

## AUTOMI CELLULARI MACROSCOPICI PER LA SIMULAZIONE DEL MOTO TRIDIMENSIONALE IN MEZZI POROSI NON SATURI

Giuseppe Mendicino<sup>1</sup>, Alfonso Senatore<sup>1</sup>, Giandomenico Spezzano<sup>2</sup>, Salvatore Straface<sup>1</sup>

- (1) Dipartimento di Difesa del Suolo, Università della Calabria, Ponte Pietro Bucci, Cubo 41 b - 87036 Arcavacata di Rende (CS), Italy. e-mail: menjoe@dds.unical.it, senatore@dds.unical.it, straface@dds.unical.it  
(2) Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto di Calcolo e Reti ad Alte Prestazioni, Ponte Pietro Bucci, Cubo 41 c - 87036 Arcavacata di Rende (CS), Italy. e-mail: spezzano@icar.cnr.it

Parole chiave: idrologia, acque sotterranee, non saturo, automi cellulari, calcolo parallelo.

### SOMMARIO

*L'equazione di Richards per la descrizione del moto in un mezzo non saturo è un'equazione differenziale di tipo parabolico altamente non lineare per effetto delle dipendenze del carico piezometrico rispetto al contenuto idrico del suolo ed alla permeabilità relativa.*

*La soluzione di tale equazione differenziale avviene per mezzo di procedure numeriche che in molti casi risultano complesse e, su ampie scale spaziali, computazionalmente onerose.*

*Nel presente articolo si descrive un modello tridimensionale per la simulazione del moto in un mezzo non saturo sviluppato in un ambiente di calcolo parallelo basato sull'uso degli automi cellulari macroscopici (AC). La struttura del modello, in particolare, rappresenta un'estensione dell'originale paradigma degli automi cellulari, poiché esso usa un approccio macroscopico dove le interazioni locali tra gli automi sono governate da leggi dal chiaro significato fisico.*

*Le prestazioni del modello sono state verificate attraverso il confronto dei risultati con schemi numerici di letteratura. Per ciascuno dei casi osservati si sono ottenuti risultati più che soddisfacenti, anche in situazioni caratterizzate da marcate non-linearità.*

### 1 INTRODUZIONE

La capacità di comprendere e modellare i processi idrologici a differenti scale spaziali, insieme alla necessità di una più dettagliata conoscenza dei meccanismi che regolano le interazioni tra la parte superficiale e sub-superficiale del suolo, ha portato gli esperti del settore a sviluppare differenti forme di modellazione.

In molti casi questi modelli, che usano sistemi di equazioni “fully coupled” per descrivere completamente il ciclo idrologico di un bacino, hanno mostrato limitazioni computazionali principalmente dovute sia alle contenute dimensioni delle griglie di campionamento (che comportano limitati domini spaziali), sia ai ridotti passi temporali che sono essenziali per prevenire instabilità numeriche.

Questi problemi diventano più marcati durante le simulazioni dei fenomeni idrologici che interessano il suolo, a causa della rapidità con cui lo stesso risponde alle forzanti climatiche, limitando pertanto la modellazione all'uso di passi spaziali e temporali sensibilmente ridotti (Orlandini, 1999).

Ne segue così la necessità di individuare soluzioni numeriche alternative che, sempre sotto l'egida di una descrizione fisica dei fenomeni, consentano di incrementare il dominio spaziale e temporale con sforzi computazionali accettabili.

La modellazione basata sugli automi cellulari (AC) rappresenta una valida alternativa ai metodi analitico-deduttivi basati sull'analisi di equazioni dal significato fisico che descrivono un particolare fenomeno e sulla successiva risoluzione condotta attraverso metodi numerici (Toffoli & Margolus, 1987; von Neumann, 1966; Wolfram, 1986 e 2002). Nei fenomeni fisici complessi, questa modellazione consente di catturare le caratteristiche essenziali di sistemi il cui comportamento globale è derivato dall'effetto collettivo di numerosi componenti semplici interagenti localmente tra loro. Molteplici sono le applicazioni nel cam-

po della fluidodinamica basate sul paradigma computazionale degli AC, la maggior parte delle quali segue approcci di carattere microscopico come, per esempio, la modellazione del comportamento dei fluidi turbolenti attraverso modelli noti con il nome di gas reticolari (LG) e modelli di Boltzmann su reticolo (LB). Nel caso dei LG l'idea di base consiste nel modellare un fluido attraverso un sistema di particelle, ognuna delle quali è vincolata a muoversi, con velocità costante, solo lungo le direzioni di un reticolo discreto. Le leggi locali sono definite in modo da garantire l'invarianza del numero di particelle (conservazione della massa) e la conservazione della quantità di moto (*Frisch et al.*, 1986). *Rothman & Zaleski* (1997) hanno dimostrato come tale approccio sia in grado di riprodurre per fluidi non comprimibili le equazioni di Navier-Stokes. Tuttavia, i LG per la semplicità delle particelle fluide considerate, insieme ai legami ipotizzati tra le stesse, non sono in grado di riprodurre dettagliatamente l'evoluzione di un processo macroscopico, bensì solo la struttura iniziale. La struttura discreta mostrata dai modelli LG racchiude alcune carenze parzialmente risolte dai modelli LB, dove lo stato delle variabili può assumere valori continui (invece che interi) implicando pertanto una efficienza computazionale più elevata, visto che le quantità d'interesse non sono più le singole particelle ma la loro densità (*McNamara & Zanetti*, 1988; *Succi et al.*, 1991; *Chopard & Luthi*, 1999). In questo modo il numero di componenti del sistema si riduce sensibilmente e non è più necessaria la fase del calcolo di medie spazio-temporali per la determinazione delle quantità fisiche d'interesse del sistema. Come per i modelli LG, anche per i modelli LB su reticolo è stata dimostrata l'equivalenza con le equazioni di Navier-Stokes per fluidi incomprimibili (*Chopard & Droz*, 1998).

Questi approcci non consentono di esprimere la velocità in forma esplicita poiché una quantità di fluido si muove da una cella all'altra secondo un passo coincidente con una evoluzione dell'AC (che diventa quindi una costante temporale), implicando una velocità costante nel contesto spazio-temporale discreto dell'AC. In ogni modo, le velocità possono essere ottenute attraverso l'analisi del comportamento globale del sistema: nello spazio, considerando cluster di celle; nel tempo, invece, attraverso il valore medio del fronte di avanzamento della corrente in un passo di evoluzione dell'automa.

I processi che descrivono il comportamento del suolo e del sottosuolo appartengono ai fenomeni macroscopici complessi e difficilmente appaiono interpretabili attraverso approcci microscopici quali quelli descritti dai modelli LG o LB. La complessità della scala maggiore può essere risolta estendendo l'originario paradigma degli AC secondo degli schemi empirici analoghi a quelli suggeriti da *Di Gregorio & Serra* (1999) e *Di Gregorio et al.* (1999). In questi schemi, per ciascun automa sono consentiti un elevatissimo numero di stati, ciascuno descritto da un prodotto cartesiano di sub-stati e finalizzato alla descrizione di una serie di grandezze fisiche nella porzione di spazio occupata dallo stesso automa. Inoltre, la funzione che consente l'evoluzione dell'automa, o di transizione, è divisa in differenti parti, ognuna corrispondente a un processo elementare del fenomeno macroscopico osservato (*Avolio et al.*, 2003).

Questi AC di tipo empirico fanno uso di particolari leggi locali che regolano le interazioni tra gli automi per mezzo di parametri dal non chiaro significato fisico e, come conseguenza, hanno bisogno di pesanti fasi di calibrazione finalizzate alla stima ottimale degli stessi parametri. L'onere computazionale introdotto dalle fasi di calibrazione è in parte mitigato dalla possibilità offerta dagli AC di rendere la loro struttura compatibile con sistemi di calcolo parallelo (*Toffoli & Margolus*, 1987; *Crutchfield et al.*, 2002), senza però fare mai riferimento alla scalabilità computazionale dell'AC, ovvero al numero di processori ottimali richiesto dal sistema di calcolo per il tipo di problema analizzato (*Folino & Spezzano*, 2000).

Nel presente lavoro la stessa estensione degli AC per sistemi macroscopici è stata utilizzata per sviluppare un modello tridimensionale che simula il movimento di un liquido in un mezzo non saturo. In particolare, il modello presentato si discosta dagli approcci empirici finora proposti in letteratura poiché utilizza leggi locali di interazione tra gli automi basate esclusivamente su regole dal chiaro significato fisico.

Il modello è stato realizzato all'interno di un ambiente di calcolo parallelo ad alte prestazioni, appositamente sviluppato per la simulazione di Automi Cellulari, denominato CAMELOT (*Dattilo & Spezzano*, 2003), ed è stato impiegato per differenti schemi multidimensionali fornendo risultati analoghi a quelli ottenuti con altri schemi numerici proposti in letteratura da *Paniconi et al.* (1991) e *Magnuson et al.* (1990). Infine, per alcuni schemi tridimensionali è stata investigata la scalabilità computazionale del modello, ottenendo valori di efficienza molto alti, pari a circa l'82% su 32 processori del sistema parallelo.

## 2 FORMULAZIONE DISCRETA DEL MOTO IN UN MEZZO NON SATURO

La soluzione delle equazioni che governano il moto di un liquido in un mezzo non saturo è ottenuta di norma per mezzo di metodi numerici che, in un modo o nell'altro, partono da una formulazione differenziale delle equazioni stesse. Così, la formulazione discreta è ottenuta mediante delle procedure di integrazione che forniscono un sistema di equazioni algebriche la cui soluzione definisce lo stato energetico del sistema. Molti sono i metodi numerici che integrano l'equazione di Richards, fra quelli più diffusi si hanno il Metodo alle Differenze Finite (FDM), il Metodo agli Elementi Finiti (FEM) e il Metodo ai Volumi Finiti (FVM).

Il processo numerico che trasforma le quantità osservate o misurate in densità e, successivamente, il passaggio al limite per ottenerne le funzioni di campo, tipico della trattazione differenziale, priva le variabili fisiche del loro contenuto geometrico. Per tale motivo l'integrazione numerica delle equazioni differenziali non è basata su considerazioni di tipo geometrico bensì numeriche. Ne consegue che, per ottenere una formulazione discreta dell'equazione fondamentale di una teoria fisica, non è necessario "scendere" alla formulazione differenziale per poi "risalire" alla formulazione discreta. E' sufficiente applicare le leggi fondamentali della fisica a piccole regioni nelle quali l'ipotesi di uniformità del campo è da ritenersi accettabile, tenuto conto del grado di accuratezza dei dati di input e della scala di osservazione del fenomeno fisico. In questo modo si ottiene una formulazione diretta discreta.

Se si considera un sistema discreto di celle, in cui le celle hanno dimensioni minori laddove l'ipotesi di omogeneità è meno rispettata, si può utilizzare la legge costitutiva, usata nel contesto differenziale, come un'approssimazione.

Nel presente lavoro si è interessati principalmente a definire una forma discreta dell'equazione fondamentale che governa il moto in un mezzo non saturo. Tale equazione fondamentale, la cui soluzione fornisce le variabili di configurazione del fenomeno, è il risultato finale della composizione dell'equazione di bilancio (equazione di continuità) e dell'equazione costitutiva (equazione di Darcy). L'equazione di bilancio in forma discreta è pertanto la seguente:

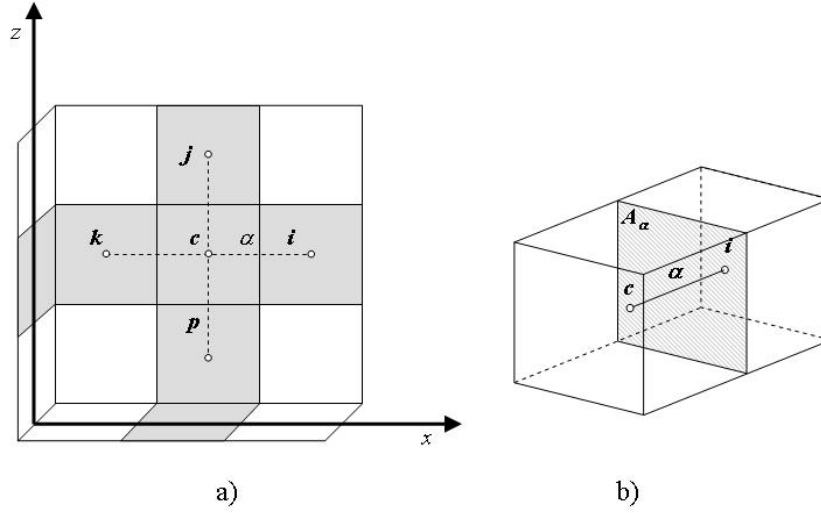
$$\sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}^c + \frac{1}{\rho_c} \frac{\Delta m_c}{\Delta t} = S_c \quad (1)$$

dove  $c$  è la cella su cui si applica il bilancio della massa idrica,  $\alpha$  è la generica direzione ottenuta dalla congiungente il baricentro della cella  $c$  con una delle celle adiacenti (Fig. 1a),  $\Phi_{\alpha}^c$  è la portata [ $L^3 T^{-1}$ ],  $m_c$  è la massa all'interno della singola cella  $c$  [M],  $\rho_c$  è la densità del fluido [ $ML^{-3}$ ],  $\Delta t$  è il passo temporale [T] e  $S_c$  è il termine sorgente di massa [ $L^3 T^{-1}$ ]. L'equazione (1) è valida sia per nodi interni che per nodi di contorno, evitando, come è per l'approccio differenziale, la separazione fra i diversi tipi di nodi.

La portata è data dall'equazione di Darcy, la quale in termini discreti diventa:

$$\Phi_{\alpha}^c = -K_{ac} \left( \frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}} \right) A_{\alpha} = -K_{ac} i_{\alpha} A_{\alpha} \quad (2)$$

dove  $K_{ac}$  [ $L T^{-1}$ ] è la permeabilità media fra la cella  $c$  e quella adiacente nella direzione  $\alpha$  (costante nel suolo saturo mentre in quello non saturo è funzione della pressione capillare),  $h_c$  è il carico idraulico [L],  $i_{\alpha}$  è il gradiente idraulico [-], mentre con  $A_{\alpha}$  si è indicata l'area della superficie [ $L^2$ ] attraverso cui passa il flusso  $\Phi_{\alpha}^c$  (Fig. 1b). La legge di Darcy può essere scritta in maniera molto semplice se, come nel caso qui riportato, le facce delle celle adiacenti sono perpendicolari alla congiungente i baricentri delle celle stesse. Se le facce delle celle non sono ortogonali è ancora possibile formulare una legge discreta di Darcy, ma è necessario in tal caso usare un'interpolazione lineare o quadratica del carico idraulico.



**Figura 1.** Schema di un sistema di celle bidimensionale (a); Rappresentazione del flusso che attraversa la faccia di due celle adiacenti (b).

La variazione della massa nel tempo assume una forma diversa a seconda del tipo di flusso considerato. Nel caso di flusso non saturo, assumendo il fluido incomprimibile, la variazione della massa nel tempo è ottenuta attraverso la seguente equazione:

$$\frac{\Delta m_c}{\Delta t} = v_c \rho_c \frac{\Delta \theta_c}{\Delta t} \quad (3)$$

Se il rapporto tra la pressione capillare  $p_c$  [ $\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$ ] e il peso specifico del liquido  $\gamma_w$  [ $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-2}$ ] rappresenta il carico piezometrico  $\psi_c$  [L] e se si considera la capacità di ritenzione specifica  $C_c(\psi)$  [ $\text{L}^{-1}$ ] (Bear, 1972), dall'equazione (3) si ottiene:

$$\frac{\Delta \theta_c}{\Delta t} = \frac{\Delta \theta_c}{\Delta h_c} \frac{\Delta h_c}{\Delta t} = C_c \frac{\Delta h_c}{\Delta t} \quad (4)$$

dalla quale si ricava la forma completa dell'equazione del flusso nel non saturo:

$$\sum_{\alpha} -K_{\alpha c}(\psi_c) \left( \frac{h_{\alpha} - h_c}{l_{\alpha}} \right) A_{\alpha} + w_c C_c \frac{\Delta h_c}{\Delta t} = S_c \quad (5)$$

dove  $l_{\alpha}$  [L] è pari alla dimensione del lato della cella e  $w_c$  [ $\text{L}^3$ ] è il volume della cella  $c$ .

L'equazione (5) descrive il flusso di un liquido in un mezzo non saturo secondo una forma discreta basata su un approccio di tipo fisico ottenuto a partire dall'osservazione del fenomeno naturale. La stessa equazione può essere applicata ad ogni cella del dominio analogamente ad un approccio di tipo esplicito, in cui  $\Delta h_c$  è il solo termine incognito da stimare nel passo di calcolo successivo. Tale approccio appare pertanto idoneo ad una implementazione basata sull'uso degli automi cellulari e, quindi, sviluppabile in un ambiente di calcolo parallelo.

Nel caso in esame è inoltre necessario specificare la relazione non lineare tra la variabile dipendente, il carico idraulico  $h_c$ , e i termini che caratterizzano le proprietà idrauliche del suolo, come il contenuto idrico  $\theta_c$ , la capacità di ritenzione specifica  $C_c$  e la conducibilità idraulica  $K(\psi)$ . Tale corrispondenza può essere espressa in forma di tabella o più comunemente attraverso equazioni empiriche che interpolano i dati sperimentali per mezzo di modelli teorici (Mualem, 1976; van Genuchten & Nielsen, 1985).

La formulazione discreta proposta è valida anche per mezzi porosi eterogenei ed anisotropi. Il carico

idraulico si assume continuo e non si ha la necessità di ipotizzare che sia anche differenziabile. Ciascuna cella può avere differenti proprietà costitutive: ciò permette di poter trattare anche mezzi compositi porosi e fratturati. Le sorgenti possono essere discontinue (canale di drenaggio o ricarica superficiale) e anche concentrate (pozzi o sorgenti). Al solito, le condizioni al contorno sono di due tipi: su alcune parti del contorno il carico idraulico può essere assegnato, mentre sulle rimanenti parti se ne può assegnare il flusso (il termine sorgente di massa  $S_c$ ). L'obiettivo è quello di determinare il carico idraulico in tutti i nodi (baricentri) delle celle in cui tale valore non è assegnato. Ciò può avvenire con un unico schema funzionale sia in un nodo interno che di contorno: in questo modo, è possibile evitare la innaturale separazione tra le equazioni differenziali e le condizioni al contorno che è tipica di una formulazione differenziale.

Se si utilizza una tassellazione di Delaunay (come nel presente lavoro) il sistema discreto di equazioni che si ottiene è simile a quello ottenuto usando schemi basati sui FVM o sui FDM (Mattiussi, 1997; Manzini & Ferraris, 2004). Se non si usa una tassellazione di Delaunay (caso di mesh irregolari) si può ottenere un sistema discreto di equazioni attraverso un'interpolazione del carico idraulico sui vertici delle celle. E' stato dimostrato che nel caso di interpolazione lineare il sistema discreto di equazioni coincide con quello determinato a partire da uno schema basato sul FEM (Tonti, 2001). Nel caso di interpolazione quadratica, tuttavia, il sistema di equazioni discreto differisce da quello che si otterrebbe con il FEM perché non è simmetrico. Inoltre, l'uso di un'interpolazione quadratica consente di ottenere un ordine di convergenza (quarto) superiore a quello ottenuto con il FEM (terzo), usando lo stesso tipo di interpolazione (Tonti, 2001; Straface et al., 2006).

Infine, quando si usa un metodo con una formulazione differenziale o integrale, la scelta del tipo di cella o del tipo di tassellazione dipende dal metodo scelto (FEM, FDM, FVM, ...). Al contrario, se si usa una formulazione discreta diretta, il tipo di cella o di tassellazione e l'intervallo di tempo possono essere scelti in considerazione del problema fisico da risolvere, della scala spazio-temporale del fenomeno e dell'ambiente dell'automa cellulare macroscopico utilizzato, avendo l'opportunità inoltre di usare celle diverse (triangoli, quadrati ed esagoni) per singoli elementi nello stesso dominio.

### 3 MODELLO AC PER LA SIMULAZIONE DEL FLUSSO IN UN MEZZO NON SATURO

Gli automi cellulari (AC) sono sistemi dinamici in cui lo spazio, il tempo e gli stati delle grandezze sono ipotizzati come quantità discrete. Essi sono basati su una divisione dello spazio in celle regolari, ognuna avente al suo interno un automa finito ( $fa$ ). Le quantità fisiche, o stati dell'automa, possono assumere solo un insieme finito di valori. L'input per ciascun  $fa$  è dato dagli stati delle celle vicine, compresa la cella che contiene lo stesso  $fa$ . Gli stati degli automi variano in relazione a regole locali (funzione di transizione); ovvero, in un dato passo temporale lo stato dell'automa dipende dal suo stato e da quelli delle celle vicine determinati al passo precedente. Gli automi hanno identiche funzioni di transizione, applicate simultaneamente a ciascuna cella del sistema (AC sincrono). All'inizio della simulazione tutti gli automi sono in stati arbitrari che rappresentano le condizioni iniziali del sistema, di seguito l'AC evolve cambiando gli stati degli automi finiti a passi discreti di tempo applicando simultaneamente a ogni cella la stessa funzione di transizione. Infine, l'evoluzione globale del sistema è ottenuta dall'evoluzione di tutte le celle dell'AC.

Poiché ogni cella usa la stessa struttura di vicinato, anche la cella sul contorno del dominio fisico possiede un vicinato di celle che sono esterne al dominio stesso. Per convenzione, il bordo delle celle è ipotizzato connesso con le celle ubicate sul bordo opposto del contorno, al fine di formare un dominio chiuso. Con la stessa regola di evoluzione applicata a tutte le celle, ciò implica una condizione al contorno, definita periodica, che è rappresentativa di un sistema infinito quale quello degli AC. Ovviamente, il tipo di condizioni al contorno da utilizzare durante le simulazioni dipende dal tipo di fenomeno fisico da riprodurre. Altri tipi di condizioni al contorno sono comunque ammessi, fissando inizialmente dei valori delle grandezze sulle celle di bordo, oppure definendo sulle stesse celle delle particolari regole di evoluzione.

### 3.1 Automi Cellulari per la modellazione di fenomeni naturali macroscopici

La precedente definizione di AC non è sufficiente per modellare fenomeni naturali macroscopici che si estendono nello spazio, come per esempio il fenomeno dell'infiltrazione a scala di bacino. Condizioni di maggior dettaglio sono richieste per consentire una corrispondenza tra il sistema, con la sua evoluzione fisica nello spazio e nel tempo, ed il modello, con le simulazioni spazio-temporali condotte con gli AC. La complessità di questi fenomeni macroscopici suggerisce, pertanto, un'estensione dell'originario paradigma computazionale degli AC.

Per prima cosa deve essere determinata in modo univoco una corrispondenza spaziale tra le celle dell'AC e la regione in cui evolve il fenomeno; allo stesso modo, deve essere fissato il tempo equivalente a un passo di calcolo dell'AC. La dimensione della cella e il clock dell'AC sono definiti come "parametri globali" e risultano costanti per tutto l'arco della simulazione. Essi costituiscono, insieme ad altri eventuali parametri solitamente necessari ai fini della simulazione, l'insieme  $P$  dei parametri dell'AC.

Lo stato della cella deve tenere in considerazione tutte le caratteristiche che sono ritenute rilevanti per l'evoluzione del sistema. Nell'approccio in esame ogni caratteristica corrisponde a un "sottostato", i cui valori devono formare un insieme finito del tipo  $Q = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_n\}$ . L'insieme  $Q$  di tutti i possibili valori dello stato della cella è, dunque, espresso come prodotto cartesiano degli  $n$  sottostati di  $Q = Q_1 \times Q_2 \times \dots \times Q_n$ . Per consentire una efficace descrizione dei vari fenomeni naturali, ogni sottostato è rappresentato da un numero che può assumere un valore intero appartenente a un insieme finito di valori o un valore reale ed in questo caso lo stato diventa continuo. La presenza di uno stato continuo rende l'automa cellulare più generale e non ne snatura la sua definizione originaria in quanto le variabili continue sono rappresentate durante la simulazione da un numero finito di bit e generalmente hanno un numero finito di valori permessi; tale numero può essere molto grande ma sarà sempre finito. Inoltre, tale rappresentazione dello stato è adatta per modellare il fenomeno tramite un linguaggio di programmazione cellulare (Spezzano & Talia, 1998). In tal caso infatti lo stato sarà rappresentato da un insieme di variabili, una per ogni sottostato, appartenenti ad uno dei tipi di dati fondamentali o composti (char, integer, real, double, array, etc.) del linguaggio.

La funzione di transizione  $\sigma$  dell'AC deve valutare tutti i processi (fisici, chimici, ecc.) responsabili del cambiamento dei valori dello stato della cella, che sono considerati rilevanti per l'evoluzione del sistema. Così come l'insieme degli stati  $Q$  è decomposto negli  $n$  sottostati  $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ , anche la funzione di transizione  $\sigma$  può essere suddivisa in  $p$  "processi elementari". I processi elementari a loro volta si ripartiscono in "trasformazioni interne",  $T_1, T_2, \dots, T_p$ , e "interazioni locali",  $I_1, I_2, \dots, I_q$ .

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

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

$$\sigma_{T_i} : Q_{T_i} \rightarrow Q'_{T_i} \quad (6)$$

dove  $Q_{T_i}$  e  $Q'_{T_i}$  sono prodotti cartesiani di elementi di  $Q$  rispettivamente prima e dopo la trasformazione.

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

$$\sigma_{I_j} : Q^m_{I_j} \rightarrow Q'_{I_j} \quad (7)$$

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

L'evoluzione del sistema è ottenuta applicando, secondo un ordine che dipende dalle caratteristiche del fenomeno da modellare, le trasformazioni interne e le interazioni locali a ogni cella dell'AC.

### 3.2 Automa Cellulare macroscopico per la simulazione del moto in un mezzo non saturo

Nel caso della simulazione del moto di un liquido in un mezzo non saturo, il modello proposto è costituito da un dominio tridimensionale, suddiviso in celle cubiche di ampiezza uniforme, descritte dalla seguente struttura funzionale:

$$AC = \langle E^d, Q, P, X, \sigma \rangle \quad (8)$$

dove:

- $E^d = \{(x,y,z) \mid x,y,z \in \mathbb{N}, 0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y, 0 \leq z \leq l_z\}$  è l'insieme delle celle identificate dai punti con coordinate intere dove il fenomeno evolve.  $\mathbb{N}$  è l'insieme dei numeri naturali,  $l_x$ ,  $l_y$  e  $l_z$  rappresentano i limiti della regione;
- $Q$  è l'insieme finito degli stati per una cella, dato dal prodotto cartesiano dell'insieme dei sottostati:

$$Q = Q_h \times Q_\psi \times Q_\theta \times Q_K \times Q_\delta \quad (9)$$

dove  $Q_h$  è il sottostato che descrive il carico totale della cella,  $Q_\psi$  è il sottostato che descrive il carico piezometrico,  $Q_\theta$  descrive il sottostato relativo al contenuto idrico (può indicare quindi il valore del contenuto di umidità in volume  $\theta$  oppure, a seconda delle equazioni caratteristiche adottate, il grado di saturazione),  $Q_K$  descrive il sottostato relativo al valore della permeabilità, ed infine  $Q_\delta$  indica, nel caso di analisi in condizioni transitorie, il sottostato relativo al valore di un parametro necessario per la convergenza del sistema di calcolo;

- $P$  è l'insieme dei parametri globali dell'AC, costanti nello spazio (ma passibili di variazione nel tempo), che influiscono nella funzione di transizione, ed è costituito dalle dimensioni del lato dell'automa  $l_\omega$ , dal passo temporale  $\Delta t$  (in condizioni transitorie), dalla permeabilità a saturazione  $K_s$ , da una serie di parametri associati alle equazioni caratteristiche (come il contenuto idrico residuo nella cella,  $\theta_r$ , il contenuto idrico a saturazione,  $\theta_s$ , il carico capillare alla saturazione,  $\psi_s$ , l'indice di distribuzione dei pori,  $n$ , un parametro di continuità relativo al carico capillare,  $\psi_\theta$ , il carico di gorgogliamento  $\psi_b$ );
- $X = \{(0,0,0), (-1,0,0), (0,1,0), (0,0,-1), (0,0,1), (0,-1,0), (1,0,0)\}$  identifica il vicinato di von Neumann tridimensionale, che influenza il cambiamento di stato nella cella centrale;
- $\sigma: Q^7 \rightarrow Q$  è la funzione di transizione deterministica dell'automa elementare che, una volta fissate le condizioni iniziali (valori del carico idraulico e piezometrico, della permeabilità e del contenuto idrico delle celle) e le condizioni al contorno del problema in analisi, si basa su due passi elementari:
  - $\sigma_1$  (*trasformazione interna*): l'aggiornamento delle proprietà idrauliche del suolo (ovvero la conducibilità idraulica,  $K$ , il contenuto idrico,  $\theta$ , e la capacità specifica di ritenzione,  $C$ ), dipendenti tramite le equazioni caratteristiche dal carico idraulico  $h$ . Tale aggiornamento non è necessario solo ai fini dell'evoluzione della simulazione, ma anche per la determinazione delle condizioni di stabilità;
  - $\sigma_2$  (*interazione locale*): l'applicazione dell'equazione di bilancio (5), per la determinazione del nuovo valore del carico idraulico  $h$  e del carico capillare  $\psi$  nella cella.

All'inizio della simulazione, le condizioni di tutti gli stati del sistema dipendono dal valore iniziale assegnato al carico idraulico  $h$ , mentre le condizioni al contorno possono essere assegnate sia in termini di flusso idrico entrante (infiltrazione) o uscente (exfiltrazione) dal sistema (condizioni di Neumann), sia ponendo determinati valori di carico idraulico o capillare (e quindi di contenuto idrico) su alcune celle del sistema (condizioni di Dirichlet).

Una volta definite le condizioni iniziali ed al contorno del problema, ed inizializzati i parametri globali, la funzione di transizione può finalmente essere applicata alle celle del sistema. Di seguito saranno analizzati in dettaglio i due passi elementari che consentono l'evoluzione della configurazione del sistema nel tempo, schematizzati in figura 2.

#### 3.2.1 Aggiornamento delle proprietà idrauliche del suolo ( $\sigma_1$ )

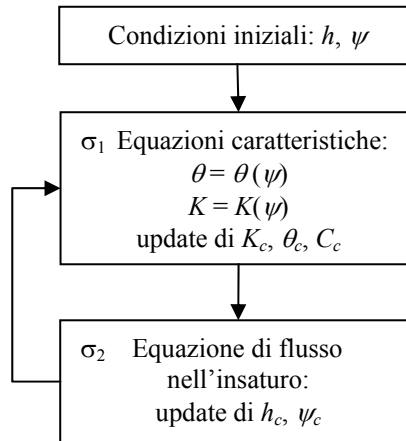
L'uso delle equazioni in forma discreta osservate nel precedente paragrafo necessita della definizione

dei legami non lineari tra la variabile assunta come indipendente, il carico idraulico  $h$ , ed i termini che rappresentano le proprietà idrauliche del suolo, ovvero il contenuto idrico,  $\theta$ , la capacità specifica di ritenzione,  $C$ , e la conducibilità idraulica,  $K(\psi)$ . Tra i numerosi modelli teorici disponibili in letteratura, nell'applicazione del modello proposto sono state considerate le equazioni di *van Genuchten & Nielsen* (1985), comunemente scritte nella forma:

$$\begin{aligned}\theta(\psi) &= \theta_r + (\theta_s - \theta_r)[1 + \beta]^{-m} & \psi < 0 \\ \theta(\psi) &= \theta_s & \psi \geq 0\end{aligned}\quad (10)$$

$$\begin{aligned}K_r(\psi) &= (1 + \beta)^{-5m/2} \left[ (1 + \beta)^m - \beta^m \right]^2 & \psi < 0 \\ K_r(\psi) &= 1 & \psi \geq 0\end{aligned}\quad (11)$$

dove  $\theta_r$  è il contenuto idrico residuo,  $\theta_s$  il contenuto idrico a saturazione,  $\beta = (\psi/\psi_s)^n$ ,  $\psi_s$  il carico capillare alla saturazione ed  $n$  un indice di distribuzione della dimensione dei pori, legato al parametro  $m$  dalla relazione  $m = 1 - 1/n$ , con  $n$  compreso tra 1.25 e 6. Questi modelli teorici non considerano il fenomeno dell'isteresi nelle dipendenze  $\theta = \theta(\psi)$  e  $K_r = K_r(\psi)$ .



**Figura 2.** Schematizzazione dei due passi elementari su cui si basa l'evoluzione dell'AC.

### 3.2.2 Applicazione dell'equazione discreta del flusso ( $\sigma_2$ )

Una volta aggiornate le proprietà idrauliche del suolo, si può applicare l'equazione di bilancio (5), che consente di definire per ciascuna cella il nuovo valore della variabile indipendente, il carico idraulico  $h$ , da cui dipendono i valori di tutti gli stati.

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

$$\Delta h_{c,\alpha} = \frac{\Delta t}{w_c C_c} \left[ Q_c + K_{c,\alpha}(\psi_c) \left( \frac{h_\alpha - h_c}{l_\alpha} \right) A_\alpha \right] \quad (12)$$

La variazione complessiva del carico idraulico  $\Delta h_c$  nella cella  $c$  è però dovuta alle interazioni con tutto il vicinato, per cui:



$$\Delta h_c = \sum_{\alpha} \Delta h_{c,\alpha} \quad (13)$$

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

$$h_c^{t+\Delta t} = h_c^t + \Delta h_c = h_c^t + \sum_{\alpha} \Delta h_{c,\alpha} \quad (14)$$

A partire da questo nuovo valore sarà possibile ricavare il carico capillare ( $\psi = h - z$ ), aggiornare nuovamente le proprietà idrauliche del suolo e riapplicare l'equazione di bilancio (5) per un nuovo intervallo temporale.

#### 4 RISULTATI

I risultati e le prestazioni del modello AC sono state verificate considerando alcuni “test case” proposti in letteratura. In particolare, i risultati delle simulazioni del modello sono stati confrontati con le simulazioni numeriche di due casi monodimensionali (test case 1D1 e 1D2), un caso bidimensionale (test case 2D1) e un caso tridimensionale (test case 3D1). Nel caso tridimensionale è stata eseguita anche un'analisi di scalabilità del processo di calcolo per verificare quantitativamente i benefici indotti dall'uso di una piattaforma di calcolo parallelo.

##### 4.1 Test case monodimensionali

I due test case monodimensionali (tratti da *Paniconi et al.*, 1991) riproducono rispettivamente un problema di infiltrazione ed uno di exfiltrazione lungo 2 differenti colonne di suolo, e sono entrambi basati sull'equazione originale di Richards. Poiché in generale non esiste una soluzione analitica chiusa per tale equazione, per il calcolo degli errori del modello AC ci si è riferiti alle soluzioni numeriche di riferimento utilizzate da *Paniconi et al.*, 1991, ottenute adottando uno schema FEM caratterizzato da un grigliato molto denso ed un passo temporale sensibilmente piccolo.

Le equazioni caratteristiche adottate sono le (10) e (11), con la curva di ritenzione  $\theta(\psi)$  modificata al fine di soddisfare alcuni problemi di tipo numerico secondo quanto segue:

$$\begin{aligned} \theta(\psi) &= \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + \beta]^{-m} & \psi < \psi_0 \\ \theta(\psi) &= \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + \beta_0]^{-m} + S_s (\psi - \psi_0) & \psi \geq \psi_0 \end{aligned} \quad (15)$$

dove  $\beta_0 = \beta(\psi_0) = (\psi_0/\psi_s)^n$  con  $\psi_0$  parametro di continuità, mentre con  $S_s$  si è indicato l'immagazzinamento specifico.

Il livello di accuratezza ottenuto dalle simulazioni effettuate è stato calcolato adottando una norma dell'errore al primo ordine:

$$\varepsilon 1(t) = \sum_{i=1}^n \frac{|\hat{\psi}(z, t) - \psi_{ref}(z, t)|}{n} \quad (16)$$

ed una norma dell'errore al secondo ordine:

$$\varepsilon 2(t) = \sum_{i=1}^n \frac{[\hat{\psi}(z, t) - \psi_{ref}(z, t)]^2}{n} \quad (17)$$

dove  $\hat{\psi}$  è il carico capillare simulato e  $\psi_{ref}$  è il carico capillare di riferimento per gli  $i=1..n$  punti del profilo considerati al tempo  $t$ , ognuno dei quali si trova ad una quota  $z_i$ .

Il test case 1D1 consiste nella simulazione del processo di infiltrazione e redistribuzione in una colonna di suolo inizialmente in equilibrio idrostatico. La condizione al contorno superficiale è un flusso darciano variabile nel tempo  $q$  che aumenta linearmente con il tempo, mentre il contorno inferiore è mantenuto ad un valore fisso del carico capillare  $\psi = 0$ , che permette il drenaggio attraverso la linea di falda. Il livello di discretizzazione spaziale ed il passo temporale sono stati scelti seguendo un criterio che assicura la convergenza del sistema (Mendicino *et al.*, 2006).

In figura 3 i risultati della simulazione sono confrontati con le soluzioni numeriche di riferimento e gli scostamenti che si osservano sono sensibilmente ridotti, legati probabilmente alla differenza tra gli schemi computazionali. I valori riscontrati per la norma dell'errore al primo e al secondo ordine sono indicati in tabella 2.

Parametro	Test case 1D1	Test case 1D2
$\theta_r$	0.08	0.15
$\theta_s$	0.54	0.38
$\psi_s$ , m	-3.0	-1.2
$n$	3.0	4.0
$S_s$ , m <sup>-1</sup>	0.02347	0.0001
$\psi_0$ , m	-0.95	-0.06698246
$\psi_{min}$ , m		-1.75
$K_s$ , m h <sup>-1</sup>	5.0	0.01
Condizioni al contorno superficiali	$q = t/64$	$q = -0.0006$ , finché $\psi = \psi_{min}$
$L$ , m	10.0	5.0
$\Delta z$ , m	0.1	0.05
$\Delta t$ , s	0.1	0.1

**Tabella 1.** Parametri per i test case 1D1 e 1D2.

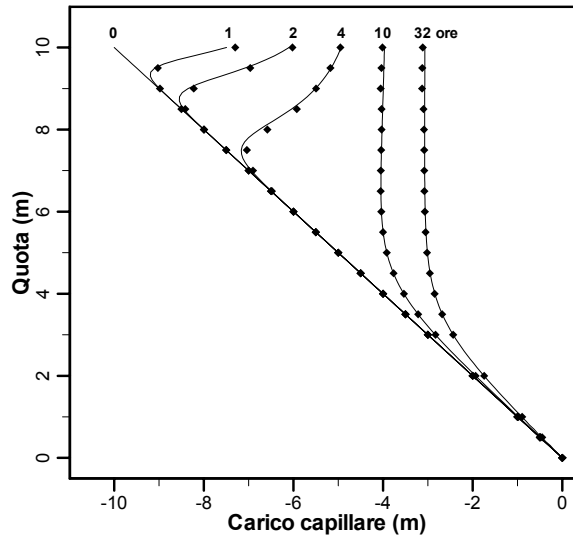
Test case 1D1					
Tempo, h	1	2	4	10	32
$\varepsilon_1$ , m	0.0144	0.0189	0.0270	0.0122	0.0155
$\varepsilon_2$ , m <sup>2</sup>	0.2240	0.1934	0.3361	0.0498	0.0561
Test case 1D2					
Tempo, h	1	3	12	24	45
$\varepsilon_1$ , m	0.0212	0.0276	0.0128	0.0113	0.0161
$\varepsilon_2$ , m <sup>2</sup>	0.3596	0.5000	0.0413	0.0202	0.0417

**Tabella 2.** Norma dell'errore al primo e al secondo ordine per i test case 1D1 e 1D2.

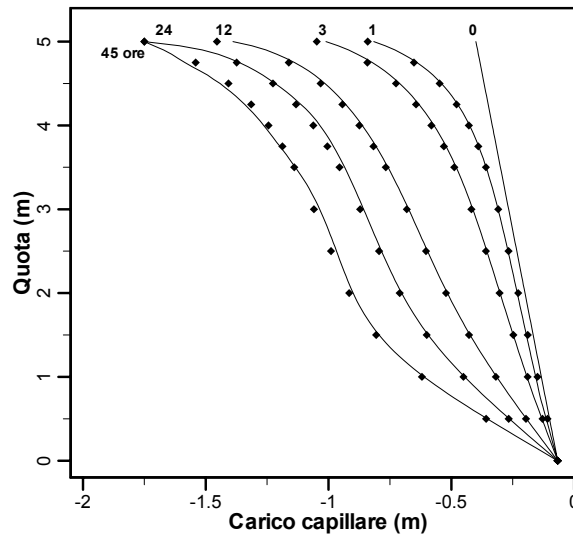
Il test case 1D2 consiste nella simulazione dell'evaporazione da un suolo inizialmente umido con una condizione al contorno inferiore data da un livello di falda costante. La condizione al contorno superficiale è data da un flusso darciano costante, finché il carico capillare non raggiunge il suo valore "air dry"  $\psi_{min}$ , oltre il quale la condizione al contorno diventa a carico costante. Sempre le tabelle 1 e 2 contengono rispettivamente le informazioni riguardanti i parametri del problema ed i valori della norma dell'errore al primo e al secondo ordine, mentre in figura 4 i risultati della simulazione sono confrontati con le corrispondenti soluzioni numeriche di riferimento. Le simulazioni concordano in generale in maniera soddisfacente, anche se piccole differenze si osservano in prossimità dello strato superficiale del suolo.

#### 4.2 Test case bi e tridimensionali

Il test case bidimensionale è basato in parte sulle proprietà tessiturali, strutturali ed idrauliche del suolo del Jornada Test Site presso Las Cruces, New Mexico, descritte da Smith *et al.* (1989). Il test considera la fase transitoria di un moto d'infiltrazione bidimensionale in un suolo eterogeneo estremamente arido.



**Figura 3.** Confronto tra i risultati della simulazione (linea continua) e le soluzioni numeriche di riferimento (punti) per il test case 1D1.



**Figura 4.** Confronto tra i risultati della simulazione (linea continua) e le soluzioni numeriche di riferimento (punti) per il test case 1D2.

In particolare, l'area del test comprende tre strati di suolo che variano nel tipo e nelle proprietà idrauliche. All'interno dello strato più basso di suolo è contenuta una piccola zona molto permeabile. Il dominio, schematizzato in figura 5, si estende per circa 8.00 m orizzontalmente e per 6.50 m verticalmente. L'esperimento è stato riprodotto numericamente da *Magnuson et al.* (1990) utilizzando i codici di calcolo FLASH (FEM) e PORFLOW (FDM), pertanto i risultati forniti da tali codici sono stati assunti come soluzioni numeriche di riferimento per il confronto con il modello AC proposto. Per ciò che concerne le condizioni iniziali, il carico piezometrico nel suolo è uniforme ed uguale a  $-7.34$  m, corrispondenti ad un grado di saturazione variabile da 0.31 nello strato superiore a 0.37 nello strato inferiore. Le condizioni al contorno sono date da una zona d'infiltrazione pari a  $0.02 \text{ m d}^{-1}$  che si estende su un'area di lunghezza

pari a 2.25 m a partire dal bordo sinistro del dominio. Il restante contorno è caratterizzato da condizioni di assenza di flusso. Le proprietà del suolo sono basate, infine, sulla formulazione di *van Genuchten* (1978) secondo il modello di *Mualem* (1976).

La tabella 3 fornisce i valori dei parametri che descrivono le proprietà idrauliche delle quattro tipologie di suolo. L'AC che simula l'evoluzione dell'umidità del suolo è composto da celle quadrate, di lato pari a 0.05 m. Il passo temporale utilizzato nella simulazione varia nel tempo da un valore massimo pari a 100 s fino ad un minimo di circa 28 s, secondo i limiti posti dal seguente criterio di convergenza (*Mendicino et al.*, 2006):

$$\Delta t \leq \frac{l^2 C_c}{4K_c} \quad (18)$$

Zona	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$ (m <sup>-1</sup> )	$n$	$K_s$ (m d <sup>-1</sup> )
1	0.368	0.1020	3.34	1.982	7.909
2	0.351	0.0985	3.63	1.632	4.699
3	0.325	0.0859	3.45	1.573	4.150
4	0.325	0.0859	3.45	1.573	41.50

**Tabella 3.** Caratteristiche idrauliche per le quattro tipologie di suolo utilizzate nel test case.

In figura 6 è mostrata la distribuzione del grado di saturazione nel plot in analisi ottenuta utilizzando il modello AC dopo 30 giorni dall'inizio della simulazione, confrontata con i risultati forniti dai codici FLASH e PORFLOW. Il periodo di tempo pari a 30 giorni è sufficiente per raggiungere condizioni confrontabili con quelle stazionarie. L'effetto della zona ad alta saturazione è chiaramente visibile, poiché la curva indicante il grado di saturazione è fortemente influenzata da essa. I tre set di dati concordano in maniera soddisfacente, sia dal punto di vista qualitativo che quantitativo. In particolare, i risultati ottenuti dal modello AC concordano in misura maggiore con quelli di PORFLOW, mentre l'output del codice FLASH mostra delle lievi differenze (maggiore estensione orizzontale della curva indicante il grado di saturazione 0.4 e minore avanzamento lungo la verticale).

Al fine di mostrare i benefici forniti dal modello AC nel risolvere problemi tridimensionali con condizioni iniziali ed al contorno non omogenee, il test case bidimensionale considerato in precedenza è stato ipotizzato come una sezione di un plot tridimensionale, con una profondità pari a  $z$  m, con  $z$  variabile. Le condizioni iniziali ed al contorno non sono state modificate rispetto al caso bidimensionale, tranne che per la zona d'infiltrazione che, pur estendendosi come in precedenza su un'area di lunghezza pari a 2.25 m a partire dal bordo sinistro del dominio, è stata ipotizzata con una profondità di 0.50 m in avanti e 0.50 m indietro rispetto al valore centrale nella terza dimensione.

In particolare, la figura 7 mostra sul plot in analisi la variazione spaziale del grado di saturazione rispetto alla condizione iniziale dopo un periodo di 30 giorni, per una profondità  $z$  pari a circa 2.50 m. La stessa figura evidenzia, infine, la variazione della distribuzione del contenuto idrico al variare degli strati di suolo, insieme alla maggiore variazione del contenuto idrico nella zona ad alta saturazione.

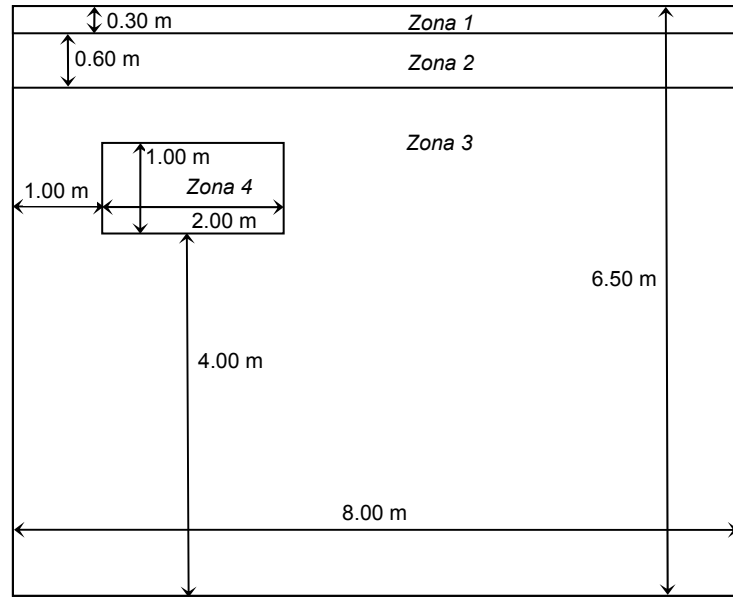
## 5 SCALABILITÀ COMPUTAZIONALE

Il test case tridimensionale è stato utilizzato ulteriormente per stabilire, attraverso un'analisi di scalabilità del sistema, il numero di processori ottimali richiesto dall'ambiente di calcolo parallelo in relazione al numero di celle che compongono l'automa, variando la profondità  $z$  (e quindi il numero di celle) del plot.

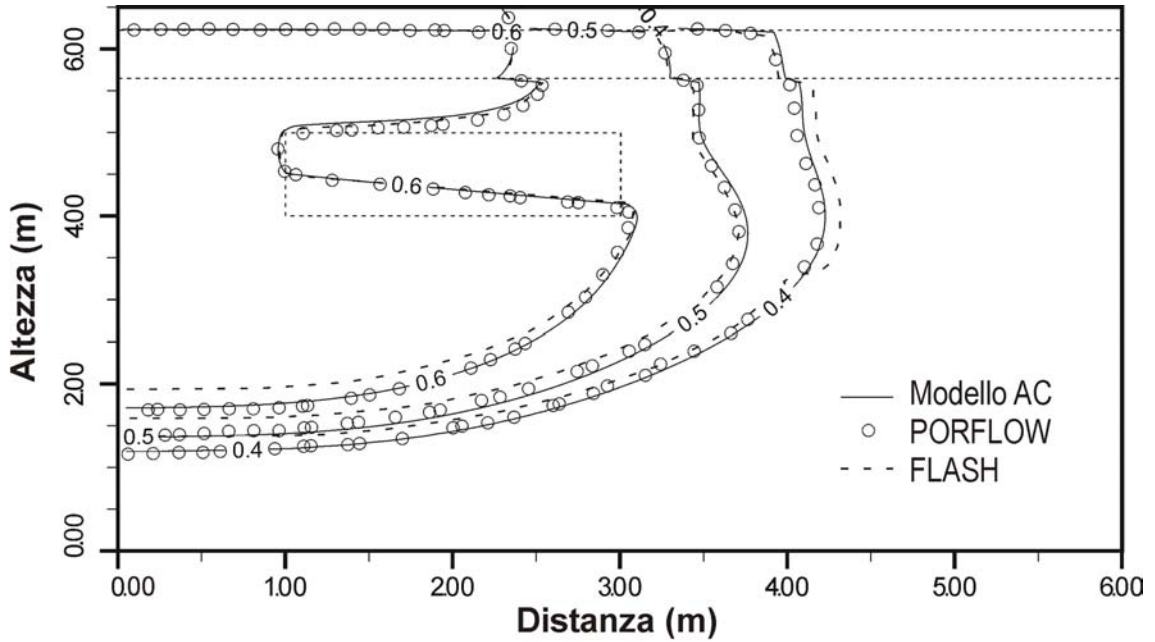
La scalabilità computazionale dell'intero sistema risulta tanto maggiore quanto più grande è il dominio di analisi, poiché più piccoli risultano essere in proporzione i sovraccarichi (overhead) dovuti alle comunicazioni remote. La risoluzione della struttura degli automi può pertanto essere ottimizzata rispetto all'esigenza di rendere efficiente il calcolo parallelo, o viceversa la dimensione del problema in analisi può essere indicativa del numero di nodi della macchina parallela da utilizzare.

Due parametri sono solitamente utilizzati per testare la scalabilità computazionale di un sistema: lo speedup e l'efficienza. Lo speedup di un algoritmo parallelo è il rapporto fra il tempo ottenuto dal miglior algoritmo sequenziale  $T_s$  e quello impiegato dall'algoritmo parallelo fatto girare su  $p$  processori  $T_p$ :

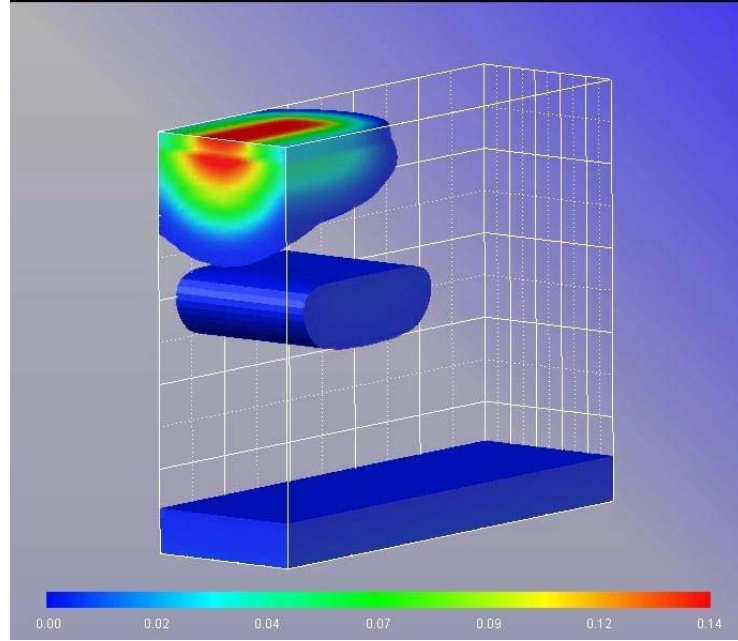
$$S = T_s / T_p \quad (19)$$



**Figura 5.** Schematizzazione del plot bidimensionale.



**Figura 6.** Distribuzione del grado di saturazione nel plot in analisi ottenuta dal modello AC dopo 30 giorni dall'inizio della simulazione, confrontata con i risultati ottenuti dai codici PORFLOW e FLASH.



**Figura 7.** Variazione del grado di saturazione rispetto alla condizione iniziale nel plot in analisi dopo 30 giorni, con la profondità  $z$  posta pari a 2.50 m. Per una migliore comprensione del grafico tridimensionale i valori del grado di saturazione visualizzati sono solo quelli maggiori o uguali a 0.0001.

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

L'efficienza  $E$  è data invece dal rapporto fra lo speedup  $S$  e il numero di processori  $p$ :

$$E = S/p \quad (20)$$

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

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

Per testare la scalabilità del sistema proposto è stato utilizzato un cluster parallelo con 16 nodi bi-processori Pentium 1.133 Ghz, 2 GigaBytes di memoria Ram e sistema operativo Linux. Il modello AC è stato implementato utilizzando l'ambiente di simulazione ad automi cellulari CAMELOT (*Dattilo & Spezzano, 2003*) ed eseguito con differenti dimensioni dell'automa (profondità  $z$  del plot pari a 3.2, 6.4 e 25.6 m, per un numero di celle componenti l'automa pari rispettivamente a 1.356.000, 3.072.000 e 12.288.000) e con differente numero di processori (1, 2, 4, 8, 16, 32).

In figura 8 è rappresentato lo speedup in rapporto al numero di processori utilizzati: da esso si evince che le dimensioni maggiori considerate dell'automa sono sufficienti per raggiungere una scalabilità molto vicina a quella ideale fino a 32 processori.

Analizzando l'efficienza della simulazione si nota che con una grana piccola dell'automa (1.356.000 celle) si ottiene un valore non superiore al 70% utilizzando 8 processori, e quindi non è significativo l'utilizzo di un numero maggiore di processori. Ciò è dovuto al tempo necessario per il calcolo che, se

suddiviso tra 16 o addirittura 32 processori, non riesce a bilanciare il tempo utilizzato per le comunicazioni tra gli stessi processori. Per la configurazione intermedia, invece, valori di efficienza prossimi al 70% si hanno fino a 16 processori, mentre per la configurazione più densa si raggiungono valori di efficienza che giustificano l'utilizzo anche di 32 processori (82% circa).

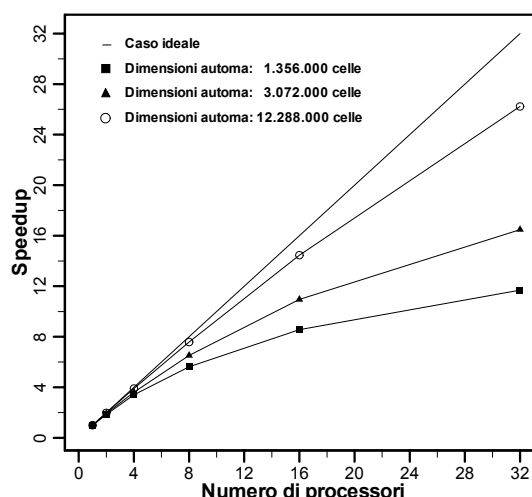


Figura 8. Speedup ottenuti utilizzando il modello AC per differenti dimensioni dell'automa e speedup ideale lineare.

## CONCLUSIONI

Il problema della modellazione tridimensionale dei flussi idrici nel suolo è stato affrontato attraverso un approccio discreto basato sull'estensione ai sistemi macroscopici dell'originale paradigma computazionale degli automi cellulari. Il modello proposto si differenzia da altri approcci simili poiché utilizza per le interazioni tra gli automi delle leggi locali dal chiaro significato fisico. Inoltre, la struttura del sistema AC è trattata secondo modalità che ne accrescono le capacità computazionali, sia in termini di ambiente di lavoro che di numero ottimale di processori disponibili per il calcolo parallelo.

Il modello è stato validato considerando "classici" schemi multidimensionali riportati in letteratura. In ogni caso le simulazioni eseguite hanno mostrato risultati simili alle soluzioni di riferimento, con norme dell'errore al primo ed al secondo ordine mai superiori rispettivamente a 0.028 m e 0.5 m<sup>2</sup>. Tali valori si riferiscono al test case 1D2, in cui le equazioni caratteristiche sono soggette a parametri (in particolare il parametro  $n$ , tabella 1) che amplificano la non linearità del fenomeno. Queste non linearità possono essere compensate attraverso l'uso di automi di dimensioni più piccole che evolvono con flussi di massa minori che meglio approssimano la condizione di non linearità.

Nel test case tridimensionale si sono osservati, inoltre, i benefici derivanti dall'uso del modello proposto in un ambiente di calcolo parallelo (scalabilità computazionale), e si è verificato come lo stesso modello sia molto efficiente per simulazioni numeriche di fenomeni naturali complessi che si sviluppano su domini spaziali molto grandi caratterizzati da elevati livelli di risoluzione spazio-temporale.

Infine, pur se non esplicitamente mostrato nel presente lavoro, la struttura AC utilizzata dal modello proposto bene si presta a funzionamenti di tipo asincrono, finalizzati cioè alla riduzione del numero di scambi di massa tra i singoli automi quando le quantità locali coinvolte nel bilancio risultano esigue. Tale aspetto, che riduce considerevolmente i carichi computazionali del modello, necessita di ulteriori approfondimenti che costituiranno le direzioni future di sviluppo di una siffatta modellazione basata sull'uso esteso degli automi cellulari.

## BIBLIOGRAFIA

M.V. Avolio, G.M. Crisci, D. D'Ambrosio, S. Di Gregorio, G. Iovine, R. Rongo, W. Spataro, "An extended notion of

- Cellular Automata for surface flows modelling*", WSEAS Transactions on Computers, 2, (2003), pp. 1080-1085.
- J. Bear, "*Dynamics of fluid in porous media*", American Elsevier, New York, (1972).
- B. Chopard, M. Droz, "*Cellular automata modeling of physical systems*", Cambridge University Press, (1998).
- B. Chopard, P.O. Luthi, "*Lattice Boltzmann computations and application to physics*", Theoretical Computer Science, (1999), Vol.217, pp. 115-130.
- J.P. Crutchfield, M. Mitchell, R. Das, "*The evolutionary design of collective computation in cellular automata*", in J.P. Crutchfield, and P.K. Schuster, editors, *Evolutionary Dynamics-Exploring the Interplay of Selection, Neutrality, Accident, and Function*, Oxford University Press, New York, (2002).
- G. Dattilo, G. Spezzano, "*Simulation of a cellular landslide model with CAMELOT on high performance computers*", Parallel Computing, North Holland, (2003), 29(10), pp. 1403-1418.
- S. Di Gregorio, R. Serra, "*An empirical method for modelling and simulating some complex macroscopic phenomena by cellular automata*", Future Generation Computer System, (1999), Vol.16, pp. 259-271.
- S. Di Gregorio, R. Serra, M. Villani, "*Applying cellular automata to complex environmental problems: the simulation of the bioremediation of contaminated soils*", Theor. Comp. Science, (1999), 217, pp. 131-156.
- G. Folino, G. Spezzano, "*Scalability analysis and performance prediction for cellular programs on parallel computers*", Proc. of the Fourth International Conference on Cellular Automata for Research and Industry ACRI 2000, Springer, Karlsruhe, Germany, (2000), pp. 37-46.
- U. Frish, B. Hasslacher, Y. Pomeau "*Lattice gas automata for the Navier-Stokes equation*", Physical Review Letters, (1986), 56(14), pp. 1505-1508.
- S.O. Magnuson, R.G. Baca, A.J. Sondrup, "*Independent Verification and Benchmark Testing of the PORFLO-3 Computer Code, Version 1.0*", EGG-BG-9175, Idaho National Engineering Laboratory, Idaho Falls, ID, (1990).
- G. Manzini, E. Ferraris, "*Mass-conservative finite volume methods on 2-D unstructured grids for the Richards equation*", Advances in Water Resources, (2004), 27, pp. 1199-1215.
- C. Mattiussi, "*An analysis of Finite Volume, Finite Element, and Finite Difference Methods using some concepts for algebraic topology*", Journal of Computational Physics, (1997), 133, pp. 289-309.
- G.R. McNamara, G. Zanetti, "*Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata*". Physical Review Letters, (1988), 61, pp. 2332-2335.
- G. Mendicino, A. Senatore, G. Spezzano, S. Straface, "*Three-dimensional unsaturated flow modeling using cellular automata*", submitted to Water Resources Research, (2006).
- A.R. Mitchell, D.F. Griffiths, "*The finite difference method in partial differential equation*", J. Wiley & Sons, Chichester, (1980).
- Y. Mualem, "*A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media*", Water Resources Research (1976), 12(3), pp. 513-522.
- S. Orlandini, "*Two-layer model of near-surface soil drying for time-continuous hydrologic simulations*", J. Hydrol. Engineer., (1999), 4(2), pp. 91-99.
- C. Paniconi, A.A. Aldama, E.F. Wood, "*Numerical evaluation of iterative and noniterative methods for the solution of the nonlinear Richards equation*", Water Resour. Res., (1991), 27(6), pp. 1147-1163.
- D.H. Rothman, S. Zaleski, "*Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics*", Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, (1997).
- J.D. Smyth, S.B. Yabusaki, G.W. Gee, "*Infiltration Evaluation Methodology - Letter Report 3: Selected Tests of Infiltration Using Two-Dimensional Numerical Models*", Pacific Northwest Laboratory, Richland, WA, (1989).
- G. Spezzano, D. Talia, "*Designing parallel models of soil contamination by the Carpet language*", Future Generation Computer Systems, North-Holland, Amsterdam, (1998), 13(4-5), pp. 291-301.
- S. Straface, S. Troisi, V. Gagliardi, "*Application of the Cell Method to the simulation of Unsaturated Flow*", Computers, Materials, & Continua, (2006), in Press.
- S. Succi, R. Benzi, F. Higuera, "*The lattice Boltzmann equation: a new tool for computational fluid dynamics*", Physica, (1991), 47 (D), pp. 219-230.
- T. Toffoli, N. Margolus, "*Cellular Automata Machines*", MIT Press, Cambridge, (1987).
- E. Tonti, "*A discrete formulation of field laws: The cell method*", Computational Methods in Engineering and Science, (2001), 1(1), p. 11.
- M.Th. van Genuchten, "*Calculating the Unsaturated Hydraulic Conductivity With a New Closed-Form Analytic Model*", Report 78-WR-08, Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, Princeton, NJ, (1978).
- M.Th. van Genuchten, D.R. Nielsen, "*On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils*", Ann. Geophys., (1985), 3(5), pp. 615-628.
- J. von Neumann, "*Theory of self-reproducing automata*", (Edited and completed by A. Burks), University of Illinois Press, Urbana, Illinois, (1966).
- S. Wolfram, "*Cellular automaton fluids 1: Basics theory*", Journal of Statistical Physics, (1986), 45(3/4), pp. 471-526.
- S. Wolfram, "*A new kind of Science*", Wolfram Media Inc., Champaign, (2002).