , normalizzati sui valori dei parametri reali \mathbf{p} , dove per reali si intendono i parametri impiegati nella simulazione diretta in SUTRA da cui sono ricavate le misure delle variabili globali di stato Y .

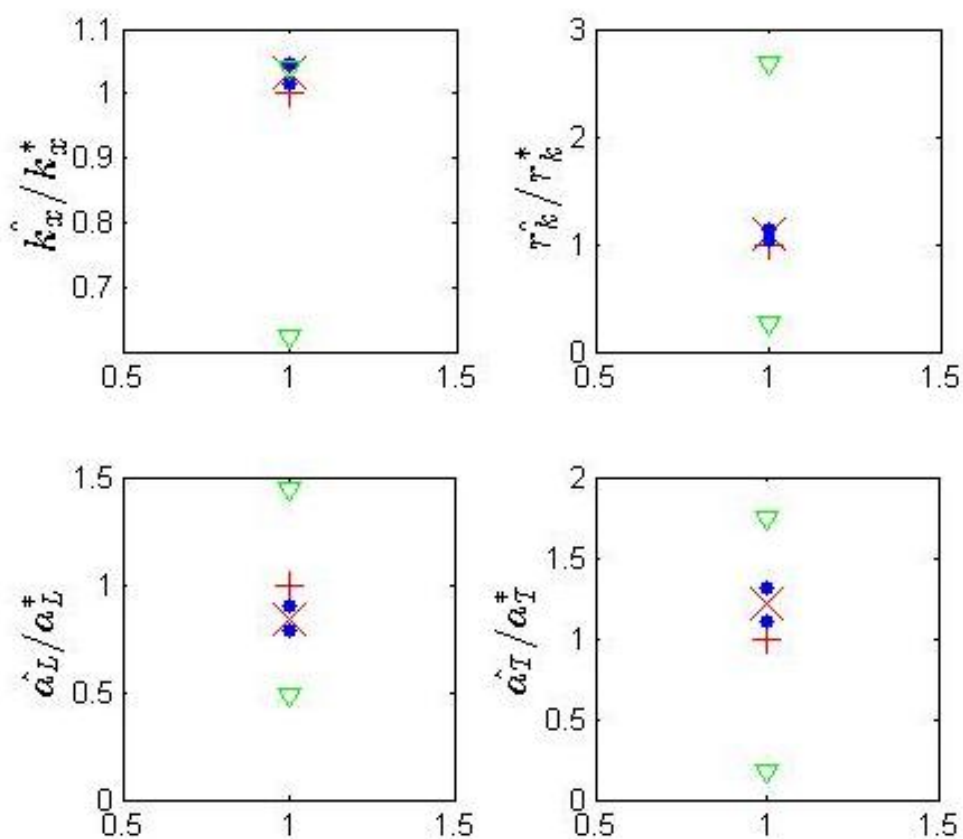


Figura 5.1. Stima dei parametri per il caso 1, croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri.

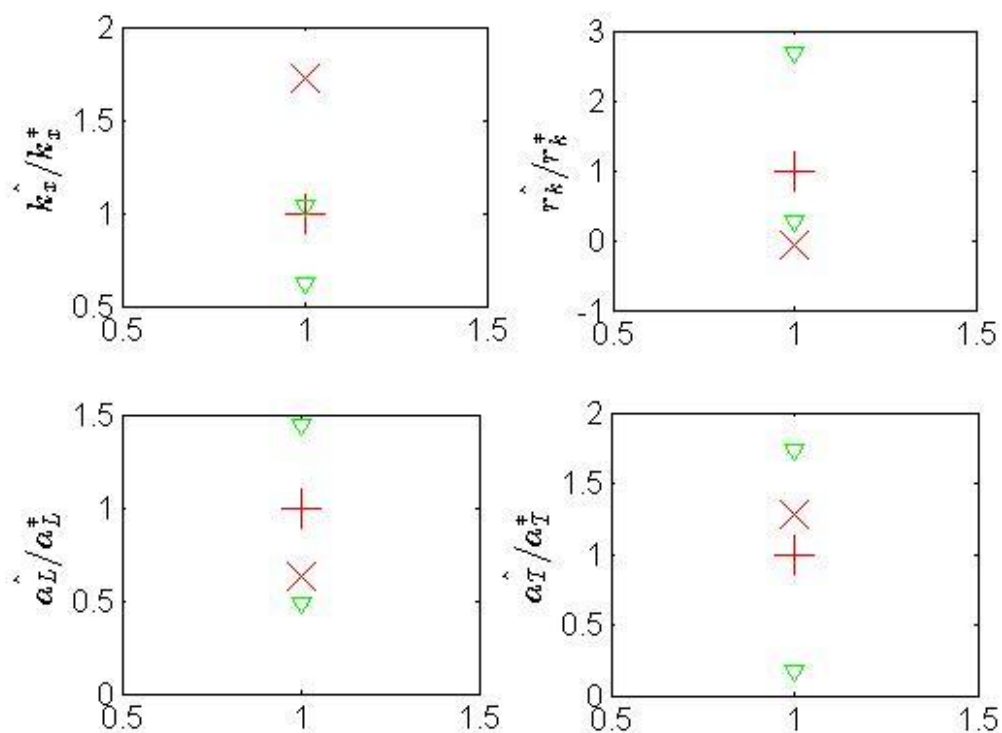


Figura 5.2. Stima dei parametri per il caso 2, instabile. Non si riportano gli intervalli di confidenza per motivi di scala.

Dalle figure precedenti si nota come la stima dei 4 parametri sia instabile. In Figura 5.2 il valore della permeabilità idraulica orizzontale è fortemente sovrastimato ed il valore ricade al di fuori dell'intervallo di validità del modello PCE utilizzato. Il valore del rapporto d'anisotropia ricade anch'esso fuori dall'intervallo di validità del modello PCE ed inoltre assume un valore negativo irrealistico. I valori degli intervalli di confidenza di stima non sono stati riportati per chiarezza, essendo elevati. Analizzando la struttura della matrice di covarianza degli errori di stima Σ_p si è evidenziato quale fossero i parametri affetti dalla maggior incertezza. Nel caso in esame ripetendo la procedura di modellazione inversa per differenti valori di Y, \mathbf{p} si è scelto di focalizzare l'attenzione sui coefficienti di dispersività, eliminando dalla stima il valore della permeabilità idraulica e del rapporto d'anisotropia. Per la determinazione dei soli coefficienti di dispersività mediante la procedura di modellazione inversa esposta è necessario costruire un modello surrogato gPCE in cui i

soli parametri incerti sono α_L, α_T . Questo richiede di fissare un valore per la permeabilità e il rapporto d'anisotropia che divengono ora parametri del modello noti. Nell'esempio che segue si sono scelti i valori $k_x = 1.16 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$, $r_k = 0.478$. La gPCE definita per le variabili di stato globali è stata scelta di grado massimo 2. Per definire la misura di campo Y^* si è generato un errore di misura per ognuna delle variabili di stato globali, estraendo da una distribuzione Gaussiana con media zero e s.q.m pari all'1% del valore reale. Il valore reale è stato assunto pari al valore calcolato mediante il modello completo SUTRA. La modellazione inversa così definita è risultata stabile. Si riporta di seguito un esempio di calcolo, i valori utilizzati sono riportati in Tabella 5.3 e Tabella 5.4 ed i risultati in Figura 5.3.

Tabella 5.3. Valori delle misure fornite da modello Y e s.q.m. degli errori di misura per le variabili di stato globali

Variabili di stato globali		
L_T	1.041	m
σ_{L_T}	$1.041 \cdot 10^{-4}$	m
WD	0.247	m
σ_{WD}	$2.47 \cdot 10^{-3}$	m
L_y	0.630	m
σ_{L_y}	$6.30 \cdot 10^{-3}$	m
L_s	0.483	m
σ_{L_s}	$4.88 \cdot 10^{-3}$	m

Tabella 5.4. Valori del dato iniziale.

Dato iniziale	
α_{L0}	0.2 m
α_{T0}	0.02 m

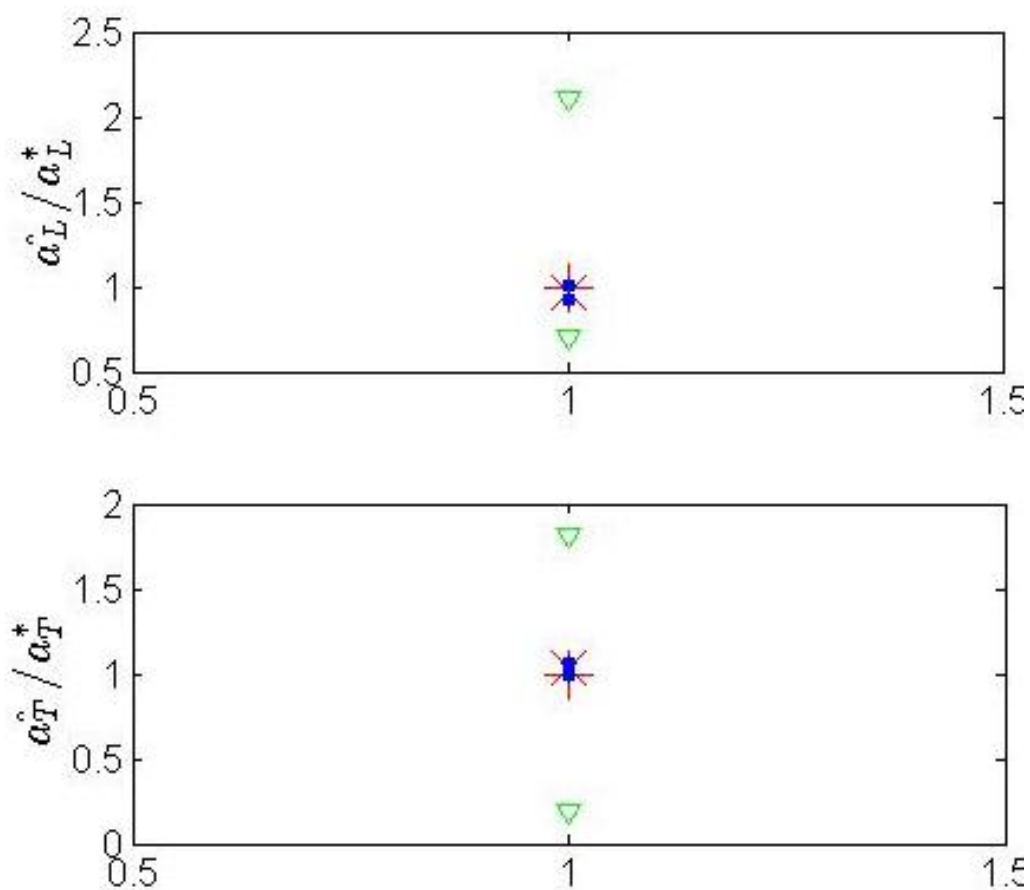


Figura 5.3. Stima dei parametri , croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri

Dalla Figura 5.3 si nota come i valori dei coefficienti di dispersività siano stimati in maniera soddisfacente e la banda di confidenza, $\pm\sigma_p$ sia ristretta.

Successivamente si è scelto di aumentare l'incertezza sul valore della misura di campo, Y^* , delle *variabili globali* generando un errore estratto da una distribuzione Gaussiana con media zero e varianza pari al 5% del valore reale, definito tramite SUTRA. La naturale conseguenza è un peggioramento della stima e un incremento delle fasce di confidenza per i valori stimati. Utilizzando i medesimi di Tabella 5.3 e Tabella 5.4. Il risultato in forma grafica è riportato in Figura 5.4.

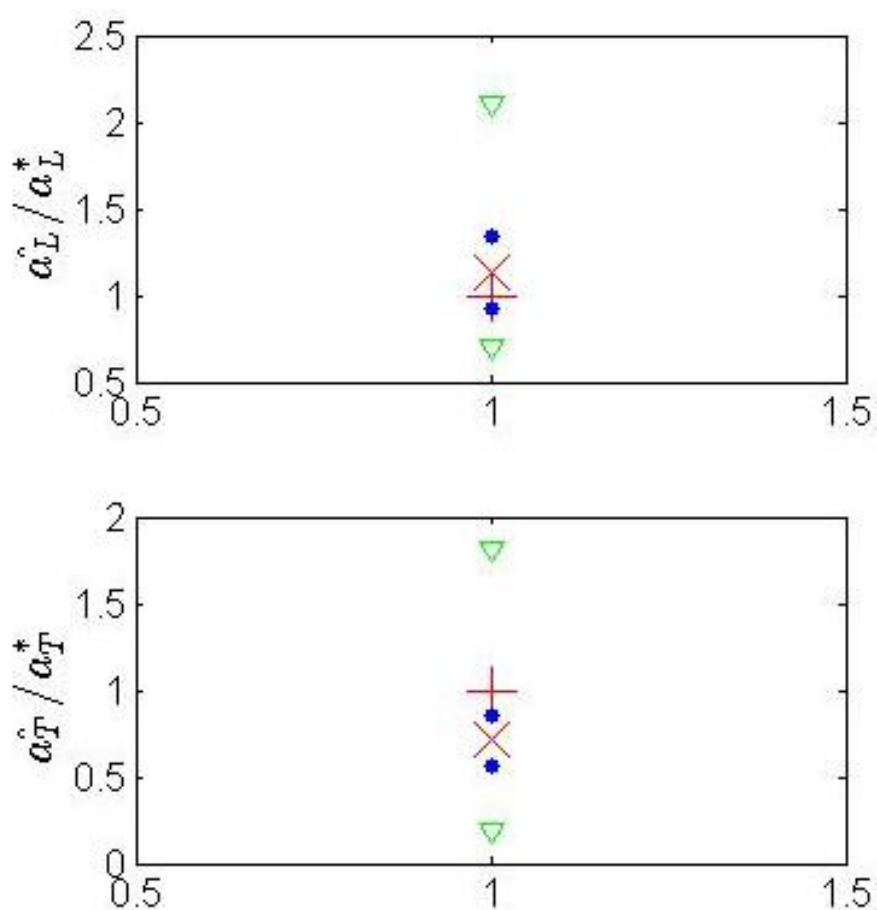


Figura 5.4. Stima dei parametri , croce rossa valore reale, triangolo verde intervalli di validità della PCE, croce S.Andrea rossa valore stimato, pallini blu intervalli di confidenza della stima dei parametri

6

CONCLUSIONI

L'obiettivo della tesi consiste nell'analizzare i processi d'intrusione salina (SWI), focalizzandosi sul ruolo svolto da alcuni dei parametri chiave nei processi di flusso e trasporto a densità variabile. L'analisi è stata condotta tramite una tecnica di *analisi di sensitività globale* (GSA) basata sulla determinazione degli Indici di Sobol (IS). Per il calcolo degli Indici di Sobol si è sfruttato un'*espansione in caos polinomiale* (PCE), che permette di definire tali indici in maniera analitica. Come caso di riferimento per lo studio dei processi d'intrusione salina si è adottato il problema di Henry nella versione dispersiva-anisotropa definita da Abarca, una tale formulazione del problema consente di evidenziare in maniera efficace il ruolo svolto dai principali parametri coinvolti nei processi di flusso e trasporto ed ha inoltre una maggior rappresentatività dei processi fisici reali rispetto alla formulazione originale proposta da Henry.. Lo studio del processo di SWI è stato condotto con riferimento a *variabili di stato globali* che caratterizzano l'aspetto generale del cuneo d'acqua salata che si instaura.

I processi considerati sono quelli del flusso e del trasporto, nelle sue due componenti advettivo e dispersivo, si trascura la diffusione molecolare. L'equazione del flusso e del trasporto devono essere risolte in maniera accoppiata per considerare le variazioni della densità causate dalla differente concentrazione dei soluti disciolti. La risoluzione accoppiata del problema impone di simulare l'evoluzione del fenomeno nella sua fase transitoria fino al raggiungimento delle condizione stazionaria di interesse. I processi sono stati analizzati in condizioni isoterme.

Le *variabili di stato globali* utilizzate per analizzare la conformazione del cuneo salino descrivono: la posizione della linea ad iso-concentrazione al 50%, con riferimento al valore massimo imposto per l'acqua marina, sul fondo del dominio, tale grandezza caratterizza l'avanzamento d'intrusione del cuneo salino; la larghezza della zona di transizione delle concentrazioni che si instaura tra il cuneo salino e la porzione sovrastante dell'acquifero occupata dal flusso d'acqua dolce; la posizione della iso-concentrazione al 50% su lato mare che identifica la profondità del cuneo salino; la zona di transizione delle concentrazioni sul fondo del dominio che caratterizza la dispersione dei soluti nella parte terminale del cuneo salino; l'area di dominio caratterizzata da una concentrazione superiore al 5% che identifica l'estensione globale dell'intrusione. L'approccio mediante le *variabili di stato globali* è stato scelto in quanto è praticamente impossibile, con riferimento a casi reali, definire la concentrazione dei soluti in ogni punto del dominio di calcolo considerato.

Lo sviluppo della GSA per le *variabili di stato globali* scelte si articola in una serie di passaggi. In primo luogo si selezionano, all'interno dei parametri che governano l'evoluzione del sistema, quelli per cui è significativo condurre un'analisi di sensitività e si definisce per ognuno una funzione di densità di probabilità (pdf). I parametri scelti nell'ambito del lavoro di tesi sono quattro: il valore della permeabilità idraulica in direzione orizzontale, il rapporto d'anisotropia delle permeabilità idrauliche, il coefficiente di dispersività longitudinale e il coefficiente di dispersività trasversale. Questi parametri sono stati scelti alla luce del ruolo fondamentale che svolgono nei processi di flusso e trasporto, per l'intrinseca variabilità che esibiscono nei sistemi naturali e per il fatto che in applicazioni pratiche possono essere definiti solamente tramite misure di campo e sono spesso caratterizzati da un'inevitabile incertezza. La distribuzione di probabilità per ognuno dei parametri è stata assunta uniforme. Definito lo spazio di variazione dei parametri si procede alla costruzione dell'*espansione in caos polinomiale* per le singole *variabili di stato globali*. Per la definizione della PCE si è sfruttata la metodologia di collocazione detta *sparse grids*, che consente di ridurre il numero di *collocation points*, rispetto ad una metodologia Monte Carlo standard. I valori delle *variabili di stato globali* per i *collocation points* sono calcolati mediante l'uso di un modello matematico numerico, che possiamo definire completo, in grado di risolvere in maniera opportuna le equazioni che governano il fenomeno. Nell'ambito della tesi il modello completo scelto è SUTRA.

La costruzione di un modello surrogato PCE consente quindi di (a) definire in maniera agevole gli Indici di Sobol senza ulteriori costi computazionali ,(b) per diversi valori dei parametri in ingresso consente di ricavare un valore delle *variabili di stato globali* molto prossimo a quello calcolato mediante il modello completo,ma con costi computazionali notevolmente ridotti. Sfruttando il modello PCE si possono quindi effettuare analisi Monte Carlo per le *variabili di stato globali* con costi computazionali ridotti.

Gli Indici di Sobol sono uno strumento semplice per identificare come l'incertezza dei parametri si riflette sulle grandezze indagate, ogni indice definisce il contributo specifico e congiunto dei parametri sulla variabilità della grandezza di stato in analisi.

I risultati ottenuti sono riportati nel capito 4. Dall'analisi degli Indici di Sobol calcolati si può dedurre che : (1) l'avanzamento del cuneo salino è fortemente controllato dalla permeabilità idraulica orizzontale e dalla dispersività trasversale ,all'aumento di quest'ultimo parametro la penetrazione del cuneo diminuisce; (2) la larghezza della zona di transizione è fortemente influenza dal coefficiente di dispersività trasversale e in maniera minore dalla dispersività longitudinale, la permeabilità idraulica orizzontale e il rapporto d'anisotropia assumono un ruolo trascurabile; (3) la posizione della iso-cocentrazione al 50% su lato mare è principalmente influenzata dal valore del rapporto d'anisotropia ,all'aumentare di quest'ultimo, a parità dei restanti parametri, si ha un innalzamento della posizione della iso-concentrazione; (4) la transizione delle concentrazione sul fondo del dominio è determinata principalmente dal coefficiente di dispersività longitudinale, un ruolo minoritario svolgono la permeabilità idraulica orizzontale e il coefficiente di dispersività trasversale; (5) l'area contaminata per concentrazioni superiori al 5% è principalmente definita dai valori della permeabilità idraulica orizzontale e dal rapporto d'anisotropia.

Mediante l'analisi Monte Carlo, basata su 600'000 realizzazioni del modello surrogato PCE, si sono definite le funzioni di densità di probabilità (pdf) e le funzioni di densità di probabilità cumulata (cdf) per *variabili di stato globali* . Si sono poi identificate distribuzioni con andamenti simili, i cui parametri sono stati stimati mediante il criterio della massima verosimiglianza . Distribuzioni Normali sono state associate alla larghezza della zona di transizione e alla zona di transizione delle

concentrazioni sul fondo del dominio, entrambe le distribuzioni sono caratterizzate da un valore del coefficiente di variazione ridotto (19% e 24%). Per la posizione della iso-concentrazione al 50% sul fondo del dominio si è identificata una distribuzione Gamma riportando nuovamente una buona concentrazione dei valori attorno al valore medio. Distribuzione del tipo Valore Estremo si sono associate alla posizione della iso-concentrazione al 50% su lato mare e per l'area contaminata con concentrazioni superiori al 5%. Tale andamento dipende sia dagli intervalli scelti per i parametri, tali da esplorare configurazioni in cui si abbia un'intrusione ben definita, sia dai meccanismi che governano il sistema. Sfruttando le cdf costruite è stato possibile definire livelli di probabilità di superamento per le *variabili di stato globali*. Successivamente si sono calcolati i coefficienti di correlazione di Pearson, sfruttando i coefficienti delle PCE definite, per quantificare la correlazione lineare tra le *variabili di stato globali*. Si sono ottenuti valori di correlazione positiva elevati tra la larghezza della zona di transizione e la zona di transizione definita sul fondo del dominio, tra la posizione verticale della iso-concentrazione al 50% e la sua posizione sul fondo del dominio, la larghezza della zona di transizione e la posizione della iso-concentrazione al 50% sul fondo del dominio sono correlati negativamente. Sulla base delle 600'000 realizzazioni, per le coppie di variabili maggiormente correlate, si sono costruite le distribuzioni di probabilità congiunte. Dall'osservazione di quest'ultime è possibile definire quali coppie di variabili siano caratterizzate da una maggior o minor probabilità. Successivamente si è analizzato il condizionamento delle distribuzioni di probabilità congiunte, ad una *variabile di stato globale* di cui si è assunto noto il valore. La procedura di condizionamento ha permesso di ottenere informazioni sui valori delle *variabili di stato globali* incognite, la qualità delle informazioni aggiuntive dipende dalla correlazione che intercorre tra le *variabili di stato globali* ed ha valore in termini probabilistici. Nel lavoro di tesi viene proposta, a titolo di esempio, una possibile strategia di condizionamento.

Nel capitolo 5 viene presentata la metodologia utilizzata per la risoluzione del Problema Inverso. Lo schema utilizzato si basa sul criterio della massima verosimiglianza (ML) accoppiato con il modello surrogato PCE definito per ognuna delle *variabili di stato globali*. Nell'ambito del lavoro di tesi si è scelto per semplicità di assumere noti i valori della varianza dei *prior errors*, in cui sono contenuti gli errori di misura di una grandezza di stato e l'errore prodotto nella stima tramite un modello

matematico che riproduce i processi fisici reali. Il problema inverso per la stima dei quattro parametri assunti incerti, permeabilità idraulica orizzontale, rapporto d'anisotropia e i coefficienti di dispersività, basato sulla conoscenza dei valori di quattro *variabili di stato globali* (posizione della iso-concentrazione al 50% sul fondo del dominio e a lato mare, larghezza della zona di transizione e dispersione delle iso-concentrazioni sul fondo del dominio) è risultato mal posto, ed in particolare instabile. Dall'analisi della matrice di covarianza degli errori di stima si è scelto di concentrare l'attenzione sui coefficienti di dispersività trasversale e longitudinale. Il problema di stima di questi due parametri, sfruttando la conoscenza delle *variabili di stato globali* è risultato ben posto. Successivamente si sono esplorati diversi livelli d'incertezza nella conoscenza delle *variabili di stato globali*. L'incertezza è stata tradotta come il valore della varianza, o in maniera analoga dallo scarto quadratico medio (s.q.m.), che caratterizza i *prior errors*. Si sono quindi assunti valori dello scarto quadratico medio pari a 1% e 5% del valore reale delle *variabili di stato globali*. Il valore reale è stato assunto pari al valore definito mediante simulazione diretta opportunamente implementata in SUTRA. I valori di campo delle *variabili di stato globali*, impiegati nella modellazione inversa, sono stati ricavati aggiungendo un errore di misura estratto casualmente da distribuzioni Normali standard di s.q.m. pari al 1% e 5% del valore reale di ognuna delle variabili di stato. I risultati mostrano come all'aumentare dell'incertezza sulle *variabili di stato globali* la stima dei parametri si allontani dai valori reali dei parametri imposti nelle simulazioni dirette e come si abbia un peggioramento dell'errore di stima associato a ciascun parametro. La stabilità della procedura d'inversione per la stima dei soli coefficienti di dispersività è, parzialmente, imputabile al fatto che le *variabili di stato globali* sono definite sulla base delle sole concentrazioni, quindi fortemente correlate al processo di trasporto. Si ricorda tuttavia come per fenomeni di SWI il processo di flusso e di trasporto siano risolti in maniera accoppiata e come alcune delle *variabili di stato globali* dipendano fortemente dalla permeabilità idraulica e dal rapporto d'anisotropia.

Diversi sono i gli sviluppi futuri possibili. Il confronto dei risultati a partire da differenti tipologie di distribuzioni di probabilità assegnate ai parametri considerati incerti. L'ampliamento del numero di parametri incerti, con la possibilità di inserire le condizioni al contorno del sistema tra queste. L'analisi del problema in termini grandezze adimensionali che governano il problema. La costruzione di un modello

surrogato di risposta in cui le variabili d'interesse non siano *variabili di stato globali* ma ad esempio, i valori della concentrazione in determinati punti o zone del dominio. Questo permetterebbe di rapportarsi meglio a casi reali in cui la conoscenza della distribuzione delle concentrazioni è nota con dettaglio solamente in alcune regioni del dominio.

I punti saliente del lavoro di tesi sono stati la quantificazione, tramite gli indici di Sobol, dell'importanza relativa della permeabilità idraulica, dal rapporto d'anisotropia, del coefficiente di dispersività longitudinale e trasversale, nei processi di SWI in riferimento al problema di Henry anisotropo-dispersivo per il quale si sono sfruttate le *variabili di stato globali* al fine di caratterizzare l'aspetto generale del cuneo salino. La costruzione di un modello surrogato PCE per il problema di SWI analizzato, sfruttando la tecnica di collocamento *sparse grids*. Il modello surrogato ha permesso di ricavare gli indici di Sobol in maniera analitica e di effettuare analisi di tipo Monte Carlo per le *variabili di stato globali* con costi computazionali ridotti. Si sono poi definite le distribuzioni di densità marginali per le *variabili di stato globali*. Sulla base della correlazione tra *variabili di stato globali* si sono definite le distribuzioni di probabilità congiunte per le coppie di variabili maggiormente correlate. Successivamente si è analizzata la possibilità di condizionare le distribuzioni ricavate al fine di ricavare informazioni, in termini probabilistici, per *variabili di stato globali* partendo dalla conoscenza di una singola variabile. Infine si è impostato un problema di Modellazione Inversa basato sul criterio della massima verosimiglianza in cui vengono sfruttati i modelli surrogati PCE definiti per le *variabili di stato globali*. L'impostazione del problema inverso è risultata stabile qualora si vogliano stimare i coefficienti di dispersività partendo dalla conoscenza di quattro *variabili di stato globali*.

Appendice A DETTAGLI IMPLEMENTAZIONE IN SUTRA

Scelta della discretizzazione spaziale.

Si sono confrontate diverse discretizzazioni spaziali ,al fine di garantire la convergenza nella scelta della griglia di calcolo da utilizzare. Il confronto è stato svolto in termini di distribuzioni delle concentrazioni, confrontando le linee ad iso-concentrazione relativa calcolate per diverse configurazioni del problema. Le griglie confrontate sono tutte regolari con elementi quadrilateri. Le discretizzazioni sono riportate in Tabella 6.1.

Tabella 6.1. Valori di discretizzazione per le griglie analizzate.

GRIGLIA 1		
ΔL_x	Dimensione elemento in direzione x	0.01 m
N_x	Numero di elementi in direzione x	200
$\min(\alpha_L)$	Minimo valore della dispersività longitudinale	0.1 m
Pe_m	Numero di Peclet per la griglia	$0.1 \leq 4$
ΔL_y	Dimensione elemento in direzione y	0.01 m
N_y	Numero di elementi in direzione y	100
$\min(\alpha_T)$	Minimo valore della dispersività trasversale	0.01 m
$\Delta L_y \leq \min(\alpha_T)$	Condizione di stabilità	$0.01 \leq 0.01$

GRIGLIA 2		
ΔL_x	Dimensione elemento in direzione x	$7.8125 \cdot 10^{-3}$ m
N_x	Numero di elementi in direzione x	256
$\min(\alpha_L)$	Minimo valore della dispersività longitudinale	0.1 m
Pe_m	Numero di Peclet per la griglia	$7.8125 \cdot 10^{-2} \leq 4$
ΔL_y	Dimensione elemento in direzione y	$7.8125 \cdot 10^{-3}$ m
N_y	Numero di elementi in direzione y	128
$\min(\alpha_T)$	Minimo valore della dispersività trasversale	0.01 m
$\Delta L_y \leq \min(\alpha_T)$	Condizione di stabilità	$7.8125 \cdot 10^{-3} < 0.01$
GRIGLIA 3		
ΔL_x	Dimensione elemento in direzione x	$5 \cdot 10^{-3}$ m
N_x	Numero di elementi in direzione x	400/
$\min(\alpha_L)$	Minimo valore della dispersività longitudinale	0.1 m
Pe_m	Numero di Peclet per la griglia	$5 \cdot 10^{-2} \leq 4$
ΔL_y	Dimensione elemento in direzione y	$5 \cdot 10^{-3}$ m
N_y	Numero di elementi in direzione y	200
$\min(\alpha_T)$	Minimo valore della dispersività trasversale	0.01 m
$\Delta L_y \leq \min(\alpha_T)$	Condizione di stabilità	$5 \cdot 10^{-3} < 0.01$

Di seguito si riporta il confronto (Figura 6.1) tra le soluzioni del problema, con configurazione descritta in Tabella 6.2, ottenute con le tre differenti griglie analizzate .

Tabella 6.2.Valori dei parametri utilizzati nella scelta della discretizzazione spaziale.

Simbolo	Parametro	valore	Unita
ρ_f	Densità acqua fresca	1000	kg/m ³
ρ_s	Densità acqua salata	1025	kg/m ³
$\frac{\partial \rho}{\partial C}$	Fattore di variazione densità per variazione unitaria della concentrazione	700	kg/m ³
ρ_0	Densità di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	1000	kg/m ³
C_0	Concentrazione di riferimento nella relazione costitutiva del fluido	0	kg/kg
ε	Porosità	0.35	-
α	Comprimibilità della matrice solida	10 ⁻⁷	(kg/ms ²) ⁻¹
β	Comprimibilità del fluido	4.47*10 ⁻¹⁰	(kg/ms ²) ⁻¹
μ	Viscosità del fluido	0.001	kg/ms
g	Accelerazione di gravità	9.81	m/s ²
k_x	Permeabilità idraulica orizzontale	1.268*10 ⁻⁹	m ²
k_y	Permeabilità idraulica verticale	1.268*10 ⁻⁹	m ²
α_L	Dispersione longitudinale	0.1	m
α_T	Dispersione trasversale	0.01	m
d	Dimensione verticale	1	m
l	Dimensione orizzontale	2	m
q_b	Flusso di acqua fresca	6.66*10 ⁻⁵	m/s

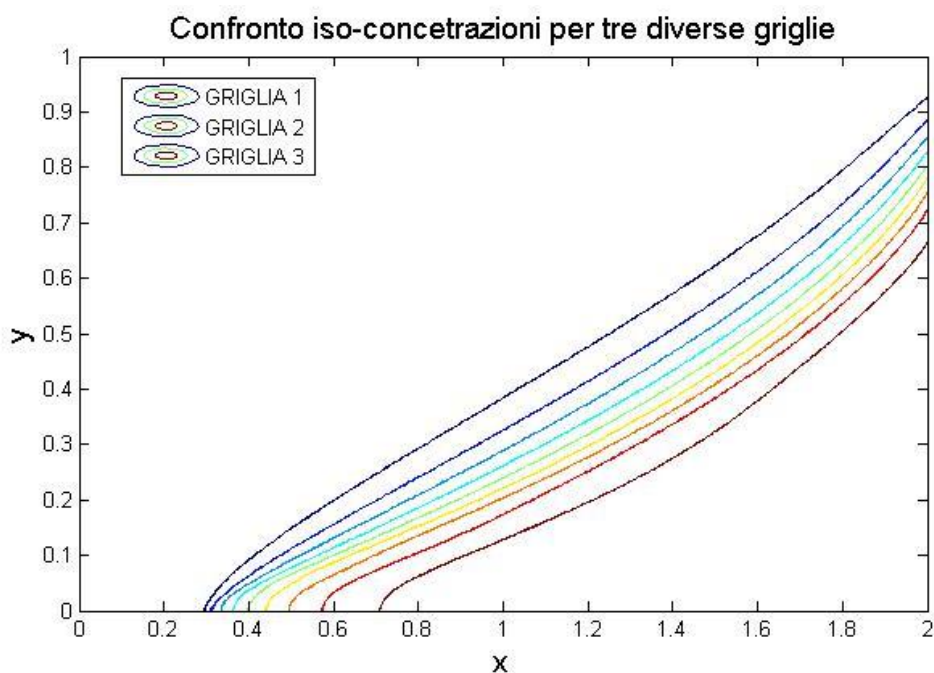


Figura 6.1.confronto della distribuzione delle linee ad iso-concentrazione relativa per le differenti griglie analizzate.

Confronti per altre configurazioni sono state svolte ma non sono qui riportate. Come si evince da Figura 6.1 le soluzioni sono praticamente coincidenti. Nell'ambito della tesi si è scelto di impiegare la griglia 2 , 128x256 elementi , per tutte le simulazioni svolte alla luce dell'accuratezza fornita e per il costo computazionale ridotto rispetto alla griglia 3.

Scelta della discretizzazione temporale

SUTRA utilizza uno schema alle differenze finite implicito. Per tale metodologia non esistono costrizioni particolari sull'intervallo temporale, Δt , da adottare. Tuttavia la scelta di un passo temporale elevato porta inevitabilmente all'insorgere di instabilità numeriche. Come descritto nel paragrafo 2.1.1 la condizione CFL è stata impiegata solamente per ricavare un ordine di grandezza di Δt . Inoltre si è fatto riferimento all'ordine di grandezza della velocità media che si instaura nel dominio, $O(\bar{v}) = 10^{-4} m/s$ e non alla massima velocità che si instaura nell'estremo superiore del contorno mare $O(\bar{v}) = 10^{-3} m/s$ (Figura 1.12). Il passo temporale è stato scelto pari a 60 secondi. Per valori elevati, $\Delta t = 500s$ si sono osservate delle instabilità di tipo

numerico. Il numero di intervalli temporali, imposto per tutte le simulazioni svolte nella tesi, è pari a 1000. Il tempo totale per ogni simulazione è quindi pari ad $60 \cdot 10^3$ s e garantisce il raggiungimento delle condizioni stazionarie d'interesse per ogni configurazione implementata.

General head boundary condition

Un'osservazione particolare deve esser fatto per quanto riguarda l'implementazione di condizione al contorno che preveda di fissare il valore della pressione. In SUTRA tale condizione si esprime mediante la '*general head boundary condition*'. In un nodo dove viene specificata la pressione p_i , per mantener tale valore costante quando l'acquifero è perturbato, si genera un flusso di fluido, con una concentrazione di soluti fissata, che viene incorporato nell'equazione di continuità e nell'equazione del trasporto. Per specificare come questa condizione viene implementata in SUTRA si consideri la Figura 6.2.

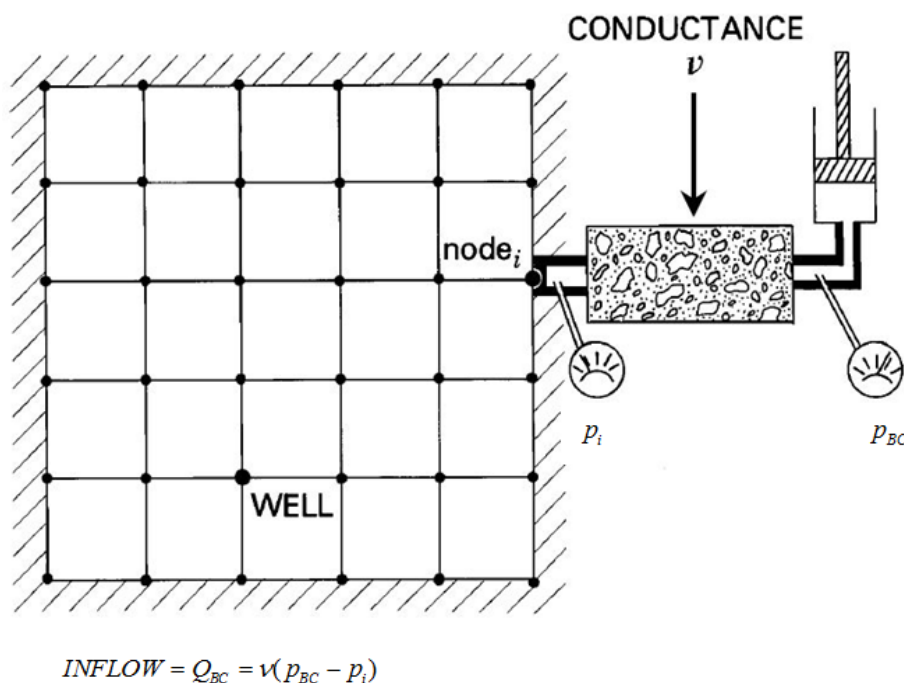


Figura 6.2. Rappresentazione schematica per la condizione al contorno di pressione specificata (Voss & Souza, 2008).

Considerando ad esempio la perturbazione imposta da un'estrazione da pozzo si produce una diminuzione della pressione nel nodo i-esimo evidenziato e anche nei

restanti nodi. Per bilanciare questo abbassamento di pressione viene aggiunto un flusso nel nodo : $Q_{BC} = \nu(p_{BC} - p_i)$.

L'entità del flusso è9 proporzionale alla conduttanza ν della cella di mezzo poroso creata tra il nodo i -esimo del dominio e il nodo, che possiamo chiamare *ghost*, esterno al dominio dove la pressione è mantenuta sempre al valore specificato p_{BC} . La conduttanza è definita come :

$$\nu = \frac{KA}{L}$$

Dove K è la conduttività idraulica della cella, A l'area trasversale e L la lunghezza della cella. Il significato di tale cella può essere inteso come una eventuale porzione di acquifero aggiunto, all'interno del quale si genera un flusso e si hanno quindi perdite di carico, ma in cui non sono risolte le equazioni del flusso e del trasporto. Questa cella ha lo scopo di simulare la connessione tra una zona con valore di pressione nota e costante p_{BC} e il valore nel dominio p_i . Questa metodologia è utilizzata qualora, ad esempio, si voglia simulare un acquifero in prossimità ad esempio di un lago. Assumendo come costante la pressione p_{BC} riferita al lago si impone poi un valore di conduttanza ν ragionevole, in modo da poter rappresentare l'interconnessione tra il lago e l'acquifero, ricavando il valore della pressione nel dominio simulato negli i -esimi nodi. Il valore della conduttanza viene solitamente ricavato sulla base di osservazioni di campo. Si noti che ad un valore ν alto corrisponde una piccola perdita di carico, quindi la pressione nel nodo i -esimo sarà coincidente con la pressione imposta sul nodo *ghost* :

$$p_i \approx p_{BC}$$

Uno schema simile si cala anche nel contesto della tesi, volendo simulare l'interazione tra l'acquifero e il mare, imponendo come nota la distribuzione idrostatica della pressione per il mare. Non potendo però disporre di dati di campo, per la calibrazione della conduttanza, si è proceduto alla scelta del valore minimizzando l'errore relativo delle concentrazioni nei nodi della griglia di calcolo al variare della conduttanza imposta:

$$err_{C_{i,(v_I,v_{II})}} = \left| \frac{C_{i,v_I} - C_{i,v_{II}}}{C_{i,v_{II}}} \right|$$

Dove C_{i,v_I} è la concentrazione nel nodo i -esimo calcolata per la simulazione caratterizzata da un valore di conduttanza v_I , $C_{i,v_{II}}$ è il valore della concentrazione nel medesimo nodo, ricavato imponendo la conduttanza v_{II} .

La conduttanza è stata variata per diversi ordini di grandezza. Valori modesti della conduttanza sono stati esclusi volendo rispettare la condizione al contorno di pressione idrostatica dettata dal mare. Gli errori relativi maggiori si distribuiscono nella porzione di dominio prossima al contorno mare, in particolare dove si ha l'inversione dei flussi entranti-uscenti dal dominio, e all'estremità del cuneo salino (Figura 6.3)

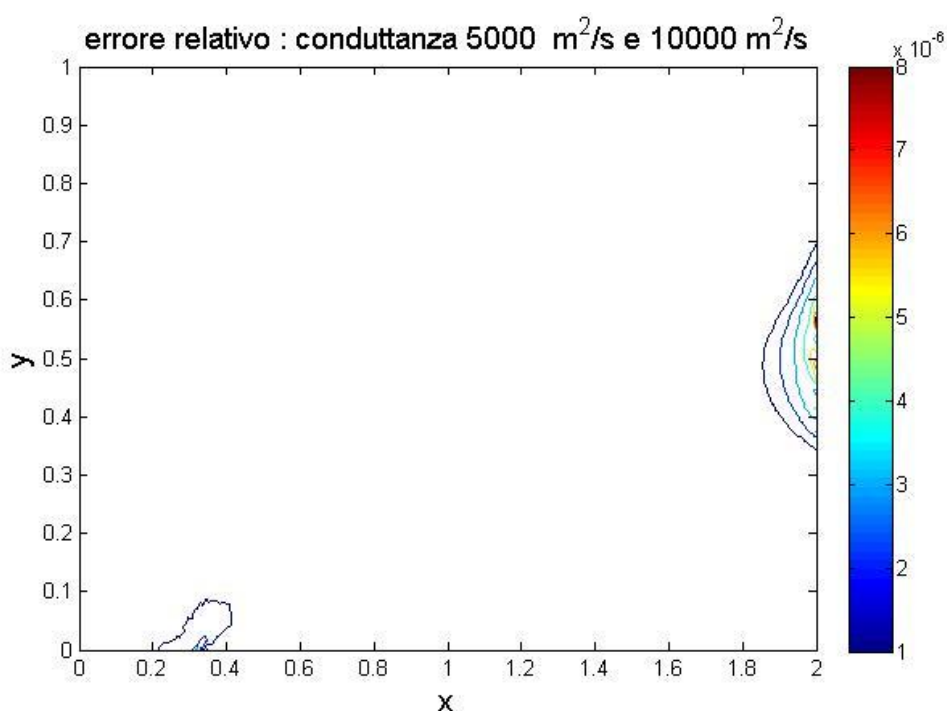


Figura 6.3. Linee ad iso-errore relativo per la concentrazione confrontando la simulazione ad conduttanza $5000\text{m}^2/\text{s}$ e $10000\text{m}^2/\text{s}$.

Per confrontare i valori di conduttanza ci si è basati sulla somma degli errori relativi calcolati considerando ogni nodo della griglia. I valori impiegati per l'analisi sono riportati in Tabella 6.3 e il confronto per la somma degli errori relativi in Figura 6.4.

Tabella 6.3. Valori della conduttanza utilizzati per la scelta del valore di riferimento

Conduttanza		
V_{10}	10	m ² /s
V_{100}	100	m ² /s
V_{1000}	1000	m ² /s
V_{5000}	5000	m ² /s
V_{10000}	10000	m ² /s
V_{25000}	25000	m ² /s

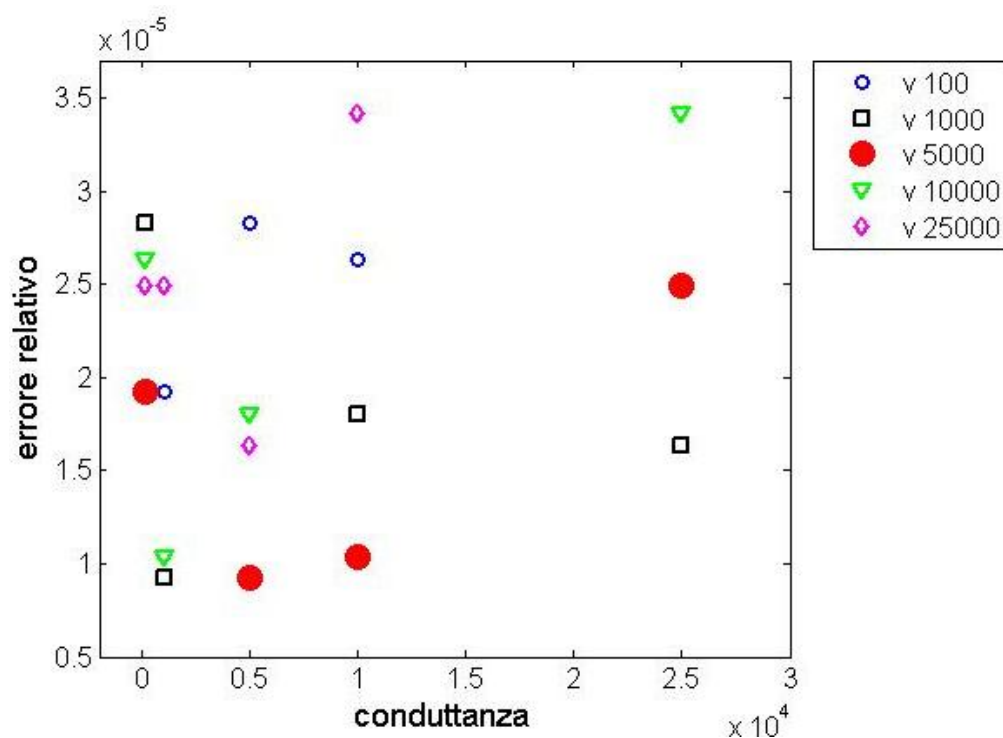


Figura 6.4. Errori relativi al variare della conduttanza

Il valore di conduttanza scelto è 5000 m²/s alla luce delle somme per gli errori relativi minori riportati. Questo valore di conduttanza è stato imposto per tutte le simulazioni effettuate nell'ambito della tesi.

Bibliografia

Abarca E. Seawater intrusion in complex geological environments. PhD thesis.TUC, Barcelona, Spain; 2006.

Abarca E, Carrera J, Sanchez-Villa X, Dentz M. Anisotropic dispersive Henry problem. *Adv Water Resour* 2007;30:913–6.

Ababou, R. and Al-Bitar, A: Salt water intrusion with heterogeneity and uncertainty: mathematical modeling and analyses, in *Proceedings CMWR'04, Comput. Meth. in Water Resources*, special session on coastal aquifers, Chapel Hill, N. Carolina, 2004.

Al-Bitar A: Modélisation des écoulements en milieu poreux hétérogènes 2D/3D, avec couplages surface/souterrain et densitaires, Ph.D. Thesis, IMFT Institut National Polytechnique de Toulouse, Juin, 2007.

Badon-Ghyben, W. Nota in verband met de voorgenomen putboring nabij Amsterdam (Notes on the probable results of well drilling near Amsterdam). *Tijdschrift van het Koninklijk Instituut van Ingenieurs*, Hague, 1888/9, 8-22, 1888.

Barlow P. , Reichard E.G. Saltwater intrusion in coastal regions of North America, *Hydrogeology Journal* (2010) 18: 247–260

Bocanegra E., Cardoso Da Silva G., Custodio E., Manzano M. , Montenegro S. State of knowledge of coastal aquifer management in South America, *Hydrogeology Journal* (2010) 18: 261–267.

Baeck J., Nobile F., Tamellini L., Tempone R., 2010, “Stochastic Spectral Galerkin and collocation methods for PDEs with random coefficients: a numerical comparison”, *MOX Report No. 23/2010*, Politecnico di Milano.

Baeck J., Nobile F., Tamellini L., Tempone R., 2011, “Stochastic Spectral Galerkin and collocation methods for PDEs with random coefficients: a numerical comparison, Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations”, Springer, 76 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 43-62.

Barthelmann V., E. Novak and K. Ritter. High dimensional polynomial interpolation on sparse grids. *Adv. Comput. Math.*, 12: 273_288, 2000.

Bear J, Cheng AHD, Sorek S, Ouazar D, Herrera I, editors. *Seawater intrusion in coastal aquifers – concepts, methods, and practices*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers; 1999.

Bear J, Cheng AHD, *Modeling groundwater flow and contaminant transport*, Dordrecht Heidelberg London New York: Springer 2010.

Boso F., Barros F.P.j. , Fiori A. and Bellin A. (2013), Performance analysis of statistical spatial measures for contaminant plume characterization toward risk-based decision making. *Water Resour. Res.*, 49 , doi:10.1002/wrcr.20270

Bower JW, Motz LH, Durden DW. Analytical solution for determining the critical condition of saltwater upconing in a leaky artesian aquifer. *J Hydrol* 1999;221:43–53.

Bungartz H. J. , Griebel M. .Sparse grids. *Acta Numerica*, 13: 147-269, 2004.

Crestaux T., Le Maitre O., Jean-Marc Martinez J.M., 2009, “Polynomial chaos expansion for sensitivity analysis”, *Reliability Engineering and System Safety*, 94, 1161–1172.

Croucher, A. E., and M. J. O’Sullivan (1995), The Henry problem for saltwater intrusion, *Water Resour. Res.*, 31(7), 1809–1814.

Cukier H, Levine RI, Shuler K. Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems. *J Comput Phys* 1978;26:1–42.

Custodio E. , Coastal aquifers of Europe: an overview , *Hydrogeology Journal* (2010) 18: 269–280.

Dagan G, Bear J. Solving the problem of local interface upconing in a coastal aquifer by the method of small perturbations. *J Hydraul Res* 1968;6:15–44.

Dagan G, Zeitoun DG. Free-surface flow toward a well and interface upconing in stratified aquifers of random conductivity. *Water Resour Res* 1998;34:3191–6.

Dagan G, Zeitoun DG. Seawater–freshwater interface in a stratified aquifer of random permeability distribution. *J Contam Hydrol* 1998;29:185–203.

Dausman AM, Doherty J, Langevin CD, Sukop MC. Quantifying data worth toward reducing predictive uncertainty. *Ground Water* 2010;48:729–40.

Diersch, H.J. Finite element modeling of recirculating density driven saltwater intrusion processes in groundwater. *Adv. Water Res.*, 11:25–43,1988.

Fajraoui N., Ramasomanana F., Younes A., Mara T.A., Ackerer P., Guadagnini A., 2011, Use of Global Sensitivity Analysis and Polynomial Chaos Expansion for Interpretation of Non-reactive Transport Experiments in Laboratory-Scale Porous Media, *Water Resour. Res.*,

Fleury P, Michel B, de Marsily G. Submarine springs and coastal karst aquifers: a review. *J Hydrol* 2007;339:79–92.

Fitts CR. *Groundwater science*. San Diego, California: Academic Press; 2002

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

Ghassemi F, Alam K, Howard K. Fresh-water lenses and practical limitations of their three-dimensional simulation. *Hydrogeol J* 2000;8:521–37.

Gotovac H., Andricevic R., Gotovac B., Kozulic V., Vranjes M. , An improved collocation method for solving the Henry problem. *Journal of Contaminant Hydrology* 64 (2003) 129–149

Griebel. Sparse grids and related approximation schemes for higher dimensional problems. (FOCM, 2005).

Henry HR. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *Water-Supply Paper* 1613-C. US Geological Survey; 1964.

Herzberg, A. Die Wasserversorgung einiger Nordseebder (The water supply of parts of the North Sea coast in Germany). *Z. Gasbeleucht. Wasserversorg.*, 44:815-819, and 45:842-844, 1901.

Hodgkinson J, Cox ME, McLoughlin S. Groundwater mixing in a sand-island freshwater lens: density-dependent flow and stratigraphic controls. *Aust J Earth Sci* 2007;54:927-46.

Landman AJ, Analysis of physical mechanisms underlying density-dependent transport in porous media. PhD Thesis, Delft University of Technology, 2005.

Langevin, C.D., Oude Essink, G.H.P., Panday, S., Bakker, M., Prommer, H., Swain, E.D., Jones, W., Beach, M. and Barcelo, M. MODFLOW-based tools for simulation of variable-density groundwater flow. Chap. 2. In: *Coastal Aquifer Management—Monitoring, Modeling, and Case Studies*, (eds.) A.H.-D. Cheng and D. Ouazar, Lewis Publ., 49-76, 2004.

Le Maître, O.P., Knio, O.M.: Spectral methods for uncertainty quantification. In: *Scientific Computation*. Springer, New York (2010)

Lu C, Chen Y, Zhang C, Luo J. Freshwater-seawater mixing zone in stratified coastal aquifers. *Water Resour Res*, submitted for publication.

Oki DS, Souza WR, Bolke EL, Bauer GR. Numerical analysis of the hydrogeologic controls in a layered coastal aquifer system, Oahu, Hawaii, USA. *Hydrogeol J* 1998;6:243-63

Kerrou J, Renard P. A numerical analysis of dimensionality and heterogeneity effects on advective dispersive seawater intrusion processes. *Hydrogeol J* 2010;18:55-72.

Konikow, L.F., Goode, D.J., and Hornberger, G.Z. A Three-Dimensional Method-of-Characteristics Solute-Transport Model (MOC3D). U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 96-4267, 87 p., 1996.

Reilly TE, Goodman AS. Analysis of saltwater upconing beneath a pumping well. *J Hydrol* 1987;89:169-204

Saeed MM, Bruen M, Asghar MN. A review of modeling approaches to simulate saline-upconing under skimming wells. *Nord Hydrol* 2002;33:165–88.

Saltelli A., Ratto M., Tarantola S., Campolongo F., 2006, "Sensitivity analysis practices: Strategies for model-based inference", *Reliability Engineering and System Safety*, 91, 1109–1125.

Saltelli A, Tarantola S, Chan K. A quantitative, model independent method for global sensitivity analysis of model output. *Technometrics* 1999;41(1):39–56.

S. A. Smolyak. Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Sov. Math., Dokl.*, 4: 240_243, 1963.

Sobol I., 2001, "Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates", *Mathematics and Computers in Simulation*, 55, 217-280.

Sobol I., Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Math Modeling Comput Exp* 1993;1:407-14.

Sobol I., Kucherenko SS. Global Sensitivity indices for nonlinear mathematical models, *Review. Wilmott Mag* 2005;1:56-61.

Sudret B., 2008, "Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions", *Reliability Engineering & System Safety*, 93, 964–979.

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

Shalev E, Lazar A, Wollman S, Kington S, Yechieli Y, Gvirtzman H. Biased monitoring of fresh water-salt water mixing zone in coastal aquifers. *Ground Water* 2009;47:49–56.

Strack ODL. *Groundwater mechanics*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall; 1989.

Strack ODL. A single-potential solution for regional interface problems in coastal aquifers. *Water Resour Res* 1976;12:1165–74.

Souza, W. R., and C. I. Voss (1987), Analysis of an anisotropic coastal system using variable density flow and solute transport simulation, *J. of Hydrol.*, 92, 17–41.

Simpson, M. J., and T. P. Clement (2004), Improving the worthiness of the Henry problem as a benchmark for density-dependent groundwater flow models, *Water Resour. Res.*, 40, W01504, doi:10.1029/2003WR002199

Turner IL, Acworth RI. Field measurements of beachface salinity structure using cross-borehole resistivity imaging. *J Coast Res* 2004;20:753–60.

Trefethen, L.N.: Is Gauss quadrature better than Clenshaw–Curtis? *SIAM Rev.* 50(1), 67–87 (2008)

WHO. Guidelines for drinking-water quality, 4th ed.; 2011. 564 .
<www.who.int/water_sanitation_health/publications/2011/dwq_guidelines/>

Wiener N., 1998, The homogeneous chaos, *Am. J. Math.*, 938, 60, 897–936.

Werner A.D., Bakker M, Vincent E.A., Vandenbohede A, Lu C, Behzad A, Simmons CT, Barry DA, Seawater intrusion processes, investigation and management: Recent advances and future challenges. *Advances in Water Resources* 2013;51;3-26.

Pinder, G. F., and H. H. Cooper (1970), A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front, *Water Resour. Res.*, 6(3), 875–82.

Post VEA, Prommer H. Multicomponent reactive transport simulation of the Elder problem: effects of chemical reactions on salt plume development. *Water Resour Res* 2007;43:W10404.

Pool M, Carrera J. A correction factor to account for mixing in Ghyben–Herzberg and critical pumping rate approximations of seawater intrusion in coastal aquifers. *Water Resour Res* 2011;47:W05506

Voss, C. I., and A. Provost (2002), SUTRA, A model for saturated-unsaturated variable-density

ground-water flow with solute or energy transport, Water-Resources Investigations 02-4231, U.S. Geological Survey.

Xiu D., Karniadakis G.E., 2002, "Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos", *Journal of Computational Physics*, 187, 137-167.