

**MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE FLUJO DE AGUA EN LA  
ZONA NO SATURADA EN DOS DIMENSIONES**

**DAVID ALONSO BARAJAS SOLANO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOMECÁNICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA CIVIL  
BUCARAMANGA**

**2008**

**MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE FLUJO DE AGUA EN LA  
ZONA NO SATURADA EN DOS DIMENSIONES**

**DAVID ALONSO BARAJAS SOLANO**

**TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE  
INGENIERO CIVIL**

**DIRECTOR**

**JORGE ALBERTO GUZMÁN JAIMES, M.Sc.**

**INGENIERO CIVIL**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOMECÁNICAS**

**ESCUELA DE INGENIERÍA CIVIL**

**BUCARAMANGA**

**2008**

A Dios, Mis Padres, Hermanos,  
Universidad y Amigos.

## **AGRADECIMIENTOS**

Al Profesor Jorge Alberto Guzmán Jaimes, por la magnífica oportunidad de trabajar con él en este proyecto, su orientación precisa y su incondicional apoyo.

Al Grupo en Predicción y Modelamiento Hidroclimático, GPH, encabezado por la Dra. Sully Gómez Isidro, por toda la colaboración prestada durante el desarrollo de este proyecto.

Al Grupo de Investigación en Materiales y Estructuras, INME, en especial a los Profesores Gustavo Chio Cho y Esperanza Maldonado Rondón, por facilitar no sólo las instalaciones físicas para realizar este trabajo, sino también un ambiente agradable y productivo.

Al Centro de Investigación en Simulación y Control de Procesos, CYSIC, de la Escuela de Ingeniería Química, y al Profesor Viatcheslav Kafarov, por permitirme utilizar sus recursos de computación para obtener varios de los resultados consignados en este documento.

# CONTENIDO

1.	PRESENTACIÓN DEL PROYECTO .....	21
1.1.	INTRODUCCIÓN .....	21
1.2.	OBJETIVOS.....	22
1.2.1.	Objetivo General .....	22
1.2.2.	Objetivos Específicos.....	22
1.3.	Antecedentes.....	22
2.	MARCO TEÓRICO.....	24
2.1.	ECUACIONES DIFERENCIAS PARCIALES DE SEGUNDO ORDEN .....	24
2.1.1.	Solución numérica de EDPs .....	24
2.1.1.1.	Discretización espacial .....	25
2.1.1.2.	Relaciones entre funciones discretas .....	26
2.1.1.3.	Discretización temporal.....	26
2.1.1.4.	Solución de sistema de ecuaciones lineales .....	27
2.1.1.5.	Métodos de solución numérica del problema de flujo en medio poroso .....	27
2.2.	DINÁMICA DEL AGUA EN EL MEDIO NO SATURADO .....	28
2.2.1.	Ecuación de Richards .....	30
2.2.2.	Condiciones Iniciales y de Frontera.....	34
2.3.	PROPIEDADES HIDRÁULICAS DE LOS SUELOS.....	35
2.3.1.	Modelos analíticos de las propiedades hidráulicas.....	37
2.3.2.	Representación numérica de las propiedades de suelos .....	41
3.	MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS.....	43
3.1.	INTRODUCCIÓN AL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS (MDF).....	43
3.2.	DISCRETIZACIÓN DE LA REGIÓN DE FLUJO .....	46
3.3.	IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS.....	49
3.3.1.	Formulación del método .....	49
3.3.2.	Condiciones de frontera.....	52
3.3.2.1.	Condiciones de Dirichlet .....	53
3.3.2.2.	Condiciones de Neumann.....	54
3.3.3.	Estructura de las matrices de coeficientes .....	59
3.3.4.	Forma basada en la presión de poros de la Ecuación de Richards .....	61
3.4.	INTEGRACIÓN TEMPORAL.....	62
3.4.1.	Esquema 1.....	62
3.4.2.	Esquema 2.....	64
3.4.3.	Esquema 3.....	66

3.5.	ESFUERZO COMPUTACIONAL Y CONVERGENCIA .....	67
4.	MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS .....	74
4.1.	INTRODUCCIÓN AL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (MEF) .....	74
4.2.	EL MÉTODO DE GALERKIN .....	75
4.3.	DISCRETIZACIÓN DE LA REGIÓN DE FLUJO .....	76
1.	Aproximación del dominio .....	77
2.	Malla de elementos finitos .....	77
3.	Aproximación de las condiciones de borde .....	77
4.	Aproximación del espacio $V$ .....	77
4.4.	FUNCIONES DE FORMA.....	79
4.5.	IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS .....	82
4.5.1.	Formulación general .....	82
4.5.2.	Elemento triangular.....	84
4.5.3.	Elemento rectangular.....	86
4.5.4.	Condiciones de frontera.....	88
4.5.4.1.	Condiciones de Neumann.....	88
4.5.4.2.	Condiciones de Dirichlet .....	89
4.5.5.	Estructura de las matrices de coeficientes .....	91
4.5.6.	Forma basada en la presión de la ecuación de Richards.....	93
4.6.	INTEGRACIÓN TEMPORAL .....	94
4.6.1.	Esquema 1.....	95
4.6.2.	Esquema 2.....	95
4.6.3.	Esquema 3.....	97
4.7.	CONCENTRACIÓN ARTIFICIAL DE MASA .....	98
4.7.1.	Esfuerzo computacional y convergencia .....	106
5.	MÉTODO DEL GRADIENTE CONJUGADO.....	112
5.1.	CONCEPTOS BÁSICOS .....	113
5.2.	PRECONDICIONAMIENTO .....	116
5.3.	FACTORIZACIÓN INCOMPLETA DE CHOLESKY .....	116
5.4.	IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DEL GRADIENTE CONJUGADO.....	120
6.	SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL PROBLEMA DE FLUJO EN MEDIOS POROSOS ...	122
6.1.	CONSERVACIÓN DE MASA .....	122
6.1.1.	Índice de balance de masa para el método de elementos finitos .....	123
6.1.2.	Índice de balance de masa para el método de diferencias finitas .....	124
6.1.3.	Comparación entre esquemas de integración temporal .....	125
6.2.	FLUJO EN MEDIO SATURADO.....	131

6.3. EFECTO DE LA DESCRIPCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LOS MATERIALES .....	137
7. RESULTADOS NUMÉRICOS .....	141
8. CONCLUSIONES.....	158
8.1. ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN ESPACIAL .....	158
8.2. ESQUEMAS DE INTEGRACIÓN TEMPORAL.....	159
8.3. ESFUERZO COMPUTACIONAL Y CONVERGENCIA .....	160
8.4. SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES .....	160
8.5. REPRESENTACIÓN NUMÉRICA DE LAS PROPIEDADES DE LOS MATERIALES .....	161
9. RECOMENDACIONES .....	162
BIBLIOGRAFÍA .....	163
ANEXOS .....	166

## LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1.	Ejemplos de parámetros del modelo van-Genutchen Mualem .....	39
Tabla 3.1.	Datos de entrada para la simulación 1. ....	68
Tabla 4.1.	Grupos de datos de entrada para las simulaciones 2A y 2 .....	99
Tabla 7.1.	Datos de entrada para las simulaciones 5 y 6 .....	143
Tabla A.9.1.	Tabla de propiedades de materiales para el 'suelo de prueba'. Resolución $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.50$ .....	166
Tabla A.9.2.	Tabla de propiedades de materiales para el 'suelo de prueba'. Resolución $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.25$ .....	167

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.	Ejemplo de la solución de una ecuación diferencial parcial parabólica bidimensional: (a) Geometría del dominio de simulación $\Omega$ . (b) Solución exacta de $\psi$ en $\Omega$ para el tiempo $t$ .....	25
Figura 2.2.	Proceso de discretización espacial.....	26
Figura 2.3.	Perfil de presión de poros para una columna de suelo en estado estable con nivel freático. ....	29
Figura 2.4.	Flujo a través de un elemento infinitesimal de suelo. Adaptada de De Laet (2001). ....	31
Figura 2.5.	Funciones $\theta(\psi)$ y $\kappa(\psi)$ para el suelo ‘arena Haverkamp’ (Haverkamp et al., 1977) .....	36
Figura 2.6.	Ejemplo de una curva de retención de agua mostrando el efecto de histéresis. Se muestran la curva de secado $\theta^s(\psi)$ y la curva de humedecimiento $\theta^*(\psi)$ . Adaptado de Šimunek et al. (2005).....	37
Figura 2.7.	Curvas de retención de agua para los suelos ‘Limo arcilloso’, ‘Arcilla arenosa’ y ‘Nuevo México – 1ra. capa’ .....	40
Figura 2.8.	Conductividad hidráulica en función de la presión de poros para los suelos ‘Limo arcilloso’, ‘Arcilla arenosa’ y ‘Nuevo México – 1ra. capa’ .....	40
Figura 2.9.	Estructura de la tabla de propiedades de materiales.....	41
Figura 3.1.	Dominio rectangular bidimensional discretizado en diferencias. ....	44
Figura 3.2.	Deducción de las fórmulas de diferencias finitas.....	45
Figura 3.3.	Clasificación de dominios según la forma de su frontera: (a) Dominio regular. (b) Dominio irregular.....	47
Figura 3.4.	Clasificación de los nodos de la discretización en diferencias .....	48
Figura 3.5.	Longitudes y áreas aferentes de los nodos de la grilla de diferencias finitas.....	48
Figura 3.6.	Situación general de un nodo regular interno. ....	50
Figura 3.7.	Situación general de un nodo regular externo .....	55

Figura 3.8.	Clasificación de nodos regulares externos .....	56
Figura 3.9.	La estructura de la matriz global y las conectividades entre nodos de la grilla de diferencias finitas.....	60
Figura 3.10.	Metodología de almacenamiento de la matriz de coeficientes .....	60
Figura 3.11.	Geometría del dominio de simulación para las simulaciones 1, 2A y 2B.....	68
Figura 3.12.	Perfil de presión en la columna central de para la simulación 1, suelo luego de 0.3 horas de infiltración. Método de diferencias finitas.....	69
Figura 3.13.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 1 $\Delta t = 7.5$ s. Método de diferencias finitas. Profundidades en cm .....	69
Figura 3.14.	Número de iteraciones como función del nivel temporal para la Simulación 1, usando el método de diferencias finitas. $\Delta z = 1.5$ cm. 20 primeros niveles temporales. ....	71
Figura 3.15.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 2A. $\Delta t = 7.5$ s.....	71
Figura 3.16.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 2A. $\Delta t = 15$ s.....	72
Figura 3.17.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 2A. $\Delta t = 30$ s.....	72
Figura 3.18.	Número de iteraciones como función del nivel temporal para la Simulación 1, usando el método de diferencias finitas. $\Delta z = 0.75$ cm. 20 primeros niveles temporales .....	73
Figura 4.1.	Aproximación del dominio.....	78
Figura 4.2.	Partición del dominio en elementos finitos.....	78
Figura 4.3.	Frontera propia y área aferente de nodos de la malla de elementos finitos.....	79
Figura 4.4.	Funciones de forma para el caso bidimensional.....	80

Figura 4.5.	Funciones de coordenadas como fórmula de interpolación .....	81
Figura 4.6.	Funciones de coordenadas como la combinación de funciones de coordenadas elementales.....	81
Figura 4.7.	Elemento triangular.....	85
Figura 4.8.	Elemento rectangular.....	87
Figura 4.9.	La estructura de las matrices globales y las conectividades entre nudos de la malla de elementos finitos.....	92
Figura 4.10.	Metodología de almacenamiento de las matrices globales de conductancia y capacitancia .....	92
Figura 4.11.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2A.....	100
Figura 4.12.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2B.....	100
Figura 4.13.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2B. $\Delta t = 1.2$ min .....	101
Figura 4.14.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2A, usando matrices de masa consistentes. $\Delta t = 7.5$ s. Profundidades en cm .....	102
Figura 4.15.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2B, usando matrices de masa consistentes. $\Delta t = 1.2$ min. Profundidades en cm .....	102
Figura 4.16.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A. $\Delta x_s = 1.5$ cm .....	104
Figura 4.17.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2B. $\Delta x_s = 2.5$ cm .....	104
Figura 4.18.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2A, usando matrices de masa concentradas. $\Delta t = 7.5$ s. Profundidades en cm .....	105

Figura 4.19.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2B, usando matrices de masa concentradas. $\Delta t = 1.2$ min. Profundidades en cm .....	105
Figura 4.20.	Número de iteraciones como función del nivel temporal y la estructura de las matrices de masa. Grupos de datos 2A. $\Delta t = 7.5$ s. 10 primeros niveles temporales .....	107
Figura 4.21.	Número de iteraciones como función del nivel temporal y la estructura de las matrices de masa. Grupos de datos 2B. $\Delta t = 1.2$ min. 50 primeros niveles temporales .....	107
Figura 4.22.	Variación de la presión de poros en la superficie del dominio de flujo en función del tiempo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A.....	109
Figura 4.23.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A. $\Delta t = 7.5$ s .....	109
Figura 4.24.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A. $\Delta t = 30$ s .....	110
Figura 4.25.	Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A. $\Delta t = 120$ s .....	110
Figura 5.1.	Aplicación del método del gradiente conjugado a un problema bidimensional .....	120
Figura 6.1.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2A. $\Delta t = 7.5$ s .....	127
Figura 6.2.	Variación del Índice de Balance de masa como función de $\Delta t$ , para los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2A.....	127
Figura 6.3.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B. $\Delta t = 0.6$ min .....	128
Figura 6.4.	Variación del Índice de Balance de masa como función de $\Delta t$ , para los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B.....	128

Figura 6.5.	Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando el esquema 1 y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B. $\Delta x_3=1.25$ cm. Índice de Balance de Masa, BM = 0.8668.....	129
Figura 6.6.	Variación del Índice de Balance de masa como función de $\Delta t$ , para el esquema 2 de integración temporal, usando elementos finitos y diferencias finitas. Grupo de datos 2B .....	130
Figura 6.7.	Flujo a través de la frontera superior del dominio. Grupo de datos B. $\Delta t = 1.2$ min .....	130
Figura 6.8.	Geometría del dominio de flujo para la simulación 3 .....	132
Figura 6.9.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. $\Delta t = 120$ s. Profundidades en cm .....	134
Figura 6.10.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. $\Delta t = 60$ s. Profundidades en cm .....	134
Figura 6.11.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de elementos finitos. $\Delta t = 120$ s. Profundidades en cm .....	135
Figura 6.12.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de elementos finitos. $\Delta t = 60$ s. Profundidades en cm .....	135
Figura 6.13.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de diferencias finitas. $\Delta t = 120$ s. Profundidades en cm.....	136
Figura 6.14.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de diferencias finitas. $\Delta t = 120$ s. Profundidades en cm.....	136
Figura 6.15.	Geometría del dominio de flujo para la simulación 4 .....	137
Figura 6.16.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de elementos finitos. $\Delta t = 10$ s. Profundidades en cm .....	139

Figura 6.17.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de diferencias finitas. $\Delta t = 10$ s. Profundidades en cm .....	139
Figura 6.18.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 2 de propiedades de materiales y el método de elementos finitos. $\Delta t = 10$ s. Profundidades en cm .....	140
Figura 6.19.	Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de diferencias finitas. $\Delta t = 10$ s. Profundidades en cm .....	140
Figura 7.1.	Geometría del dominio de flujo para las simulaciones 5 y 6.....	142
Figura 7.2.	Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Método de elementos finitos.....	144
Figura 7.3.	Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Método de diferencias finitas .....	145
Figura 7.4.	Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Figuras (a) y (c): Resultados publicados en Bouloutas (1989). Figuras (b) y (d): Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos.....	146
Figura 7.5.	Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Figuras (a) y (c): Resultados publicados en Bouloutas (1989). Figuras (b) y (d): Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos.....	147
Figura 7.6.	Variación de la presión de poros para la Simulación 6. Método de diferencias finitas .....	148
Figura 7.7.	Geometría del dominio de flujo para la Simulación 7 (adaptado de Avellaneda (2003)).....	149
Figura 7.8.	Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Método de elementos finitos .....	150
Figura 7.9.	Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Método de diferencias finitas .....	151
Figura 7.10.	Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Resultados publicados en Avellaneda (2003).....	152
Figura 7.11.	Geometría del dominio de flujo para (a) la Simulación 8, y (b) la Simulación 9 .....	153

Figura 7.12.	Variación de la presión de poroso para la Simulación 8.....	154
Figura 7.13.	Variación de la presión de poros para la Simulación 9.....	155
Figura 7.14.	Simulación 10: Flujo permanente bajo una presa. Los niveles de agua son de 10 m aguas arriba y 1 m aguas abajo (adaptado de Avellaneda (2003)).....	156
Figura 7.15.	Variación del potencial de agua para la Simulación 10. (a) Malla de elementos finitos utilizada para la simulación. (b) Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos. (c) Resultados publicados en Avellaneda (2003).....	157

## LISTA DE ALGORITMOS

Algoritmo 3.1.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 1 .....	64
Algoritmo 3.2.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 2 .....	66
Algoritmo 3.3.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 3 .....	67
Algoritmo 4.1.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 1 .....	96
Algoritmo 4.2.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 2 .....	97
Algoritmo 4.3.	Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 3 .....	98
Algoritmo 5.1.	Método del gradiente conjugado.....	115
Algoritmo 5.2.	Método del gradiente conjugado precondicionado .....	117
Algoritmo 5.3.	Factorización incompleta de Cholesky sin relleno .....	119
Algoritmo A.9.1.	Cálculo de los coeficientes del spline cúbico de interpolación .....	170

## **LISTA DE ANEXOS**

ANEXO A: Ejemplos de tablas de propiedades de materiales	166
ANEXO B: Interpolación mediante splines cúbicos	168

## RESUMEN

TÍTULO: MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE FLUJO DE AGUA EN LA ZONA NO SATURADA EN DOS DIMENSIONES\*

AUTOR: DAVID ALONSO BARAJAS SOLANO\*\*

PALABRAS CLAVE:

Ecuación de Richards, Simulación Numérica, Zona no saturada, Dos dimensiones, Gradiente conjugado.

RESUMEN:

En el presente trabajo se estudia el modelo matemático del flujo de agua en medios porosos, conocido como Ecuación de Richards, y se plantean varios esquemas de solución numérica para éste, usando los métodos de elementos finitos y diferencias finitas para la discretización espacial, y el método de diferencias finitas para la discretización temporal. Para evaluar la utilidad de los esquemas de solución propuestos, se ha evaluado el comportamiento de cada uno de ellos en función de la validez física de sus resultados, y a partir de esto se ha elaborado un esquema único que pueda utilizarse para aproximar una solución para los casos estudiados. El estado de flujo arrojado por el esquema de solución definitivo se comparó con resultados de otros simuladores numéricos encontrados en la literatura especializada, obteniendo concordancia satisfactoria.

La solución de los sistemas de ecuaciones lineales asociados se realizó utilizando el método del gradiente conjugado preconditionado (PCG), usando la factorización incompleta de Cholesky (IC) de la matriz de coeficientes como preconditionador. Se utilizaron las ventajas propias de la aplicación de los métodos de diferencias finitas y elementos finitos al problema de flujo en medio poroso, para construir un sistema de almacenamiento de matrices grandes que facilita el proceso mediante PCG.

Para efectos del proceso de simulación, se elaboró un conjunto de funciones para el ambiente numérico MATLAB (Versión 7.4 – R2007b), denominado SIMFLUX v0.1, que permite al usuario obtener soluciones numéricas del problema de flujo estudiado.

---

\* Proyecto de Grado

\*\* Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas, Escuela de Ingeniería Civil. Director: Jorge Alberto

## ABSTRACT

TITLE: MODELING AND SIMULATION OF WATER FLOW IN THE UNSATURATED ZONE IN TWO DIMENSIONS \*

AUTHOR: DAVID ALONSO BARAJAS SOLANO\*\*

KEYWORDS:

Richards Equation, Numerical Simulation, Unsaturated zone, Two dimensions, Conjugate gradient.

ABSTRACT:

This work studies the mathematical model of water flow in porous media, known as Richards equation, and poses various numerical solution schemes, using the finite element method and finite difference method for spatial discretization, and the finite difference method for temporal discretization. In order to evaluate the applicability of the proposed solution schemes, the behavior of each one of these has been evaluated in terms of the physical validity of the results obtained. Based on this discussion, a single scheme able to approximate a solution for the studied cases has been proposed. The state of flow obtained by the definitive schema has been compared with results by other numerical simulators consigned in the specialized literature, for a satisfactory agreement between those.

The solution of the linear equations systems associated was done using the conjugate gradient method (PCG) with Incomplete Cholesky factorization (IC) of the coefficient matrix as preconditioner. The particular advantages of the application of the finite differences and finite element methods to the solution of the porous media flow problem where exploited in order to develop a large-matrix storing methodology which facilitates the process using PCG.

For the sake of the simulation process, a toolbox of functions for the MATLAB numerical environment (Version 7.4 – R2007b), which allows potential users to obtain numerical solutions to the studied flow problem. was built.

---

\* Degree Work

\*\* Physical-Mechanical Engineering Faculty, Department of Civil Engineering. Director: Jorge Alberto Guzmán Jaimes.

# 1. PRESENTACIÓN DEL PROYECTO

## 1.1. INTRODUCCIÓN

El agua se encuentra almacenada en nuestro planeta de diferentes maneras, entre ellas, los grandes cuerpos superficiales (e.g., mares, océanos, ríos, el hielo polar etc.) y los depósitos subsuperficiales. Un pequeño porcentaje de esta agua se encuentra fijado entre la superficie y la zona saturada en forma de humedad del suelo, pero aunque reducido, juega un papel importante en el ciclo del agua, la recarga de acuíferos, el intercambio de energía entre la superficie de la tierra y la atmósfera, y la estabilidad de las masas de suelo y roca, entre otras cosas (De Laat, 2001). La importancia práctica de esta forma de agua para el hombre salta a la vista con facilidad: Los hechos anteriores indican que el comportamiento del agua en la zona no saturada afecta un amplio espectro de actividades humanas, desde la agricultura hasta la geotecnia, cada una de ellas básicas para la subsistencia del hombre y el desarrollo de su vida en comunidad. En virtud de esta realidad, muchos ingenieros y científicos han dedicado su vida y sus estudios a la investigación y comprensión de la mecánica que gobierna el comportamiento de la humedad del suelo.

Los modelos matemáticos –modelos abstractos que usan el lenguaje matemático para describir un sistema real- son generalmente el punto de partida de las investigaciones en muchas ramas de la ciencia y la ingeniería, y el caso del estudio de la humedad del suelo no es la excepción. El modelo matemático del comportamiento del agua en la zona no saturada es la Ecuación de Richards, la cual resulta de la aplicación del principio de conservación de la masa, y la ley de Darcy a un elemento infinitesimal de suelo; Lastimosamente, esta ecuación posee características que hacen que sea difícil obtener de ella una solución analítica sencilla y general, por lo que, deseando poder hacer predicciones a partir de ella, muy buena parte de los esfuerzos de la comunidad científica se han volcado a abordar este problema desde el punto de vista numérico.

Es en este contexto del análisis numérico de la ecuación de Richards donde se ubica el presente proyecto de grado, el cual busca construir un modelo de solución del flujo de humedad en la zona no saturada, sometido a ciertas restricciones, y analizar el comportamiento de sus resultados. Nuestro país cuenta con grandes y ricos recursos hídricos subsuperficiales, que pueden ser explotados para el beneficio de la población nacional sólo en la medida en que se estudien y comprendan los fenómenos relacionados a ellos. Este trabajo tiene, por tanto, la aspiración de unirse a la obra de otros científicos en el orden nacional, para sentar las bases de la investigación de la dinámica de la humedad del suelo en Colombia, a partir de la cual se pueda realizar una administración efectiva y responsable de estos recursos.

## **1.2. OBJETIVOS**

### **1.2.1. Objetivo General**

- Desarrollar un modelo de simulación del flujo de humedad de suelo en la zona no saturada en dos dimensiones a partir de una solución numérica de la Ecuación de Richards en el plano, que pueda aplicarse a perfiles compuestos por capas de suelo de diferentes propiedades.

### **1.2.2. Objetivos Específicos**

- Plantear e implementar una solución numérica válida de la Ecuación de Richards en dos dimensiones.
- Comparar los resultados obtenidos con el modelo desarrollado contra resultados experimentales realizados por otros investigadores, y arrojados por otros modelos cuya validez ya ha sido establecida.
- Desarrollar un conjunto de herramientas computacionales que facilite al usuario el ingreso de datos de entrada de una simulación y arroje los resultados de una manera organizada y fácil de comprender.

## **1.3. Antecedentes**

Las fundaciones físicas del estudio del movimiento del agua en la zona no saturada fueron colocadas desde Leonardo da Vinci con su observación del fenómeno de ascenso capilar, la introducción de la idea de fuerza gravitacional por parte de Isaac Newton, y el concepto de capilaridad, inicialmente propuesto por Johann Andreas von Segner, y más adelante desarrollado por Thomas Young y Pierre Simon Laplace. Otros desarrollos científicos no directamente relacionados con la mecánica de suelos contribuyeron de manera importante a construir las bases físicas y matemáticas; entre ellos, la teoría del flujo de calor debido a un gradiente de temperatura introducida por Jean Baptiste Joseph Fourier, y la subsecuente formulación de la muy conocida ecuación que lleva su nombre (Rolston, 2007).

El primer avance significativo en la construcción de la teoría del movimiento de agua en medios porosos es el estudio de Darcy publicado en 1856, el cual establece que el flujo de agua es directamente proporcional al gradiente hidráulico y a una constante de proporcionalidad llamada 'conductividad hidráulica'. La formulación de lo que se conoce como Ley de Darcy, fue realizado en Alemania por Von Weitschkowsky en 1884, probablemente de manera independiente (Kutilek y Novak, 1997). También, sin conocer los estudios de Darcy (Sposito, 1986), Buckingham presentó en 1907 su propia ecuación, en la cual reconoció que el flujo de agua en un medio no saturado está fuertemente condicionado por contenido de humedad. Más adelante, en 1927, Israelson cerró el círculo al observar la equivalencia entre las ecuaciones de Darcy y Buckingham (De Laat, 2001).

El salto cualitativo que trae todos estos aportes de hace más de 80 años a la actualidad, lo realizó Lorenzo Adolph Richards, quien en 1931 aplicó la ecuación de continuidad a la Ley de Buckingham-Darcy para obtener una ecuación diferencial parcial. Es a partir de esta expresión que varios ingenieros y científicos han trabajado durante los últimos 70 años para modelar y predecir el comportamiento del agua en medios porosos no saturados.

Una primera aproximación al problema planteado por la ecuación de Richards es la solución analítica. Si se especifican modelos analíticos que describan las propiedades de los suelos, es posible encontrar soluciones analíticas para la infiltración, algunas aproximadas como las de Broadbridge y White (1988) y Salvucci (1993), o exactas, como las de Basha (1999; 2002), o Zhu y Mohanty (2002), pero todas basadas en grandes simplificaciones hechas a la descripción del suelo y restricciones a las condiciones de aplicación.

En vista de las limitaciones que presentan las soluciones analíticas, a lo largo de las décadas pasadas se han desarrollado varias rutinas numéricas que hacen uso de diferentes esquemas numéricos: el método de diferencias finitas (Celia, Bouloutas y Zarba, 1990; Ross, 1990), el método de elementos finitos (Zienkiewicz y Pareck, 1970; Neuman, 1973; Šimunek, van Genutchen y Šejna, 2005) y el método del elemento borde (Brebbia y Walter, 1980). La aplicación de cualquiera de estos métodos supera la mayoría de los problemas presentados por las soluciones analíticas, pero consumen una cantidad significativa de tiempo y recursos de cálculo a medida que se aumenta la escala y periodo de simulación, o se presentan cambios abruptos en las condiciones de humedad. Vale notar además que la descripción matemática de ciertos tipos de suelos, como algunos suelos granulares, puede provocar serios errores de convergencia e inestabilidades numéricas al ser utilizada junto con alguno de estos métodos para simular el comportamiento del flujo a través de este tipo de suelos.

En la actualidad existe software para uso comercial como HYDRUS 2D/3D, GeoStudio SEEP/W 2004 y GEO-SLOPE SEEP3D que permite solucionar problemas de flujo e infiltración para dominios de simulación bidimensionales y tridimensionales, diferentes configuraciones de suelo y condiciones de borde. Todos estos programas se facilitan en versiones altamente limitadas para fines académicos y se encuentran a la venta para uso comercial con precios bastante altos en comparación a la mayoría del software para uso de oficina.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1. ECUACIONES DIFERENCIAS PARCIALES DE SEGUNDO ORDEN

En la mecánica de medios continuos, se asume que los materiales satisfacen la hipótesis del continuo, esto es, un cuerpo de cierto material se puede subdividir en elementos infinitesimalmente pequeños, los cuales mantienen las propiedades del cuerpo original. Bajo esta suposición, es posible escribir las leyes físicas que rigen el fenómeno en cuestión usando el lenguaje del cálculo diferencial, lo que permite obtener un conjunto de ecuaciones a partir del cual se puede predecir el comportamiento del medio y sus cantidades asociadas (Peral, 1995; Carnahan, Luther y Wilkes, 1969).

Las ecuaciones que se derivan de practicar un análisis como el anterior a cierto problema físico, son generalmente del tipo diferencial parcial, y en muchos casos particulares, de segundo orden. Las ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) de segundo orden así obtenidas generalmente se pueden clasificar en tres tipos, cada uno de los cuales tiene un significado físico asociado (Šolin, 2006):

- Elípticas: Una EDP Elíptica describe un cierto estado de un sistema físico (e.g., el estado estacionario), generalmente caracterizado por el mínimo de una cantidad, como la energía.
- Parabólicas: En la mayoría de los casos, una EDP parabólica describe el proceso de variación de un sistema físico hasta alcanzar un estado descrito por una EDP elíptica.
- Hiperbólicas: Una EDP elíptica describe el transporte de alguna cantidad física (e.g., la ecuación de onda).

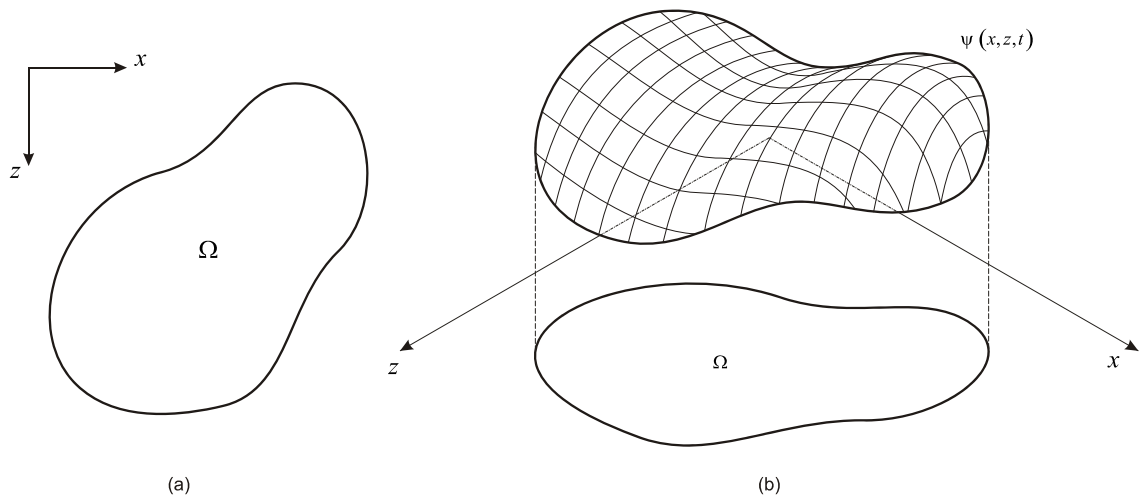
El flujo de agua en medio poroso está gobernado por una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico (Feddes, Kabat, van Bakel, Bronswijk y Halbertsma, 1988), por lo que la discusión a continuación se limitará a este tipo de ecuaciones.

#### 2.1.1. Solución numérica de EDPs

Las ecuaciones diferenciales parciales, especialmente aquellas que se derivan de problemas físicos, son en general imposibles de resolver analíticamente; de ahí que estos problemas generalmente se abordan desde el punto de vista numérico aproximado (Chapra y Canale, 2003). Dada la importancia de este tipo de ecuaciones en la práctica de la ciencia e ingeniería, es importante contar con herramientas y metodologías que permitan obtener soluciones numéricas que representen de manera razonable el comportamiento de la variable dependiente.

El procedimiento que se ha seguido para obtener una solución numérica de una EDP parabólica se puede resumir en cuatro pasos, los cuales se presentan de manera general a continuación. Con el fin de ilustrar este procedimiento, supóngase que se desea determinar cierta cantidad  $\psi$ , gobernada por determinada ecuación diferencial parabólica, en un dominio espacial bidimensional  $(x,z) \in \Omega$  y un dominio temporal  $t \in (0,T)$ . La geometría del dominio de simulación y la solución exacta de  $\psi$  se pueden apreciar en la Figura 2.1. Los pasos fundamentales de cualquier método de solución numérica son:

**Figura 2.1.** Ejemplo de la solución de una ecuación diferencial parcial parabólica bidimensional: (a) Geometría del dominio de simulación  $\Omega$ . (b) Solución exacta de  $\psi$  en  $\Omega$  para el tiempo  $t$ .



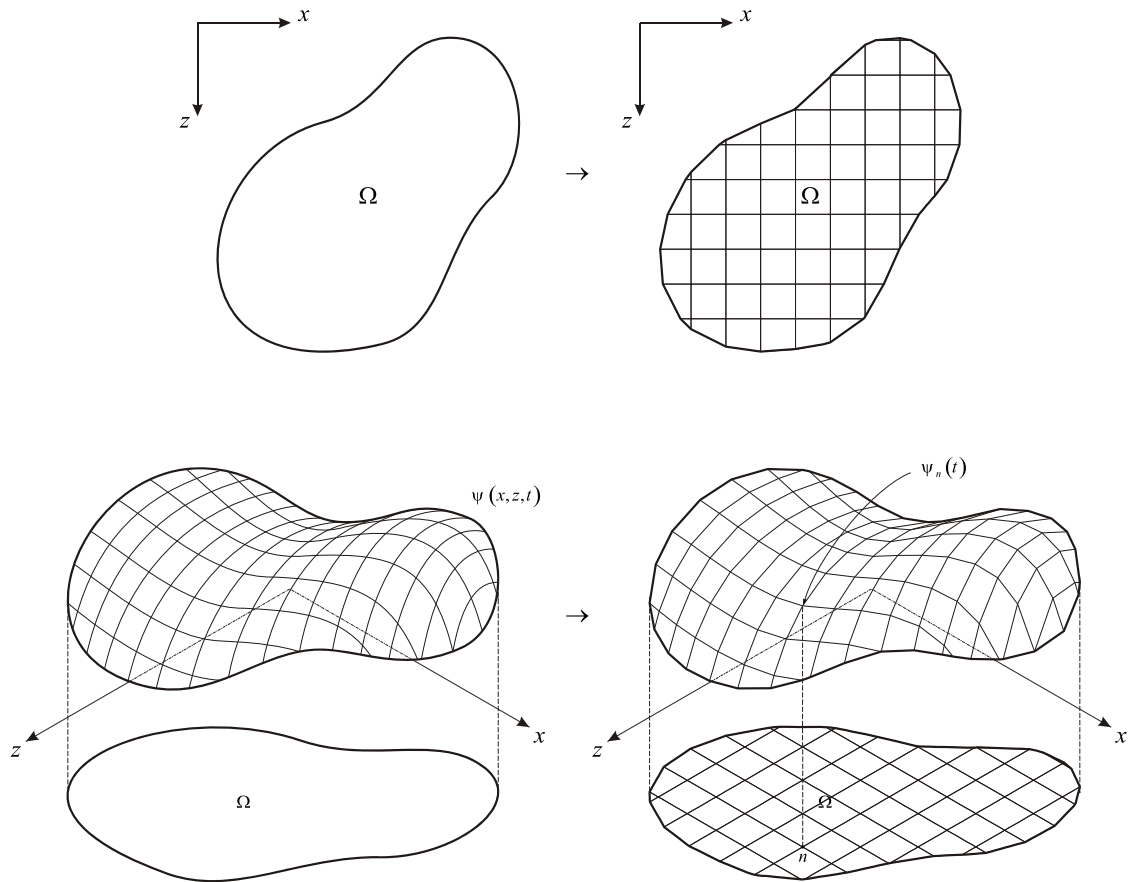
### 2.1.1.1. Discretización espacial

La discretización es el paso de un problema continuo complicado a uno discreto más fácil de resolver. En vez de obtener una expresión del valor de  $\psi$  para cada punto del dominio (problema continuo), los métodos de solución numérica buscan calcular una aproximación de  $\psi$ ,  $\psi_n$ , en ciertos puntos o nodos  $n$  de  $\Omega$ , organizados en una malla, tal como se puede apreciar en la Figura 2.2 (problema discreto). Este proceso es equivalente a reducir el problema de una ecuación diferencial parcial a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs). Sea  $N$  el número de nodos de la malla, entonces mediante la discretización espacial, el problema se transforma a determinar la variación de la cantidad  $\psi$  en cada nodo en el tiempo, esto es, determinar el conjunto  $N$  de funciones únicamente dependientes del tiempo  $\{\psi_n(t)\}_{n=1}^N$ , denominadas *funciones discretas* o *nodales*, las cuales se obtienen de la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Es importante tener en cuenta que, durante este proceso, las condiciones de borde del problema continuo deben transferirse al problema discreto teniendo cuidado de no violar los principios físicos del problema que se desea resolver.

### 2.1.1.2. Relaciones entre funciones discretas

Luego de construir la discretización del dominio espacial de simulación, el paso a seguir es establecer las relaciones entre las funciones  $\psi_n(t)$ , las cuales se derivan de la geometría de la discretización espacial utilizada. Estas relaciones deben permitir reescribir las derivadas espaciales de la EDP parabólica como una combinación lineal de las funciones nodales, de modo que se eliminen todos los términos de variación espacial y quede un sistema lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias dependientes del tiempo.

Figura 2.2. Proceso de discretización espacial.



### 2.1.1.3. Discretización temporal

En general, obtener una solución analítica para el sistema de EDOs descrito anteriormente no es posible. Los métodos de solución numérica buscan, por tanto,

obtener una aproximación de  $\psi_n(t)$  sólo para ciertos valores de la variable temporal, conocidos como *niveles temporales*. La metodología utilizada para calcular las aproximaciones de  $\psi_n$  en cierto nivel temporal a partir de los niveles anteriores, se conoce como *esquema de integración temporal*, y el proceso de aplicar el esquema para calcular el estado en un nuevo nivel se llama *avance temporal*. Los esquemas de integración temporal estudiados en el presente trabajo consisten esencialmente en reducir la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias a la solución de un sistema lineal de ecuaciones algebraicas por cada avance temporal.

#### 2.1.1.4. Solución de sistema de ecuaciones lineales

Los sistemas lineales de ecuaciones algebraicas que resultan del proceso de avance temporal generalmente están compuestos por un número elevado de ecuaciones e incógnitas, lo cual, como se estudiará con más detalle en secciones subsecuentes, los hace poco prácticos de resolver mediante la aplicación de métodos tradicionales de solución (e.g., Gauss o Gauss-Jordan), y obligan necesariamente al uso de enfoques alternativos, como los métodos de Gauss-Seidel, Jacobi, o el del Gradiente Conjugado.

#### 2.1.1.5. Métodos de solución numérica del problema de flujo en medio poroso

Existe en la actualidad una gran cantidad de métodos y estrategias para desarrollar cada uno de los 4 pasos de la solución mencionados anteriormente, pero para efectos del presente trabajo, se concentrará la atención en algunos de los métodos más adecuados en el contexto de la solución del problema de flujo en medio poroso, los cuales se presentan a continuación:

- Discretización espacial y ensamblaje del sistema de EDOs: Para la discretización espacial, los métodos más apropiados son el método de diferencias finitas (MDF), el método de elementos finitos (MEF), y el método de elementos de borde, cada uno con ventajas y desventajas que los hacen ideales para la solución de ciertos problemas, pero indeseables para otros (Feddes et al., 1988). De los anteriores, aún así, sólo se tratarán los métodos MDF y MEF en la discusión subsecuente.
- Discretización temporal: En cuanto a la discretización temporal, el método de diferencias finitas ofrece una forma simple y eficiente de manejar las derivadas con respecto al tiempo (Feddes, et al.), y es por tanto el enfoque que se ha utilizado en el presente documento para la integración temporal.
- Solución de sistemas de ecuaciones lineales: Finalmente, la solución de los sistemas de ecuaciones lineales se ha realizado utilizando el método del Gradiente Conjugado, el cual es usado ampliamente en muchas áreas de la mecánica computacional (Burden y Faires, 2002; Bouloutas, 1989), y cuya aplicación cuenta con ventajas especiales en el caso del problema de flujo en medio poroso (véase la Sección 5.4).

## 2.2. DINÁMICA DEL AGUA EN EL MEDIO NO SATURADO

La idea más importante introducida por Darcy en su estudio publicado en 1856 es que el flujo del agua en un medio poroso es producto de un gradiente hidráulico que succiona el agua. Buckingham, desde una perspectiva apoyada en la termodinámica, extendió esta idea a la forma más general de estados de energía, lo cual, aunque no introducido por él, permitió considerar el efecto de otras formas de energía (e.g., térmica, eléctrica y gradiente de concentración de solutos) en el movimiento del agua (Feddes et al., 1988). El *potencial de agua o de humedad* en el suelo se define como la capacidad de cierta masa de agua para hacer trabajo, en comparación con la misma masa de agua pura libre, la cual se considera tiene potencial igual a cero. El potencial de agua está compuesto por los siguientes términos (Feddes et al.):

$$\phi = \phi_m + \phi_{ex} + \phi_{en} + \phi_{os}, \quad (2.1)$$

El significado físico de los términos anteriores es:

- $\phi_m$  : Potencial mátrico. Producto de las interacciones locales entre la matriz de suelo y el agua (e.g., cohesión del fluido y tensión superficial).
- $\phi_{ex}$  : Potencial debido a la presión externa de gases.
- $\phi_{en}$  : Potencial debido a sobrecargas externas, las cuales son parcialmente soportadas por el agua.
- $\phi_{os}$  : Potencial osmótico. Producto de la presencia de solutos en el agua.

Si existe una diferencia de elevación entre la localización del agua y el dátum, se hace necesario introducir el término de potencial gravitacional  $\phi_g$ . En la práctica de la ingeniería es muy común trabajar con potenciales expresados en forma de cabezas de energía, las cuales tienen unidades de longitud (Feddes et al., 1988). El potencial de agua total se escribe en forma de cabeza como  $H$ , y el potencial mátrico como  $\psi$ , cantidad que se conoce también como *presión de poros*. En términos de potencial de humedad, la ley de Darcy establece que el agua se mueve de las áreas de menor potencial a las áreas de mayor potencial.

El otro aporte clave de Buckingham a la teoría del flujo en medios porosos es haber reconocido la relación entre el movimiento de agua a través de un suelo y su contenido de humedad. De hecho, para cada suelo existe una relación entre su contenido volumétrico de humedad  $\theta$  y su presión de poros  $\psi$ , la cual se conoce como *curva de retención del*

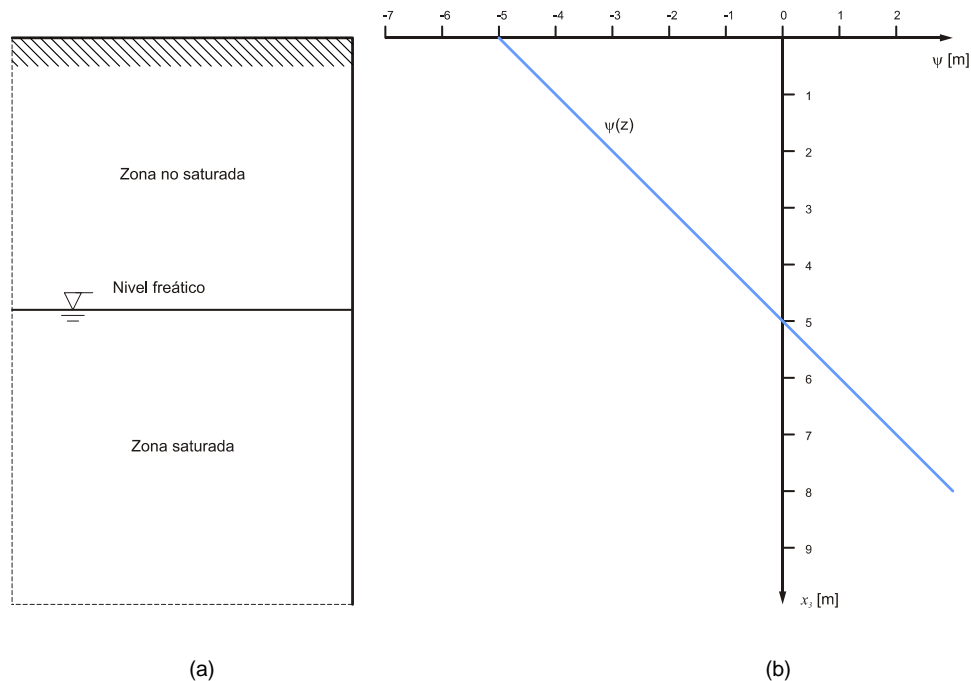
suelo (Avellaneda, 2003). Las propiedades y características de esta curva se estudian con más detalle en la siguiente sección.

Si se asume que el flujo de agua como producto exclusivamente de los efectos mátricos y gravitacionales, la cabeza hidráulica se escribe como  $H = \psi - x_3$ . Ahora, considérese el perfil de suelo mostrado en la Figura 2.3.a, el cual se encuentra en estado hidráulico de equilibrio. El perfil presenta nivel freático a 5 m de profundidad, esto es, el nivel donde la presión de poros es igual a la presión atmosférica ( $\psi = 0$ ); si se ignora el ascenso de agua por capilaridad, cualquier elemento de suelo por encima del nivel freático está no saturado ( $\psi < 0$ ), y por debajo está saturado ( $\psi > 0$ ). Dado que el perfil se encuentra en equilibrio, la variación del potencial con la profundidad es nulo, esto es

$$\frac{dH}{dx_3} = \frac{d\psi}{dx_3} - \frac{dx_3}{dx_3} = \frac{d\psi}{dx_3} - 1 = 0$$

En virtud de lo anterior podemos decir que en estado de equilibrio, la presión de poros varía a la par con la profundidad, esto es,  $d\psi = dx_3$ . El perfil de presión de poros para el suelo será el mostrado en la Figura 2.3.b.

**Figura 2.3.** Perfil de presión de poros para una columna de suelo en estado estable con nivel freático.



### 2.2.1. Ecuación de Richards

Inicialmente se realizará un análisis de las ecuaciones que gobiernan el problema de flujo en medio poroso, expresadas para el caso general de flujo tridimensional. Con este fin, introdúzcase la siguiente notación de índices, donde cantidades acompañadas por un solo subíndice representan componentes de un vector, y cantidades con dos subíndices representan componentes de matrices de segundo orden o tensores. Cuando un índice aparezca dos veces en una expresión algebraica, éste término debe ser sumado sobre todos los valores admisibles del índice en particular (Neuman, 1973). Las 3 coordenadas espaciales se identifican con el vector  $\{x\} = (x_1, x_2, x_3)^T$ , donde  $x_1, x_2$  son las coordenadas horizontales, y  $x_3$  es la coordenada vertical, tomada positiva a favor de la gravedad.

Usando la notación y definiciones anteriores, la ley de Darcy toma la forma

$$q_i = -K_{ij} \frac{\partial H}{\partial x_j}, \quad (2.2)$$

donde  $\{q\} = (q_1, q_2, q_3)^T$  es el vector de descarga o flujo específico y  $q_i$  es la componente de flujo de agua en la dirección  $x_i$ .  $K_{ij}(x_i, \theta)$  es el tensor de conductividad hidráulica, el cual es función del espacio y del contenido volumétrico de humedad del suelo  $\theta$ . Este tensor es semidefinido positivo para el caso del paso del suelo del estado no saturado al saturado (e.g., infiltración), y definido positivo para el caso del paso del estado saturado a parcialmente saturado (e.g., redistribución de humedad en el suelo) (Woodward y Dawson, 2000).

Para derivar la ecuación de continuidad en medios porosos, considérese el elemento infinitesimal de suelo de volumen  $\Delta V$  mostrado en la Figura 2.4, adaptada de De Laet (2001). Supóngase que el elemento está parcialmente saturado y que el contenido de humedad es uniforme en todo su volumen. El balance de masa para flujo en la dirección  $x_1$  es:

$$\text{Flujo que entra al volumen: } \rho q_{x_1} \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t$$

$$\text{Flujo que sale del volumen: } \rho q_{x_1 + \Delta x_1} \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t$$

$$\begin{aligned} \text{Flujo neto: } & (\rho q_{x_1} - \rho q_{x_1 + \Delta x_1}) \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t \\ & = -\frac{(\rho q_{x_1 + \Delta x_1} - \rho q_{x_1})}{\Delta x_1} \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 \Delta t \\ & = \frac{-\Delta \rho q_{x_1}}{\Delta x_1} \Delta V \Delta t \end{aligned}$$

donde  $\rho$  es la densidad del agua. Se puede proceder de manera similar con las otras dos direcciones espaciales para obtener expresiones similares a la anterior:

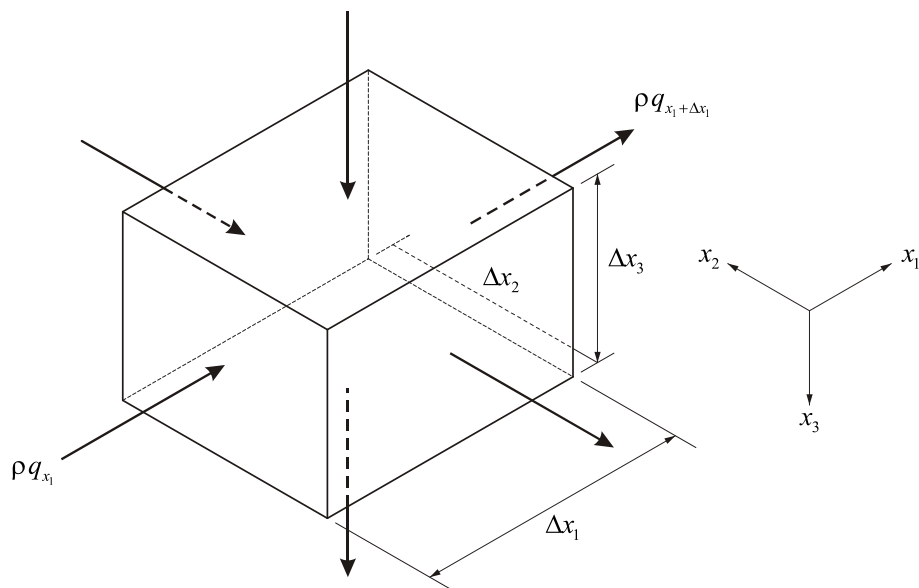
$$\text{Flujo neto en dirección } x_2 : \frac{-\Delta\rho q_{x_2}}{\Delta x_2} \Delta V \Delta t$$

$$\text{Flujo neto en dirección } x_3 : \frac{-\Delta\rho q_{x_3}}{\Delta x_3} \Delta V \Delta t$$

La variación del contenido de agua en el volumen elemental durante el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , ignorando la capacidad de almacenamiento específico de un acuífero (esto es, la habilidad del dominio de liberar agua de su estado de almacenamiento dado una variación en la cabeza de presión), está dada por  $(\Delta\rho\theta)(\Delta V)$ . Igualando esta expresión al flujo neto, se tiene

$$(\Delta\rho\theta)(\Delta V) = -\left(\frac{\Delta\rho q_{x_1}}{\Delta x_1} + \frac{\Delta\rho q_{x_2}}{\Delta x_2} + \frac{\Delta\rho q_{x_3}}{\Delta x_3}\right) \Delta V \Delta t$$

**Figura 2.4.** Flujo a través de un elemento infinitesimal de suelo. Adaptada de De Laat (2001).



Si se desprecian las variaciones espaciales y temporales de la densidad del agua, y se divide la expresión anterior por  $\Delta V$ ,

$$\frac{\Delta\theta}{\Delta t} = -\frac{\Delta q_{x_1}}{\Delta x_1} - \frac{\Delta q_{x_2}}{\Delta x_2} - \frac{\Delta q_{x_3}}{\Delta x_3}$$

Tomando límites, se llega a la ecuación diferencial de continuidad

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\nabla\{q\} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} \quad (2.3)$$

Finalmente, reemplazando (2.2) en (2.3), se obtiene la ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial\psi}{\partial x_j} - K_{i3} \right) = \frac{\partial\theta}{\partial t} \quad (2.4)$$

Esta expresión es un caso particular de la ecuación de Richards, en la que se asume que el término de almacenamiento específico es despreciable. Para los efectos del presente documento, esta hipótesis es lo suficientemente verosímil como para trabajar con la expresión (2.4). Una forma más general de la ecuación puede encontrarse en Neuman (1973), Woodward et al. (2000) y Huyakorn et al. (1984).

Obsérvese que la ecuación (2.4) está en términos tanto de la presión de poros  $\psi$  como del contenido de humedad  $\theta$ , por lo que se dice que es una *forma mixta* de la ecuación de Richards. Esta formulación de la ecuación es válida tanto para el estado saturado, donde la humedad  $\theta$  es igual a la humedad de saturación  $\theta_s$  y la conductividad hidráulica igual a la conductividad de saturación  $K_{ij,sat}$ , como para el estado no saturado, donde  $\theta > \theta_s$  y  $K_{ij,s} > K_{ij} > 0$ ; además, dado que el perfil de presión de poros es continuo aún en los cambios de material, la forma mixta es aplicable en dominios de simulación compuestos por diferentes tipos de suelo.

Es posible escribir (2.4) exclusivamente en términos de la presión de poros haciendo una sencilla transformación. Usando la regla de la cadena, la derivada temporal de la ecuación de Richards se puede escribir como

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial\theta}{\partial\psi} \frac{\partial\psi}{\partial t} = C(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (2.5)$$

donde el término  $C(\psi) = \partial\theta/\partial\psi$  se conoce como *capacidad específica de humedad*, y se puede calcular si se conoce la relación entre la presión de poros y el contenido de humedad para el suelo en cuestión. Reemplazando esta relación en (2.4), se llega a la *forma basada en la presión* de la ecuación de Richards:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial\psi}{\partial x_j} - K_{i3} \right) = C(\psi) \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (2.6)$$

La forma basada en la presión también puede aplicarse tanto en estado saturado como no saturado, y admite diferentes materiales. Si se introduce el concepto de *difusividad de agua en el suelo*  $D(\theta) = K_{ij}(\theta)/C(\theta)$ , la ecuación (2.4) puede escribirse exclusivamente en términos del contenido de humedad:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial \theta}{\partial x_j} - D_{i3} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (2.7)$$

Esta forma basada en la humedad tiene algunas desventajas significativas que hacen su aplicación poco práctica. El perfil del contenido de humedad, a diferencia del perfil de presión, es discontinuo en la interfase entre materiales, pues el comportamiento de  $\theta$  en función de  $\psi$  es diferente para cada material; además, en estado saturado la difusividad es, como se verá en la siguiente sección, indeterminada, lo que hace que la ecuación (2.7) sólo sea útil para analizar el flujo en un medio parcialmente saturado.

Adicionales a las simplificaciones hechas hasta el momento, supóngase además que los materiales que componen el dominio de simulación son isotrópicos, esto es, sus propiedades son independientes de la dirección en que se observen. Si este es el caso, los elementos del tensor de conductividad hidráulica cumplen las relaciones  $K_{11} = K_{22} = K_{33} = K$ , y  $K_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ . Reemplazando en (2.4), se obtiene la forma más simplificada

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial K}{\partial x_3} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (2.8)$$

Esta es la forma definitiva de la ecuación de Richards con la que se va a trabajar en los capítulos a continuación. En este caso, la conductividad hidráulica  $K(\theta)$  es una función escalar del contenido de humedad.

El objetivo de la solución del problema especificado en la ecuación (2.8) es determinar la variación espacio-temporal de la cabeza de presión y el contenido de humedad, esto es, conocer  $\psi(x_i, t)$  y  $\theta(x_i, t)$ . Para tal fin es necesario especificar las siguientes características del dominio de simulación:

- *Condiciones iniciales y de frontera:* Todo problema modelado por una EDP parabólica necesita que se le definan condiciones iniciales y de frontera para poder obtener de él una solución (Šolin, 2006).
- *Propiedades hidráulicas:* Deben especificarse además las propiedades hidráulicas en estado no saturado de cada uno de los materiales que componen el dominio de simulación, para así poder evaluar los coeficientes de (2.8).

En las secciones a continuación se presenta una breve discusión de la implementación de estos requisitos en el presente trabajo.

### 2.2.2. Condiciones Iniciales y de Frontera

Dado que las EDPs de segundo orden parabólicas modelan la variación de un sistema físico, es necesario, para su solución, especificar el estado inicial de las variables dependientes asociadas. En el caso de la ecuación de Richards, esta condición inicial toma la forma

$$\psi(x_i, 0) = \psi_0(x_i) \quad (2.9)$$

Las condiciones de frontera prescriben el comportamiento de las variables dependientes en todo el borde del dominio de simulación, información a partir de la cual se puede determinar el estado de flujo en el interior.

Considérese la variación de cierta cantidad escalar  $u$  en un dominio espacial  $x_i \in \Omega$  con frontera  $\Gamma$ , y dominio temporal  $t \in (0, T)$ , gobernada por una EDP de segundo orden parabólica. Las condiciones de frontera en este caso pueden ser de cualquiera de los siguientes tres tipos, o una combinación de dos o más de ellos:

- *Condición de Dirichlet (o de primer tipo)*: Especifican el valor de la variable  $u$  en la frontera, esto es,

$$u(x_i, t) = U(x_i, t), \text{ para } x_i \in \Gamma,$$

donde  $U(x_i, t)$  es una función escalar prescrita definida en  $\Gamma$ .

- *Condición de Neumann (segundo tipo)*: Especifican el valor de la primera derivada de  $u$  en la frontera, esto es,

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = g(x_i, t),$$

donde  $g(x_i, t)$  es una función escalar prescrita definida en  $\Gamma$ , y  $\nu$  es la normal (apuntando hacia fuera del interior del dominio) a la frontera  $\Gamma$  en  $x_i$ .

- *Condición de Robin (tercer tipo)*: Especifican la combinación lineal del valor de  $u$  y su primera derivada en la frontera, esto es,

$$a(x_i, t)u + b(x_i, t)\frac{\partial u}{\partial \nu} = g(x_i, t),$$

donde  $a, b$  y  $g$  son funciones escalares prescritas definidas en  $\Gamma$ , y  $\nu$  es la normal a la frontera  $\Gamma$  en  $x_i$ .

El esquema de solución e la ecuación de Richards que se desarrolla en el presente trabajo, se limita a considerar condiciones de frontera de primer y segundo tipo. En el caso particular del problema de flujo en medio poroso, una condición de frontera de Dirichlet equivale a prescribir el valor de la presión en la frontera, mientras que una condición de Neumann equivale a prescribir el flujo específico a través de la frontera.

Sea  $\Gamma$  el contorno de la región de flujo  $\Omega$ , el cual consiste de dos segmentos  $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_N$  tales que  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$  y  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ . Así, las condiciones de borde que se pueden trabajar se expresan como

$$\text{Condición de Dirichlet: } \psi(x_i, t) = \Psi(x_i) \text{ sobre } \Gamma_D \quad (2.10)$$

$$\text{Condición de Neumann: } q_i v_i = \left( -K_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + K_{i3} \right) v_i = Q(x_i) \text{ sobre } \Gamma_N, \quad (2.11)$$

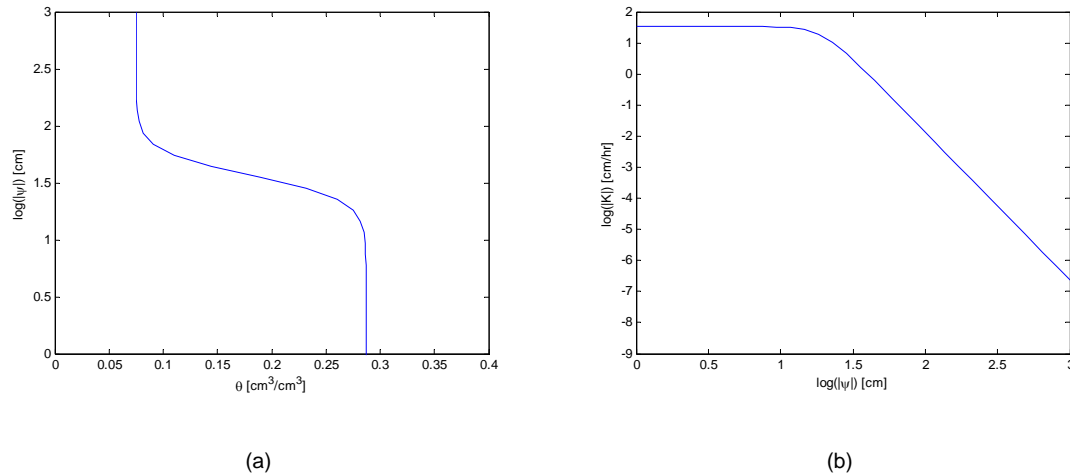
donde  $\Psi(x_i)$  y  $Q(x_i)$  son funciones prescritas independientes del tiempo, y  $v_i$  es la  $i$ -ésima componente del vector unitario normal a  $\Gamma$  apuntando hacia fuera de la región de flujo (Neuman, 1973).

### 2.3. PROPIEDADES HIDRÁULICAS DE LOS SUELOS

Si se usa la forma de la ecuación de Richards para materiales isotrópicos, las propiedades hidráulicas de un suelo pueden ser descritas de manera satisfactoria definiendo el par de funciones hidráulicas  $\theta(\psi)$  y  $K(\psi)$ . Estas funciones escalares describen la variación del contenido de humedad y la conductividad hidráulica del suelo con la presión de poros, respectivamente. Un ejemplo de la forma de estas funciones para un suelo en particular se puede apreciar en la Figura 2.5, adaptada de Haverkamp, Vauclin, Touma, Wierenga y Vauchad (1977).

En la Figura 2.5 se pueden apreciar algunas características importantes de la variación de la humedad y la conductividad con la presión de poros. Cuando un suelo está relativamente seco (esto es, la presión de poros es muy baja, y el logaritmo de su valor absoluto, es relativamente alto), el suelo conserva cierta humedad *residual*  $\theta_r$ . A medida que la presión de poros aumenta, el contenido de humedad aumenta hasta alcanzar su valor máximo, correspondiente a la humedad de saturación  $\theta_s$ . En cuanto a la conductividad hidráulica, ésta también aumenta de manera no lineal con la presión de poros hasta alcanzar su valor máximo en estado de saturación,  $K_s$ .

**Figura 2.5.** Funciones  $\theta(\psi)$  y  $K(\psi)$  para el suelo 'arena Haverkamp' (Haverkamp et al., 1977)

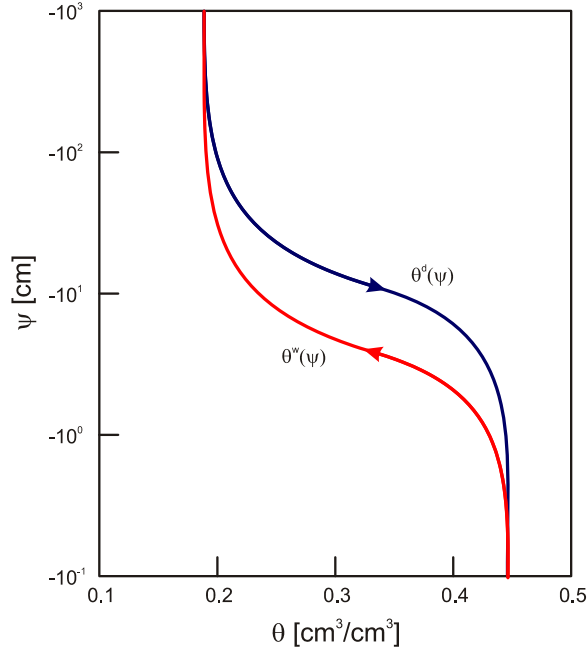


Aunque tanto la conductividad hidráulica como la presión de poros aumentan con el contenido de humedad, ciertamente no lo hacen siguiendo una ley de proporcionalidad. Si se observa con detalle la Figura 2.5, se puede apreciar que una pequeña variación en el contenido de humedad puede traducirse en un aumento significativo de la presión de poros y un cambio aún más drástico en la conductividad hidráulica. Este comportamiento altamente no lineal, más que ser un caso particular desafortunado, es la regla general para la mayoría de los suelos (Šimunek, van Genuchten y Šejna, 2005).

En la mayoría de aplicaciones prácticas de la ecuación de Richards, se asume que para cada suelo hay un único par de funciones  $\theta(\psi)$  y  $K(\psi)$  que describen su comportamiento. La realidad es que la variación de las propiedades hidráulicas con la presión de poros es diferente si el suelo se está secando o se está humedeciendo; éste efecto se conoce como *histéresis* (Šimunek et al., 2005) y se ilustra en la Figura 2.6. En ella se puede apreciar el caso de un suelo con dos curvas de retención de agua diferentes, una para el proceso de secado, y otra para el proceso de humedecimiento.

El modelo de flujo en medio poroso desarrollado en el presente documento se limita a considerar una única curva de descripción tanto para el contenido de humedad como para la conductividad hidráulica.

**Figura 2.6.** Ejemplo de una curva de retención de agua mostrando el efecto de histéresis. Se muestran la curva de secado  $\theta^d(\psi)$  y la curva de humedecimiento  $\theta^w(\psi)$ . Adaptado de Šimunek et al. (2005)



### 2.3.1. Modelos analíticos de las propiedades hidráulicas

A partir de mediados del siglo XX, diversos autores han elaborado y propuesto modelos analíticos para describir las propiedades hidráulicas de los suelos en función de parámetros que puedan determinarse empíricamente. Uno de los modelos más populares y discutidos es el propuesto por Brooks y Corey (1964), en el que el contenido de humedad y la conductividad hidráulica están dados por

$$S_e = \begin{cases} |\alpha\psi|^{-n} & \psi < -1/\alpha \\ 1 & \psi \geq -1/\alpha \end{cases} \quad (2.12)$$

$$K = K_s S_e^{2/n+1+2}, \quad (2.13)$$

donde  $S_e$  es la saturación efectiva, calculada según

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.14)$$

Los parámetros de este modelo son:

- $\theta_r$  : Contenido de humedad residual
- $\theta_s$  : Contenido de humedad de saturación
- $K_s$  : Conductividad hidráulica de saturación
- $\alpha$  : Inversa del valor de entrada de aire
- $n$  : Índice de distribución de tamaño de poros

El parámetro  $l$  es un índice de conectividad entre poros, el cual fue tomado igual a 2.0 en el estudio original de Brooks y Corey (1964).

Otro modelo utilizado ampliamente en la práctica de la ingeniería es el propuesto por van-Genutchen (1980) a partir del modelo estadístico de distribución de tamaño de poros de Mualem (1976):

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + |\alpha\psi|^n\right]^m} & \psi < 0 \\ \theta_s & \psi \geq 0 \end{cases} \quad (2.15)$$

$$K(\psi) = K_s S_e^l \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m\right]^2, \quad (2.16)$$

con  $m = 1 - 1/n$ . Los parámetros en este caso son los mismos 5 del modelo de Brooks y Corey. El valor del índice de conectividad entre poros  $l$  fue estimado por Mualem en 0.5, como promedio para muchos suelos (Mualem, 1976). En la Tabla 2.1 se presentan tres ejemplos de propiedades de suelo descritas usando el modelo de van-Genutchen, e ilustradas en la Figura 2.7 y 2.8.

Adicionales a los dos modelos mencionados anteriormente, algunos autores han propuesto expresiones diferentes para aproximar las propiedades de cierto suelo en particular. Por ejemplo, Haverkamp et al. (1977) proponen el siguiente par de ecuaciones para ajustar el comportamiento del contenido de humedad y la conductividad hidráulica del suelo mostrado en la Figura 2.5:

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi|^\beta}$$

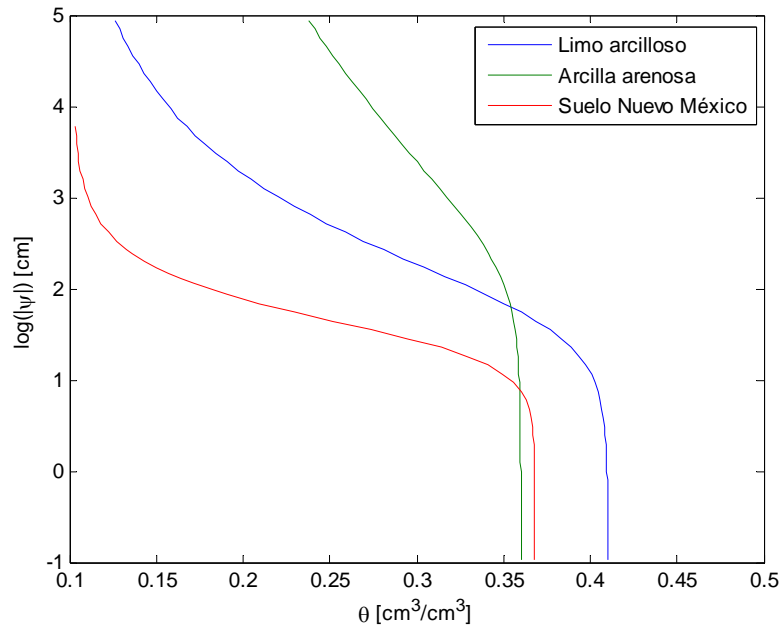
$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\gamma}$$

**Tabla 2.1.** Ejemplos de parámetros del modelo van-Genutchen Mualem

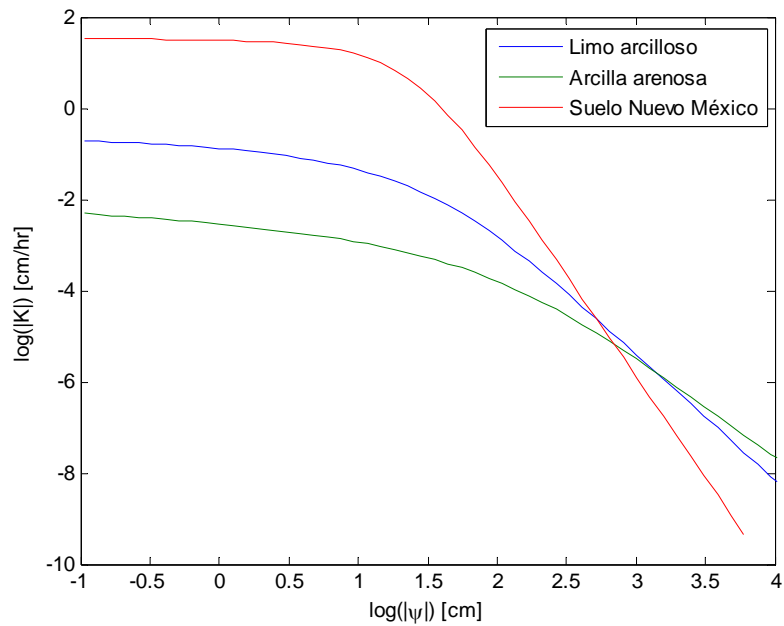
Descripción	$\theta_r$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$\theta_s$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$\alpha$ [cm <sup>-1</sup> ]	$n$	$K_s$ [cm/hr]
Limo arcilloso	0.095	0.41	0.019	1.31	0.260
Arcilla arenosa	0.07	0.36	0.005	1.09	5.556e-6
Nuevo México– Primera Capa*	0.1020	0.3681	0.03353	1.98	33.190

\* Tomado de Polmann (1989)

**Figura 2.7.** Curvas de retención de agua para los suelos 'Limo arcilloso', 'Arcilla arenosa' y 'Nuevo México – 1ra. capa'



**Figura 2.8.** Conductividad hidráulica en función de la presión de poros para los suelos 'Limo arcilloso', 'Arcilla arenosa' y 'Nuevo México – 1ra. capa'



### 2.3.2. Representación numérica de las propiedades de suelos

Los coeficientes de la ecuación de Richards indican que, para obtener una solución numérica de ésta, es necesario evaluar repetidamente la conductividad hidráulica y el contenido de humedad para diferentes valores de presión de poros. Estas cantidades se pueden determinar usando cualquiera de las siguientes dos aproximaciones:

- Suministrar un modelo analítico de propiedades de suelo y evaluar  $\theta$  y  $K$  directamente de las ecuaciones para el valor de  $\psi$  que se necesite.
- Suministrar una tabla, denominada *tabla de propiedades*, que relacione valores de  $\theta$  y  $K$  para diferentes valores de  $\psi$ , tal como se describe en Šimunek et al. (2005). La estructura de dicha tabla sería como la ilustrada en la Figura 2.9:

**Figura 2.9.** Estructura de la tabla de propiedades de materiales

$\psi$	$\theta$	$K$
$\psi_N$	$\theta_N$	$K_N$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\psi_i$	$\theta_i$	$K_i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\psi_2$	$\theta_2$	$K_2$
$\psi_1$	$\theta_1$	$K_1$
0	$\theta_s$	$K_s$

La relación entre los valores consecutivos de presión de poros en la tabla es

$$\frac{\psi_{i+1}}{\psi_i} = \text{ctte} > 1, \quad (2.17)$$

la cual define la resolución con la que las propiedades del suelo están siendo representadas. Un ejemplo de tablas de propiedades construidas para un suelo se puede apreciar en el Anexo A. La conductividad hidráulica y el contenido de humedad para presiones de poros que no están en la tabla se pueden determinar usando algún algoritmo de interpolación.

La segunda metodología agrega flexibilidad sobre la primera, pues permite utilizar datos empíricos de propiedades de materiales que no han sido ajustados usando un modelo

analítico; además, si el algoritmo de interpolación a utilizar es de interpolación lineal, se ha observado que es una aproximación mucho más rápida en términos de esfuerzo computacional que la evaluación directa en modelos analíticos (Šimunek et al., 2005).

El modelo de solución que se desarrolla en el presente documento utiliza la metodología de tablas de propiedades, acompañadas de un algoritmo de interpolación mediante splines cúbicos, el cual se presenta con detalle en el Anexo B.

### 3. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

El método de diferencias finitas es el enfoque numérico más frecuentemente usado para modelar el flujo de agua en medios porosos (Feddes et al., 1988). Su popularidad se basa en que, como se estudiará a continuación, la formulación del método no requiere de conocimientos especializados en matemáticas, y cada una de sus operaciones tiene un significado físico intrínseco que se puede percibir de manera intuitiva. En el presente capítulo se estudiará la formulación del método, sus características, limitaciones, y su aplicación en el contexto del problema de flujo en medio poroso.

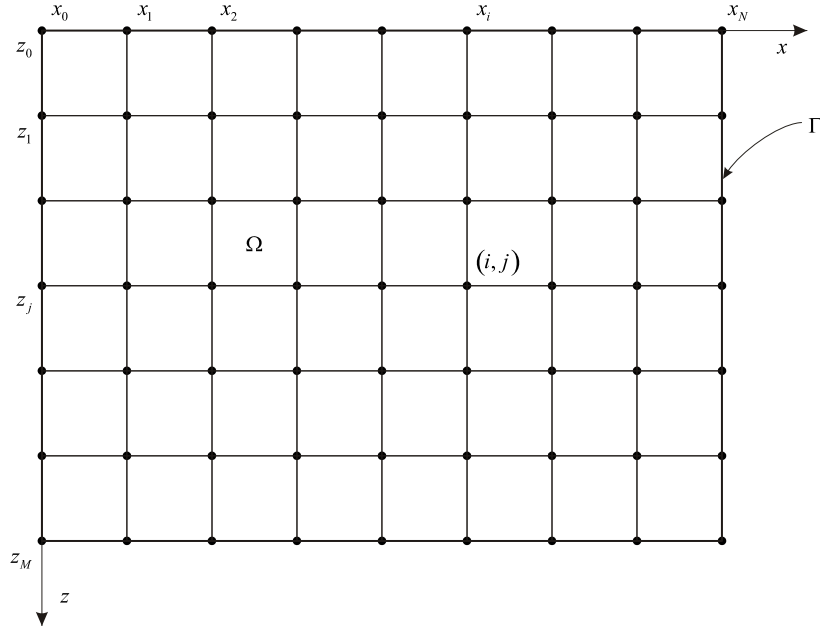
#### 3.1. INTRODUCCIÓN AL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS (MDF)

El tipo de discretización espacial usado en el método de diferencias finitas se conoce como *grilla bilineal* (o *discretización en diferencias*), donde los nodos se encuentran en las intersecciones de una grilla bidimensional cuyas líneas son paralelas a los ejes coordenados. A partir de las relaciones de vecindad que surgen de la organización de esta grilla es que se obtienen las ecuaciones del método. A continuación se presenta un ejemplo sencillo para ilustrar este procedimiento

Supóngase que se desea determinar cierta cantidad  $\psi(x, z, t)$  en  $(x, z) \in \Omega$ ,  $t \in (0, T)$ . El dominio espacial de simulación  $\Omega$  (Figura 3.1) es un rectángulo con las fronteras  $\Gamma$  paralelas a los ejes coordenados, el cual se ha dividido en  $N$  intervalos en la dirección  $x$ , y  $M$  intervalos en la dirección  $z$ . Las líneas de división han sido identificadas con un subíndice para cada dirección espacial:  $i$  para las líneas perpendiculares al eje  $x$ , y  $j$  para las líneas perpendiculares al eje  $z$ , de modo que todo nodo de la grilla puede ser identificado por una pareja de la forma  $(i, j)$ .

Observando la Figura 3.1, se puede apreciar que todos los nodos, excepto aquellos que han quedado sobre las fronteras, cuentan con 4 vecinos. Este tipo de nodos se conocen como *nodos interiores*. Considérese ahora uno de estos nodos  $(i, j)$  del dominio de simulación, rodeado por sus vecinos de cuadrícula tal como se muestra en la Figura 3.2. Con el fin de simplificar la formulación, supóngase que las líneas de división que rodean al punto en cuestión están uniformemente espaciadas en cada dirección. Es posible obtener aproximaciones para las derivadas parciales espaciales de  $\psi$  en  $(i, j)$ , a partir del desarrollo en series de Taylor de la presión de poros en sus vecinos, bajo la hipótesis que  $\psi$  sea una función de  $x$  y  $z$  singular, finita y continua. Por ejemplo, los valores de la variable dependiente en los puntos  $(i, j-1)$  e  $(i, j+1)$ ,  $\psi_{i,j-1}$  e  $\psi_{i,j+1}$ , se pueden escribir en función de  $\psi_{i,j}$  como

**Figura 3.1.** Dominio rectangular bidimensional discretizado en diferencias.



$$\psi_{i,j+1} = \psi_{i,j} + \Delta z \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{(\Delta z)^2}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{(\Delta z)^3}{3!} \frac{\partial^3 \psi}{\partial z^3} + \dots$$

$$\psi_{i,j-1} = \psi_{i,j} - \Delta z \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{(\Delta z)^2}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{(\Delta z)^3}{3!} \frac{\partial^3 \psi}{\partial z^3} + \dots$$

donde las derivadas de  $\psi$  están evaluadas en el punto  $(i, j)$ . Manipulando algebraicamente las ecuaciones anteriores, se llega a las siguientes expresiones:

$$\text{Diferencia hacia delante: } \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (3.1)$$

$$\text{Diferencia hacia atrás: } \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (3.2)$$

$$\text{Diferencia central: } \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta z} + O[(\Delta z)^2] \quad (3.3)$$

$$\text{Diferencia central de segundo orden: } \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} + O[(\Delta z)^2] \quad (3.4)$$

Las ecuaciones (3.1) a (3.4) se conocen como *fórmulas de diferencias finitas*, y son ampliamente usadas para aproximar las derivadas de primer y segundo orden de cantidades discretas (Carnahan et al., 1969). Ahora, supóngase que el comportamiento de la variable dependiente está sometido a la siguiente sencilla EDP parabólica:

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

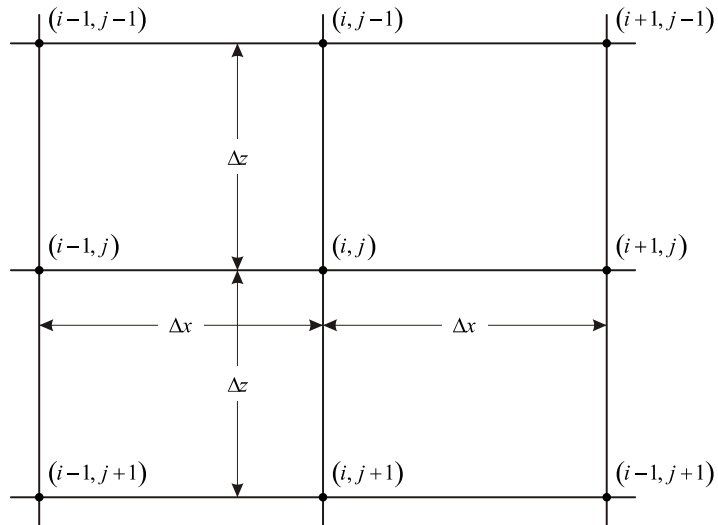
con condiciones iniciales y de borde

$$\psi(x, z, 0) = \psi_0(x, z)$$

$$\psi(x, z, t) = \Psi(x, z, t), \text{ para } (x, z) \in \Gamma$$

Reemplazando las derivadas de segundo orden espaciales por aproximaciones de la forma (3.4), obtenemos

**Figura 3.2.** Deducción de las fórmulas de diferencias finitas.



$$\left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right)_{(i,j)} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} + O[(\Delta x)^2] + O[(\Delta z)^2].$$

De esta manera se ha reemplazado satisfactoriamente el término espacial de la EDP por una combinación lineal de los valores de  $\psi$  en los nodos de la grilla. Ahora, se ignoran los términos de error y se reemplaza en la ecuación diferencial original para llegar a

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} = \frac{\partial \psi_{i,j}}{\partial t} \quad (3.5).$$

La expresión anterior es una EDO lineal de primer orden que gobierna la variación de  $\psi_{i,j}$  en el tiempo. Existen en el dominio, según las condiciones de frontera, un total de  $(M-1) \times (N-1)$  nodos internos en los que hace falta determinar esta variación, así que si escribimos la ecuación anterior para cada uno de estos nodos, tendremos un sistema de EDOs lineales de  $(M-1) \times (N-1)$  ecuaciones e incógnitas que se pueden resolver junto con las condiciones iniciales y de frontera.

El procedimiento anterior es, a grandes rasgos, el mismo para cualquier ecuación diferencial parcial que se desee solucionar numéricamente. Los factores que varían entre un problema y otro (i.e., la forma de la ecuación de diferencias, las condiciones de borde, la geometría del dominio, etc.) pueden aún así complicar significativamente el proceso de simulación. El objetivo del presente capítulo es, por tanto, discutir las particularidades y pormenores de la aplicación del método de diferencias finitas al problema de flujo en medio poroso.

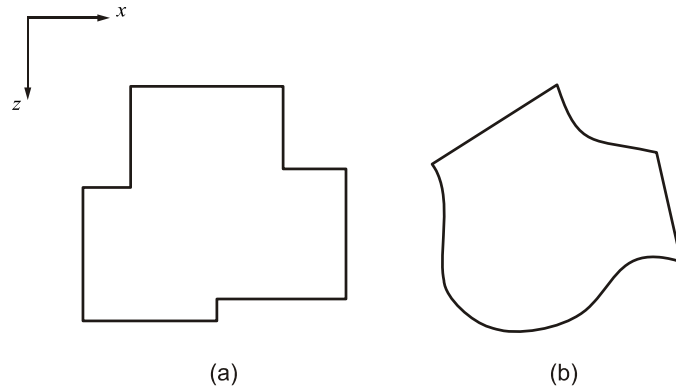
### 3.2. DISCRETIZACIÓN DE LA REGIÓN DE FLUJO

Los dominios de simulación no siempre corresponden a figuras geométricas sencillas o fáciles de representar de la forma utilizada en la Figura 3.1. Introdúzcase ahora la siguiente diferenciación en función de la forma de la frontera: Se dice que cierto dominio es *regular* sí y sólo si toda su frontera está compuesta por segmentos rectilíneos, y cada uno de estos segmentos coincide con una línea paralela a los ejes coordenados (Figura 3.3.a). Cualquier otro dominio que no cumpla estas condiciones se denomina *irregular* (Figura 3.3.b).

En un dominio regular, todos los nodos caen en la intersección de dos líneas divisorias, incluso aquellos ubicados sobre la frontera. En un dominio irregular, en cambio, éste no siempre es el caso. Con el fin de ejemplificar la afirmación anterior, considérese el dominio irregular mostrado en la Figura 3.3.a; para esta situación, la construcción de la discretización es similar al ejemplo de la Figura 3.1: se trazan líneas divisorias y se ubican nodos en las intersecciones, tal como se muestra en detalle en la Figura 3.3.b, sólo que ahora se presentan lugares donde líneas divisorias intersecan la frontera sin a la vez intersecar otra línea divisoria. Los nodos que surgen de estos casos, los cuales solo se producen en fronteras irregulares, se conocen como *nodos irregulares*.

A partir de la discusión anterior, se puede plantear la siguiente clasificación de nodos en una discretización en diferencias (Figura 3.3.b):

**Figura 3.3.** Clasificación de dominios según la forma de su frontera: (a) Dominio regular. (b) Dominio irregular.



- Los nodos ubicados en la intersección de una frontera irregular y una línea divisoria se conocen como *nodos irregulares*.
- Los nodos ubicados en la intersección de dos líneas divisorias se conocen como *nodos regulares*, mientras que aquellos sólo ubicados sobre una se denominan *nodos irregulares*. Un nodo regular se dice que es *interior* (1 y 2) cuando (a) no pertenece a la frontera, y (b) todos sus vecinos son otros nodos regulares. Los *nodos exteriores* son por tanto aquellos que, o bien tienen por vecino uno o dos nodos irregulares (3), o pertenecen a la frontera (4).

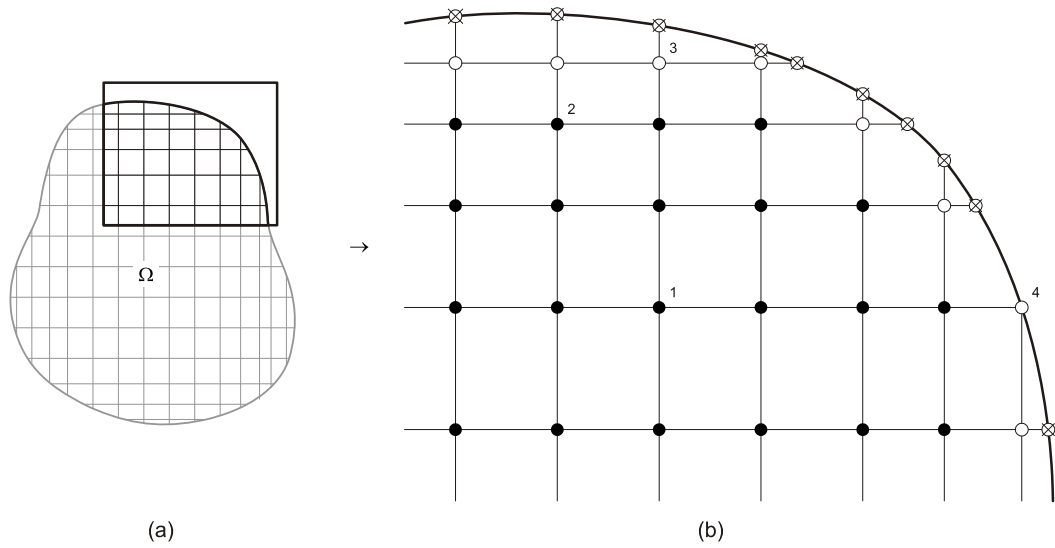
Los nodos irregulares representan una gran dificultad para el manejo de las condiciones de borde y la estructura de los sistemas de ecuaciones derivados de la integración de la EDP, por tanto, el presente modelo numérico de solución mediante diferencias finitas se limitará a dominios regulares. La explicación a esto se encuentra expuesta con más detalle en la sección donde se estudia el tratamiento de las condiciones de frontera.

Además de lo anterior, existen algunos conceptos adicionales asociados a la discretización espacial que vale la pena discutir. A modo de ejemplo, considérese el dominio regular discretizado mostrado en la Figura 3.5, del cual se han resaltado algunos elementos. Existe un área asociada a cada nodo  $n$ , conocida como *área aferente*  $A_{e,n}$ , que corresponde al conjunto de puntos del espacio más cercanos a ese nodo que a cualquier otro nodo de la discretización; de la misma manera, cada nodo externo tiene asociados ciertos sectores de la frontera, o *longitudes aferentes*, correspondientes a los puntos sobre la frontera más cercanos a él que a otros nodos.

Estos conceptos son muy útiles a la hora de determinar el volumen de agua almacenado en el dominio, y la cantidad de agua que ingresa por las fronteras. Si se asume que el contenido de humedad es uniforme sobre toda el área aferente de un nodo, el volumen de agua contenido en el dominio se puede calcular como la suma de humedades por áreas aferentes para todos los nodos. Si se conoce el flujo específico a través de los nodos de la frontera, el flujo que ingresa al dominio se determina como el producto del flujo

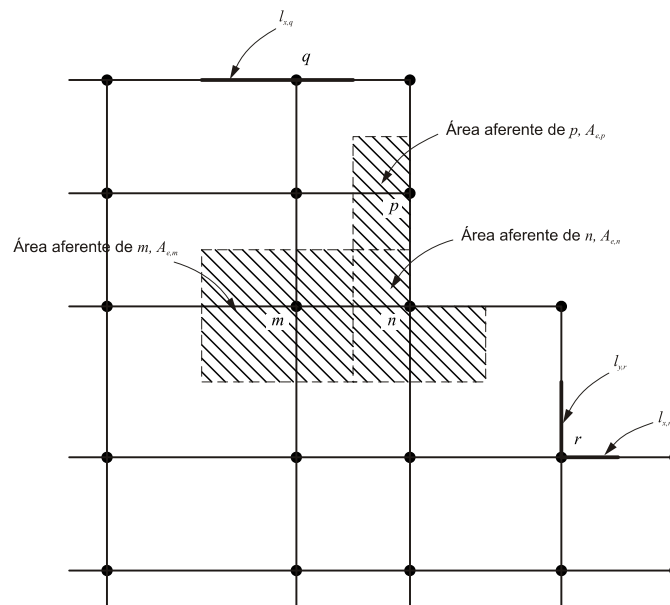
específico por la longitud aferente en cada dirección. El procedimiento de cálculo de estas cantidades se presenta con más detalle en la sección 6.1.

**Figura 3.4.** Clasificación de los nodos de la discretización en diferencias



● Nodo regular interior   ○ Nodo regular exterior   ⊗ Nodo irregular

**Figura 3.5.** Longitudes y áreas aferentes de los nodos de la grilla de diferencias finitas



### 3.3. IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

#### 3.3.1. Formulación del método

Para poder obtener una solución numérica del estado de flujo, es necesario buscar una expresión similar a (3.5) para la ecuación de Richards. Dicha expresión debe poder escribirse cuantas veces sea necesario, con el fin de obtener un sistema de EDOs solucionable cuya integración arroje la variación de la presión de poros en los nodos de la discretización. Escribiendo la ecuación (ingrese número de ecuación aquí) para el caso de flujo bidimensional, se obtiene la expresión

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla q = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_z}{\partial z}, \quad (3.6)$$

donde  $q_x$  y  $q_z$  son las componentes del flujo específico en las direcciones  $x$  y  $z$ , respectivamente. Considérese la situación general de un nodo regular interno del dominio de simulación, como el de la Figura 3.6. De la vecindad del nodo en cuestión, los nodos  $(i+1, j)$ ,  $(i-1, j)$ ,  $(i, j+1)$  e  $(i, j-1)$  forman lo que se denomina *vecindad clásica* de  $(i, j)$ . Las derivadas espaciales del flujo específico en (3.6) pueden aproximarse mediante la fórmula de diferencias central, centrada en  $(i, j)$  y con incrementos espaciales  $\Delta x^m/2$ ,  $\Delta z^m/2$ . Reemplazando en (3.3), se llega a

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial q_x}{\partial x} \right|_{(i,j)} &\cong \frac{q_x|_{(i+1/2,j)} - q_x|_{(i-1/2,j)}}{\Delta x^m} \\ \left. \frac{\partial q_z}{\partial z} \right|_{(i,j)} &\cong \frac{q_z|_{(i,j+1/2)} - q_z|_{(i,j-1/2)}}{\Delta z^m} \end{aligned} \quad (3.7)$$

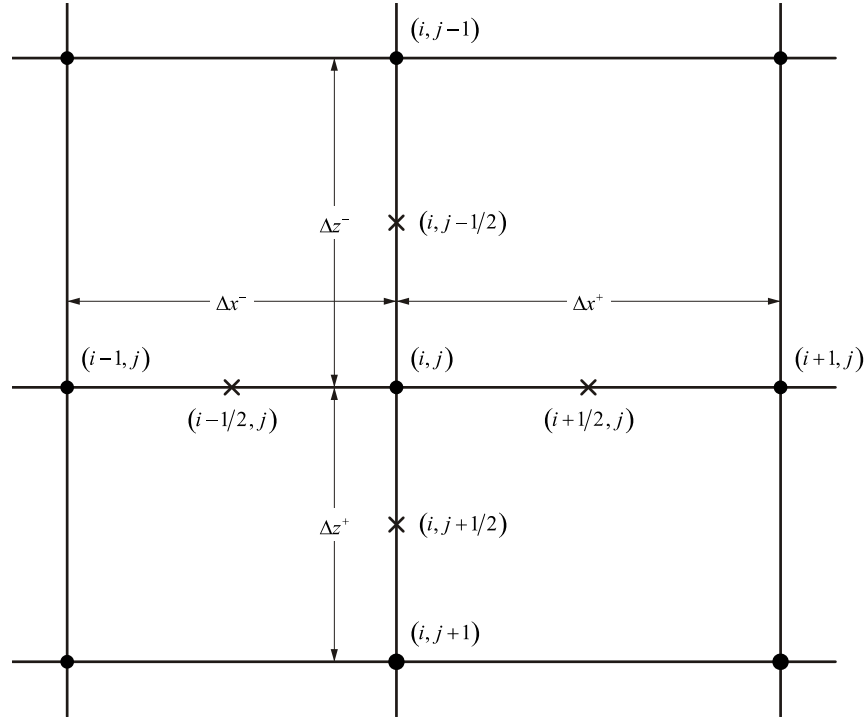
En esta ecuación, es necesario evaluar el flujo específico evaluados a mitad de los incrementos espaciales que rodean al nodo en cuestión, tal como se muestra en la Figura 3.6.  $\Delta x^m$  y  $\Delta z^m$  son el promedio de los incrementos espaciales en cada dirección, esto es

$$\Delta x^m = \frac{\Delta x^+ + \Delta x^-}{2} ; \Delta z^m = \frac{\Delta z^+ + \Delta z^-}{2} .$$

No es suficiente con lo alcanzado en (3.7) para llegar a la ecuación buscada; es necesario escribir estas expresiones en función de la presión de poros en los nodos de la grilla. Según la Ley de Darcy, el flujo específico es función de la variación espacial de la presión, y sus componentes están dadas por

$$q_x = -K \frac{\partial \psi}{\partial x} ; q_z = -K \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right),$$

**Figura 3.6.** Situación general de un nodo regular interno.



asumiendo que el suelo en cuestión es isotrópico, esto es, sus propiedades hidráulicas (conductividad hidráulica y capacidad específica de humedad) son iguales en todas direcciones. Reemplazando de nuevo las derivadas espaciales, esta vez de la presión de poros  $\psi$ , usando la fórmula de diferencias central, los valores discretos del flujo específico en (3.7) pueden escribirse como

$$\begin{aligned}
 q_x|_{(i+1/2,j)} &\cong -K_{i+1/2,j} \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^+} ; q_x|_{(i-1/2,j)} \cong -K_{i-1/2,j} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{\Delta x^-} \\
 q_z|_{(i,j+1/2)} &\cong -K_{i,j+1/2} \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z^+} + K_{i,j+1/2} ; q_z|_{(i,j-1/2)} \cong -K_{i,j-1/2} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta z^-} + K_{i,j-1/2}
 \end{aligned} \quad (3.8)$$

En estas expresiones, se ha asumido que la conductividad hidráulica es constante a lo largo de todo el incremento espacial, e igual al valor que alcanza en la mitad del incremento. Finalmente, se reemplaza (3.8) en (3.7), y lo que se obtiene reemplaza las derivadas espaciales en (3.6) para llegar a

$$\begin{aligned}
 -\nabla q = &-\frac{1}{\Delta x^m} \left[ -K_{i+1/2,j} \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^+} + K_{i-1/2,j} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{\Delta x^-} \right] \\
 &-\frac{1}{\Delta z^m} \left[ -K_{i,j+1/2} \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z^+} + K_{i,j+1/2} + K_{i,j-1/2} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta z^-} - K_{i,j-1/2} \right]
 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Los factores comunes de presión se agrupan para escribir la expresión anterior de manera más organizada como,

$$-\nabla q = \left( \frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} \right) \psi_{i+1,j} + \left( \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} \right) \psi_{i-1,j} + \left( \frac{K_{i,j+1/2}}{\Delta z^m \Delta z^+} \right) \psi_{i,j+1} + \left( \frac{K_{i,j-1/2}}{\Delta z^m \Delta z^-} \right) \psi_{i,j-1} \\ + \left( -\frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} - \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} - \frac{K_{i,j+1/2}}{\Delta z^m \Delta z^+} - \frac{K_{i,j-1/2}}{\Delta z^m \Delta z^-} \right) \psi_{i,j} - \frac{1}{\Delta z^m} (K_{i,j+1/2} - K_{i,j-1/2}) \quad (3.10)$$

Evaluando la derivada temporal en  $(i, j)$ , se llega a la ecuación diferencial ordinaria

$$A_{i+1,j} \psi_{i+1,j} + A_{i-1,j} \psi_{i-1,j} + A_{i,j+1} \psi_{i,j+1} + A_{i,j-1} \psi_{i,j-1} + A_{i,j} \psi_{i,j} + \frac{\partial \theta_{i,j}}{\partial t} = B_{i,j} \quad (3.11)$$

La ecuación anterior es la expresión equivalente a (3.5) que se ha estado buscando, donde

$$A_{i+1,j} = -\frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} \quad (3.12)$$

$$A_{i-1,j} = -\frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} \quad (3.13)$$

$$A_{i,j+1} = -\frac{K_{i,j+1/2}}{\Delta z^m \Delta z^+} \quad (3.14)$$

$$A_{i,j-1} = -\frac{K_{i,j-1/2}}{\Delta z^m \Delta z^-} \quad (3.15)$$

$$A_{i,j} = -\left( A_{i+1,j} + A_{i-1,j} + A_{i,j+1} + A_{i,j-1} \right) \\ = \frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} + \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} + \frac{K_{i,j+1/2}}{\Delta z^m \Delta z^+} + \frac{K_{i,j-1/2}}{\Delta z^m \Delta z^-} \quad (3.16)$$

$$B_{i,j} = -\frac{1}{\Delta z^m} (K_{i,j+1/2} - K_{i,j-1/2}) \quad (3.17)$$

Se dice que la ecuación (3.11) es una *fórmula de 5 puntos*, pues relaciona la presión de poros en un nodo en particular con la presión en sus 4 vecinos clásicos. Los valores de conductividad hidráulica utilizados para evaluar los coeficientes anteriores se pueden determinar de diferentes manera a partir de la conductividad hidráulica en  $(i, j)$  y sus nodos vecinos. Una forma tradicionalmente usada es tomar la media aritmética de la conductividad en los nodos de la grilla más cercanos al punto donde se desea evaluar la conductividad, esto es:

$$\begin{aligned}
K_{i+1/2,j} &= \frac{K_{i,j+1} + K_{i,j}}{2} \\
K_{i-1/2,j} &= \frac{K_{i,j} + K_{i,j-1}}{2} \\
K_{i,j+1/2} &= \frac{K_{i,j+1} + K_{i,j}}{2} \\
K_{i,j-1/2} &= \frac{K_{i,j} + K_{i,j-1}}{2}
\end{aligned}
\tag{3.18}$$

Otra metodología usada comúnmente es similar a la anterior, sólo que en vez de utilizar la media aritmética, se usa la media geométrica:

$$\begin{aligned}
K_{i+1/2,j} &= (K_{i,j+1} K_{i,j})^{1/2} \\
K_{i-1/2,j} &= (K_{i,j} K_{i,j-1})^{1/2} \\
K_{i,j+1/2} &= (K_{i,j+1} K_{i,j})^{1/2} \\
K_{i,j-1/2} &= (K_{i,j} K_{i,j-1})^{1/2}
\end{aligned}
\tag{3.19}$$

El uso de la media geométrica es en general preferible sobre el uso de la media aritmética (Celia et al., 1990; Haverkamp y Vauclín, 1979), pero aún así, en este trabajo se ha utilizado el grupo de ecuaciones (3.18) para aproximar los  $K_{i\pm 1/2,j}$ ,  $K_{i,j\pm 1/2}$ .

Si en la solución de cierto problema, los únicos valores de presión que varían con el tiempo son los de los nodos internos, la aplicación repetida de la ecuación (3.11) arroja la cantidad de ecuaciones necesaria para determinar estas variaciones. Lastimosamente, esta situación puede cambiar dependiendo del tipo de condiciones de borde a las que se someta el dominio de simulación, y puede llegar a ser necesario agregar más ecuaciones para la descripción adecuada de la presión en los nodos de frontera.

### 3.3.2. Condiciones de frontera

Los tipos de condiciones de frontera que pueden manejarse con el presente modelo de solución por diferencias finitas son las condiciones de Dirichlet y las condiciones de Neumann, sometidas a algunas limitaciones. En la presente sección se discute el manejo de estos dos tipos de condiciones y cómo afectan la forma y estructura del sistema de ecuaciones diferenciales. Recuérdese que el estudio desarrollado en este documento no incluye dominios con fronteras irregulares.

### 3.3.2.1. Condiciones de Dirichlet

La solución del estado de flujo en medio poroso sometido a condiciones de Dirichlet se limita a condiciones de la forma

$$\psi(x, z, t) = \Psi(x, z),$$

lo que implica que las funciones  $\psi_{i,j}$  en la frontera  $\Gamma_D$ , son conocidas y constantes en el tiempo, y por tanto no son objeto de cálculo.

Supóngase ahora que la discretización de cierto dominio regular de simulación está compuesta por  $N = N_I + N_E$  nodos, de los cuales  $N_I$  son internos y  $N_E$  son externos, y que la condición de frontera es de tipo Dirichlet. A todos los nodos se les asigna un número interno que los diferencie unos de otros, y que no necesariamente esté relacionado con su posición geométrica; de esta manera, se pueden organizar las funciones discretas de presión en un vector  $\{\psi\} = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)^T$ .

Sea que el nodo  $(i, j)$  de la Figura 3.6 ha sido identificado con el número  $n$ , y sus vecinos con los números  $p$ ,  $q$ ,  $r$  y  $s$ . La ecuación (3.11) relacionada con el nodo  $n$  puede entonces escribirse como

$$A_{n,p}\psi_p + A_{n,q}\psi_q + A_{n,r}\psi_r + A_{n,s}\psi_s + A_{n,n}\psi_n + \frac{\partial \theta_n}{\partial t} = B_n,$$

donde  $A_{n,m}$  se refiere al coeficiente  $A$  del nodo  $m$  en la  $n$ -ésima ecuación. La ecuación anterior se escribe  $N_I$  veces para obtener el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias del cual se obtiene el estado de flujo del problema que se desea solucionar. Si limitamos el vector  $\{\psi\}$  a las  $N_I$  funciones realmente desconocidas, el sistema de EDOs puede reescribir en forma matricial como

$$[A]_{N_I \times N_I} \{\psi\}_{N_I} + \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} \right\}_{N_I} = \{B\}_{N_I} - \left\{ \sum (A\psi)_E \right\}, \quad (3.20)$$

donde  $\left\{ \sum (A\psi)_E \right\}$  es el vector de elementos a la izquierda de (3.11), que pasan a la derecha pues su presión de poros es conocida. Este tipo de términos aparecen en la  $n$ -ésima ecuación si el nodo  $n$  tiene por vecino uno o más nodos externos.

Otra forma matricial más elegante de presentar el sistema de ecuaciones en cuestión se presenta a continuación. Ahora, inclúyanse en el vector  $\{\psi\}$  todas las funciones discretas, incluyendo aquellas cuyo valor está prescrito. Las  $N_I$  ecuaciones en (3.20) toman entonces la forma

$$[A]_{N_I \times N} \{\psi\}_N + \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} \right\}_{N_I} = \{B\}_{N_I}.$$

Adicionales a las  $N_I$  ecuaciones anteriores, inclúyanse  $N_E$  ecuaciones de la forma

$$A_{n,n} \psi_n + \partial \theta_n / \partial t = B_n, \text{ con } A_{n,n} = 1, \partial \theta_n / \partial t = 0 \text{ y } B_n = \psi_n, \quad (3.21)$$

asociadas a cada uno de los nodos exteriores; así, se alcanza la forma matricial

$$[A]_{N \times N} \{\psi\}_N + \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} \right\}_N = \{B\}_N \quad (3.22)$$

Las nuevas ecuaciones para los nodos de la frontera representan el hecho de que, debido a la condición de Dirichlet, la presión de poros no cambia en estos puntos durante el periodo de simulación.

### 3.3.2.2. Condiciones de Neumann

Las condiciones de Neumann en el caso particular del problema de flujo en medio poroso, consisten en la prescripción del flujo específico perpendicular a través de cierto subconjunto de la frontera que se denomina  $\Gamma_N$ . Se iniciará el análisis de este tipo de condiciones de frontera limitándose a dominios regulares, y a continuación se explicará porqué los dominios irregulares han sido excluidos en general del modelo de solución mediante diferencias finitas.

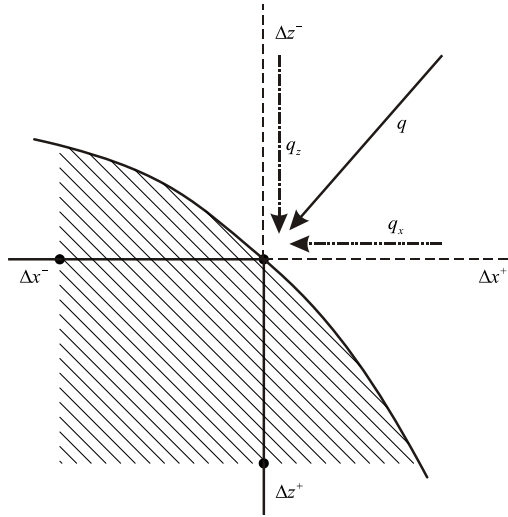
Un nodo de la discretización que pertenezca al subconjunto de frontera  $\Gamma_N$  está sometido a una presión de poros variable en el tiempo. Para determinar esta variación, es necesario escribir una ecuaciones en diferencias similar a (3.11) asociada a este nodo, que tenga en cuenta la magnitud y dirección del flujo específico a través de él. La frontera de un dominio regular está compuesta exclusivamente por nodos regulares externos, como el de la Figura 3.7.

El nodo externo en cuestión está sometido a cierto flujo específico perpendicular a la frontera, el cual puede descomponerse en sus componentes coordinas. Para escribir la aproximación en diferencias del término espacial de la ecuación de Richards, ya no es posible utilizar la fórmula de diferencias centrada en  $(i, j)$ , pues como se puede observar, hay algunas direcciones hacia las que no existe vecindad para un nodo externo. Una alternativa para esta situación es utilizar diferencias hacia delante o hacia atrás, según sea el caso, siendo conocidas las componentes del flujo en las direcciones coordinadas.

La Figura 3.8 muestra una clasificación de los nodos regulares externos en 8 tipos, según su ubicación respecto a sus vecinos. Esta clasificación permite al algoritmo de solución saber cómo escribir la ecuación en diferencias para los nodos externos en los cuales la presión puede variar. Los nodos tipos 1 a 4 pertenecen a una frontera paralela a los ejes coordinados, por tanto el vector flujo específico a través de estos es también paralelo a

alguno de estos ejes y no necesita ser descompuesto. Los nodos tipo 5 a 8 están sometidos a vectores de flujo oblicuos, los cuales deben ser descompuestos en sus componentes coordenadas.

**Figura 3.7.** Situación general de un nodo regular externo



Para ilustrar la construcción de la ecuación en diferencias, considérense los nodos tipo 1, 5 y 6, que comparten la misma situación en la dirección  $z$  (no tienen vecino en  $z^-$ ). La aproximación de la derivada espacial del flujo en estos casos es

$$\frac{\partial q}{\partial z} = \frac{q_z|_{(i,j+1/2)} - q_z|_{(i,j)}}{\Delta z^+ / 2}$$

Esta aproximación se realizó usando la fórmula de diferencias hacia delante con incremento  $\Delta z^+ / 2$  entre  $(i, j+1/2)$  e  $(i, j)$ . Utilizando la aproximación en diferencias del flujo a medio intervalo, se obtiene finalmente

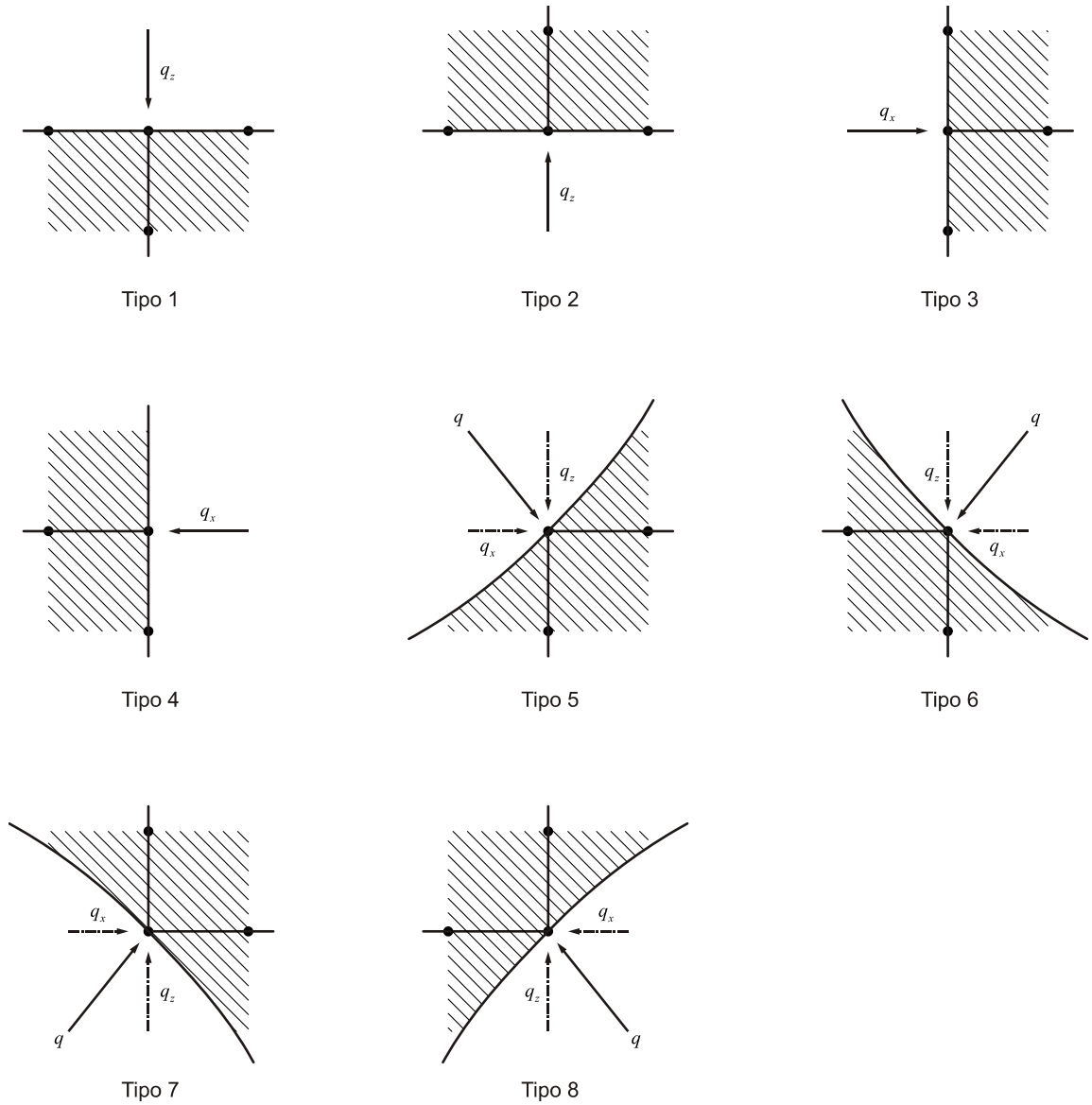
$$\frac{\partial q}{\partial z} = \frac{2}{\Delta z^+} \left[ -K_{i,j+1/2} \left( \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z^+} \right) + K_{i,j+1/2} - q_z|_{(i,j)} \right] \quad (3.23)$$

Se puede proceder de manera similar para las demás situaciones en cada dirección:

Para los nodos tipo 2, 7 y 8:

$$\frac{\partial q}{\partial z} = \frac{2}{\Delta z^-} \left[ q_z|_{(i,j)} + K_{i,j-1/2} \left( \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta z^-} \right) - K_{i,j-1/2} \right] \quad (3.24)$$

**Figura 3.8.** Clasificación de nodos regulares externos



Para los nodos tipo 3, 5 y 7:

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{2}{\Delta x^+} \left[ -K_{i+1/2,j} \left( \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^+} \right) + K_{i+1/2,j} - q_x|_{(i,j)} \right] \quad (3.25)$$

Para los nodos 4, 6 y 8:

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{2}{\Delta x^-} \left[ q_x|_{(i,j)} + K_{i-1/2,j} \left( \frac{\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^-} \right) - K_{i-1/2,j} \right] \quad (3.26)$$

A partir de las expresiones (3.24) a (3.26), se obtiene la ecuación en diferencias que gobierna el comportamiento del nodo externo en cuestión. Por ejemplo, si dicho nodo es del tipo 1, la ecuación toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial z} = & -\frac{1}{\Delta x^m} \left[ -K_{i+1/2,j} \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^+} + K_{i-1/2,j} \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{\Delta x^-} \right] \\ & -\frac{2}{\Delta z^+} \left[ -K_{i,j+1/2} \left( \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z^+} \right) + K_{i,j+1/2} - q_z|_{(i,j)} \right] \end{aligned}$$

Reorganizando y agrupando factores comunes,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_n}{\partial t} = -\nabla q = & \left( \frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} \right) \psi_{i+1,j} + \left( \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} \right) \psi_{i-1,j} + \left( \frac{2K_{i,j+1/2}}{\Delta z^+ \Delta z^+} \right) \psi_{i,j+1} \\ & + \left( -\frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} - \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} - \frac{2K_{i,j+1/2}}{\Delta z^+ \Delta z^+} \right) \psi_{i,j} - \frac{2}{\Delta z^+} \left( K_{i,j+1/2} - q_z|_{(i,j)} \right) \end{aligned}$$

Esta expresión puede escribirse de manera similar a la ecuación (3.11) como

$$A_{i+1,j} \psi_{i+1,j} + A_{i-1,j} \psi_{i-1,j} + A_{i,j+1} \psi_{i,j+1} + A_{i,j-1} \psi_{i,j-1} + A_{i,j} \psi_{i,j} + \frac{\partial \theta_{i,j}}{\partial t} = B_{i,j} + Q_{i,j}, \quad (3.27)$$

donde los coeficientes están dados por

$$A_{i+1,j} = -\frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+}$$

$$A_{i-1,j} = -\frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-}$$

$$A_{i,j+1} = -\frac{2K_{i,j+1/2}}{\Delta z^+ \Delta z^+}$$

$$A_{i,j-1} = 0$$

$$\begin{aligned} A_{i,j} = & -\left( A_{i+1,j} + A_{i-1,j} + A_{i,j+1} + A_{i,j-1} \right) \\ = & \frac{K_{i+1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^+} + \frac{K_{i-1/2,j}}{\Delta x^m \Delta x^-} + \frac{2K_{i,j+1/2}}{\Delta z^+ \Delta z^+} \end{aligned}$$

$$B_{i,j} = -\frac{2}{\Delta z^m} K_{i,j+1/2}$$

$$Q_{i,j} = \frac{2}{\Delta z^+} q_z|_{(i,j)}$$

La ecuación (3.27) es, como la (3.11), una fórmula de 5 puntos.

En general, es posible escribir una ecuación como la (3.27) para cualquier tipo de nodo externo, teniendo cuidado de variar los coeficientes según sea el caso. Obsérvese que se ha incluido un nuevo término,  $Q_{i,j}$ , el cual incluye la magnitud del flujo específico prescrita para el nodo  $(i, j)$ .

Habiendo estudiado el manejo de cada tipo de condición de frontera, se discutirá ahora el ensamblaje definitivo del sistema de ecuaciones diferenciales. Supóngase de nuevo un dominio regular con  $N = N_I + N_E$  nodos en total, de los cuales  $N_I$  son internos y  $N_E$  son externos. Para cada uno de los nodos internos se escribe una ecuación como la (3.11), y para cada nodo externo se escribe una ecuación como la (3.21) si está sometido a una condición de Dirichlet, o como la (3.27) si está sometido a una condición de Neumann. En general, el sistema de ecuaciones queda como

$$[A]_{N \times N} \{\psi\} + \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} \right\} = \{B\}_N + \{Q\}_N, \quad (3.28)$$

con  $\{\psi\} = (\psi_1, \dots, \psi_N)^T$  y  $\{\partial \theta / \partial t\} = (\partial \theta_1 / \partial t, \dots, \partial \theta_N / \partial t)^T$ . La matriz de coeficientes  $[A]$  se conoce como *matriz de rigidez* o *de conductancia*. La ecuación (3.28) es la formulación definitiva para dominios regulares de la solución numérica del problema de flujo usando diferencias finitas.

El porqué de la no exclusión de los dominios irregulares del presente modelo numérico resulta evidente luego del estudio de las condiciones de Neumann. Las ventajas de tener una frontera compuesta exclusivamente por nodos regulares externos son:

- Es posible escribir una ecuación como la (3.27) para cualquier tipo de nodo regular externo. La variación de los coeficientes en esta expresión es fácil de controlar y está limitada a los 8 casos que se han mencionado anteriormente.
- La similitud entre las ecuaciones (3.27) y (3.11) es evidente, lo que permite asegurar que todo nodo regular, sea interno o externo, tiene relacionada una ecuación esencialmente del mismo tipo.
- Las dos características anteriores facilitan el ensamblaje del sistema de ecuaciones (3.28), y le otorgan propiedades que facilitan significativamente su manejo, tal como se estudiará en secciones siguientes.

La situación de los nodos irregulares es más complicada dado que, como sólo tienen un vecino en la discretización, no es posible aproximar las derivadas espaciales de manera tan sencilla como las ecuaciones (3.23) a (3.26). Es posible, aún así, escribir aproximaciones como las planteadas en Nieves y Domínguez (2000) o Forsythe y Wasow (1960), pero claro está, sin poder conservar ninguna de las 3 características de las fronteras regulares.

### 3.3.3. Estructura de las matrices de coeficientes

La forma de las ecuaciones diferenciales ordinarias que componen el sistema (3.28), y la manera cómo se relacionan unas a otras, le otorgan a la matriz de coeficientes  $[A]$  algunas propiedades que se pueden explotar a favor para facilitar su solución. De estas características, las tres más importantes son:

- Simetría: La matriz  $[A]$  es simétrica, esto es

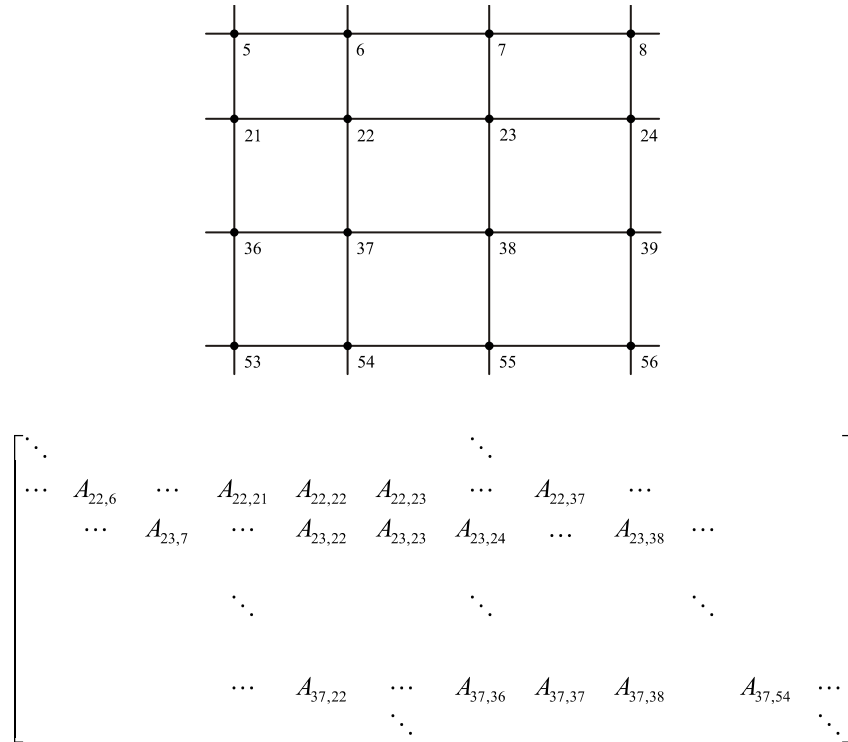
$$A_{ij} = A_{ji}, \text{ para todo } i, j.$$

Esta propiedad es una consecuencia de la forma como se han definido los elementos de  $[A]$  en las ecuaciones (3.12) a (3.16).

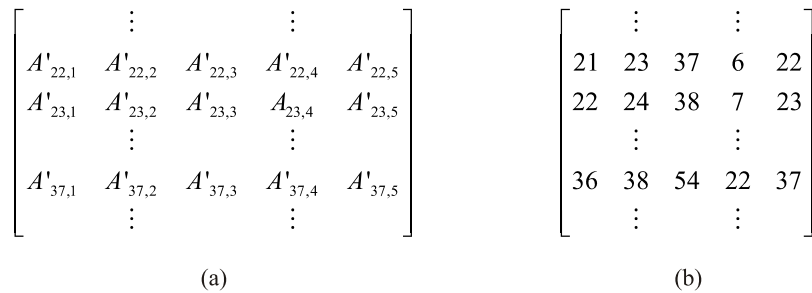
- Definida positiva: Dado que los elementos de  $[A]$  son consistentes con la formulación de diferencias finitas, se puede asegurar que esta matriz es definida positiva. Esta propiedad implica que ambas matrices son no singulares, y por tanto invertibles; además, si  $[R]$  es una matriz definida positiva e las dimensiones de  $[A]$ , la matriz  $[M] = \alpha[A] + \beta[R]$  es también definida positiva, con  $\alpha > 0$  y  $\beta > 0$ .
- Esparcida: En cada fila  $i$  de la matriz  $[A]$ , los únicos elementos no nulos son aquellos correspondientes a los vecinos clásicos de  $i$ , tal como puede observarse en la Figura 3.9.

La explicación a este hecho se encuentra en que las ecuaciones que componen el sistema (3.28) son todas fórmulas de 5 puntos, por lo que el número de elementos no nulos por fila es pequeño en comparación al tamaño de la fila. El hecho de que la matriz  $[A]$  tenga un número reducido de elementos no nulos y que la posición de éstos obedezca a propiedades geométricas, hace pensar en métodos alternativos para trabajar con estas matrices sin perder memoria almacenando ceros. Una alternativa es almacenar los elementos de  $[A]$  diferentes de cero en matrices separadas de manera organizada, y aparte almacenar las posiciones de los elementos no nulos en la matriz original. En la Figura 3.10 se puede apreciar una ilustración de esta metodología.

**Figura 3.9.** La estructura de la matriz global y las conectividades entre nodos de la grilla de diferencias finitas



**Figura 3.10.** Metodología de almacenamiento de la matriz de coeficientes



El método consiste en dividir la matriz  $[A]$  en dos matrices,  $[A']$  (Figura 3.9.a) que contiene los coeficientes  $A_{ij}$  no nulos reorganizados, y  $[P_A]$  (Figura 3.9.b). La relación entre la estructura de  $[A]$  y  $[A']$  está dada por

$$A_{i,j} = A'_{i,k}, \text{ con } j = P_{A,i,k}$$

El número de columnas de  $[A]$  y  $[P_A]$  es igual a 5, que es el número máximo de elementos no nulos que tiene una fila de  $[A]$ .

Claramente, almacenar el par  $[A]$  y  $[P_A]$  es mucho menos costoso en términos de memoria que almacenar la matriz completa  $[A]$ , por tanto es la opción que se usará en la presente tesis para trabajar con las matrices de coeficientes.

### 3.3.4. Forma basada en la presión de poros de la Ecuación de Richards

En la sección 2.2.1, se mencionó que era posible escribir la ecuación de Richards exclusivamente en términos de la presión de poros introduciendo el concepto de capacidad específica de humedad. Hasta el momento, toda la formulación del método de diferencias finitas se ha hecho usando la forma mixta de la ecuación de Richards, pero se puede transformar a la forma basada en la presión de manera sencilla. Recuérdese que la derivada temporal de la ecuación de Richards puede ser escrita de manera alternativa como

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

donde  $C(\psi)$  es capacidad específica de humedad. Reemplazando la expresión anterior en (3.28), se llega a

$$[A]_{N \times N} \{\psi\} + [G]_{N \times N} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} = \{B\}_N + \{Q\}_N. \quad (3.29)$$

La matriz  $[G]$ , conocida como *matriz de capacitancia* o *de masa*, es una matriz diagonal cuyos elementos  $G_{ij}$  están dados por

$$G_{ij} = \begin{cases} C(\psi_i) & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.30)$$

El significado físico del elemento  $G_{ii}$  es la variación del contenido de humedad en el área aferente del  $i$ -ésimo nodo por cada unidad de variación de la presión de poros en ese nodo.

### 3.4. INTEGRACIÓN TEMPORAL

La integración del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en (3.28) se realiza reemplazando la derivada temporal por alguna de sus aproximaciones en diferencias finitas y evaluando las matrices y vectores de coeficientes en diferentes tiempos según el esquema que se esté utilizando. En las secciones a continuación se describen tres esquemas de integración temporal posibles:

#### 3.4.1. Esquema 1

La primera metodología de integración temporal resulta de aplicar el esquema de Crank-Nicholson en la ecuación de Richards basada en la presión, esto es, reemplazar la derivada temporal por su equivalente en diferencias finitas centrada en el nivel de tiempo  $j + 1/2$ , y en ese mismo nivel evaluar las aproximaciones de las derivadas espaciales de segundo orden, que en este caso corresponden al producto  $[A]\{\psi\}$ .

Recordando la fórmula de diferencias finitas central,

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|^{j+1/2} = \frac{\psi^{j+1} - \psi^j}{\Delta t_j} + O\left[(\Delta t_j)^2\right]$$

Despreciando el término de error, y reemplazando en (4.39), se llega a

$$([A]\{\psi\})^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1/2} (\{\psi\}^{j+1} - \{\psi\}^j) = \{Q\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2}$$

El producto  $([A]\{\psi\})^{j+1/2}$  se escribe en término de incrementos discretos de tiempo como

$$([A]\{\psi\})^{j+1/2} = \frac{1}{2} ([A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1} + [A]^{j+1/2} \{\psi\}^j)$$

Reemplazando en la expresión anterior, se obtiene

$$\frac{1}{2} ([A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1} + [A]^{j+1/2} \{\psi\}^j) + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1/2} (\{\psi\}^{j+1} - \{\psi\}^j) = \{Q\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2}$$

Finalmente, se despeja el vector de presiones desconocidas  $\{\psi\}^{j+1}$  para obtener la fórmula de integración temporal

$$\left( \frac{1}{2}[A]^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1/2} \right) \{\psi\}^{j+1} = \{\mathcal{Q}\}^{j+1/2} + \{\mathcal{B}\}^{j+1/2} - \left( \frac{1}{2}[A]^{j+1/2} - \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1/2} \right) \{\psi\}^j \quad (3.31)$$

Las matrices y vectores de coeficientes deben ser evaluados en el nivel de tiempo  $j+1/2$ , pero, dado que los valores de  $\psi$  en este nivel son inicialmente desconocidos, debe usarse una fórmula de extrapolación para estimar  $\{\psi\}^{j+1/2}$  a partir de valores anteriores. Una alternativa es la fórmula de extrapolación lineal

$$\{\psi\}^{j+1/2} = \{\psi\}^{j+1/2} + \frac{\Delta t_j}{2\Delta t_{j-1}} \left( \{\psi\}^j - \{\psi\}^{j-1} \right) \quad (3.32)$$

La alta no linealidad del problema de flujo en medio poroso puede manejarse usando una metodología de predicción y corrección. La ecuación (3.32) se utiliza para predecir los valores de presión en el nivel  $j+1/2$ , y la ecuación (3.31) se usa para corregir estos estimados. El criterio de paro de este proceso iterativo es el error relativo en el cálculo de la presión de poros, esto es

$$\varepsilon_r = \max \left| \frac{\psi_n^{j+1,k+1} - \psi_n^{j+1,k}}{\psi_n^{j+1,k+1}} \right| \quad (3.33)$$

Teóricamente, la convergencia se alcanza cuando el estimador  $\varepsilon_r$  se hace igual a cero. Dado que alcanzar este estado puede tomar un número exagerado de iteraciones, se estima que se ha alcanzado la convergencia, se termina el proceso de iteración y se avanza al siguiente nivel temporal, cuando el estimador  $\varepsilon_r$  alcance un valor menor o igual a una tolerancia prescrita  $\varepsilon_{tol}$ . De la misma manera, si no se logra la convergencia de la solución en un número  $k_{max}$  de iteraciones, se para el proceso iterativo.

El procedimiento de cálculo se encuentra explicado con detalle en el algoritmo 3.1.

**Algoritmo 3.1.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 1

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1/2,0}$  usando la ecuación (3.32)
2. Tomar  $k = 0$
3. Reemplazar  $\{\psi\}^{j+1/2,k}$  en (3.31) y calcular  $\{\psi\}^{j+1,k}$
4. Para  $k = 0$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular un nuevo  $\{\psi\}^{j+1/2,k+1}$  usando  $\{\psi\}^{j+1,k}$ , según

$$\{\psi\}^{j+1/2,k+1} = \frac{1}{2} \left( \{\psi\}^{j+1,k} + \{\psi\}^j \right) \quad (3.34)$$

6. Reemplazar  $\{\psi\}^{j+1/2,k+1}$  en (3.31) y calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$
7. Calcular el error relativo según (3.33)
8. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
9. Siguiendo  $k$

### 3.4.2. Esquema 2

Este esquema de integración temporal se basa en la formulación mixta de la ecuación de Richards y la modificación del método iterativo de Picard presentada por Celia et al. (1990). El método iterativo de Picard, a diferencia del esquema basado en la forma mixta de la ecuación de Richards, aproxima la variación del contenido de humedad usando una serie truncada de Taylor. Inicialmente, el contenido de humedad en el nivel  $j+1$ ,  $\theta^{j+1,k+1}$  puede escribirse como una serie truncada de Taylor:

$$\theta_n^{j+1,k+1} = \theta_n^{j+1,k} + \left. \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right|_n^{j+1,k} (\psi_n^{j+1,k+1} - \psi_n^{j+1,k})$$

Restando  $\theta_n^j$  de ambos lados de la ecuación anterior y dividiendo toda la expresión por  $\Delta t_j$ , se llega a

$$\frac{\theta_n^{j+1,k+1} - \theta_n^j}{\Delta t_j} = C_n^{j+1,k} \left( \frac{\psi_n^{j+1,k+1} - \psi_n^{j+1,k}}{\Delta t_j} \right) + \frac{\theta_n^{j+1,k} - \theta_n^j}{\Delta t_j} \quad (3.35)$$

La ecuación anterior da una aproximación en diferencias finitas de la derivada temporal para ser utilizada en la forma mixta de la ecuación de Richards. De nuevo,  $C(\psi)$  es

capacidad específica de humedad. La aproximación de la derivada del contenido de humedad en el nivel temporal  $j+1/2$  usando la fórmula de diferencias central es

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial t} \right|^{j+1/2} = \frac{\theta^{j+1} - \theta^j}{\Delta t_j} + \mathcal{O}[(\Delta t_j)^2]$$

Usando esta expresión y la ecuación (3.35), la aproximación en diferencias finitas central del vector  $\{\partial \theta / \partial t\}$  queda dada por

$$\left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} \right\}^{j+1/2} = \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} (\{\psi\}^{j+1,k+1} - \{\psi\}^{j+1,k}) + \frac{1}{\Delta t_j} (\{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j) \quad (3.36)$$

De manera similar a lo efectuado en la metodología de integración 1, aplicando el esquema de Crank-Nicholson al sistema de ecuaciones diferenciales (3.28), se usa (3.36) para obtener

$$\begin{aligned} [A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} (\{\psi\}^{j+1,k+1} - \{\psi\}^{j+1,k}) + \frac{1}{\Delta t_j} (\{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j) \\ = \{Q\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2} \end{aligned} \quad (3.37)$$

El enfoque utilizado aquí para los términos  $[A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2}$ ,  $\{Q\}^{j+1/2}$  y  $\{B\}^{j+1/2}$  es diferente al usado en el esquema 1. En esta ocasión éstos términos están dados por

$$[A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} ([A]^{j+1} \{\psi\}^{j+1,k+1} - [A]^j \{\psi\}^j) \quad (3.38)$$

$$\{Q\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} (\{Q\}^{j+1,k+1} + \{Q\}^j) \quad (3.39)$$

$$\{B\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} (\{B\}^{j+1,k+1} + \{B\}^j) \quad (3.40)$$

Reemplazando (3.38) en (3.37) y tomando factores comunes, se obtiene a la ecuación de integración temporal

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{2} [A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} = \{Q\}^{j+1/2} - \{B\}^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} \\ - \frac{1}{2} [A]^j \{\psi\}^j - \frac{1}{\Delta t_j} (\{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j), \text{ para } k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.41)$$

Esta ecuación sugiere un proceso de predicción-corrección similar al del esquema integración 1. Inicialmente se hace una estimación de los valores de presión de poros en el nivel  $j+1$  usando la fórmula de extrapolación lineal

$$\{\psi\}^{j+1,0} = \{\psi\}^j + \frac{\Delta t_j}{\Delta t_{j-1}} \left( \{\psi\}^j - \{\psi\}^{j-1} \right) \quad (3.42)$$

Los criterios de paro del proceso iterativo para este esquema, el cual se presenta en detalle en el algoritmo 1.2, son los mismos que para el esquema 1. Para  $j=0$ , se toma  $\{\psi\}^{j+1,0} = \{\psi\}^0$  pues en este nivel no hay valores precedentes con los cuales practicar una extrapolación lineal.

**Algoritmo 3.2.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 2

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,0}$  usando (3.42)
2. Tomar  $k=0$
3. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.41)
4. Para  $k=1$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.41)
6. Calcular el error relativo según (3.33)
7. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
8. Siguiendo  $k$

### 3.4.3. Esquema 3

Este es un esquema de integración completamente implícito basado en la formulación mixta de la ecuación de Richards, esto es, la derivada temporal se aproxima usando diferencias finitas hacia atrás, y las matrices y vectores de coeficientes son evaluados en el nivel de tiempo  $j+1$ . La aproximación en diferencias finitas hacia atrás es

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|^{j+1} = \frac{\psi^{j+1} - \psi^j}{\Delta t_j} + O(\Delta t_j)$$

Usando (3.35), puede escribirse

$$\begin{aligned}
& [A]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k+1} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \left( \{\psi\}^{j+1,k+1} - \{\psi\}^{j+1,k} \right) + \frac{1}{\Delta t_j} \left( \{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j \right) \\
& = \{Q\}^{j+1} + \{B\}^{j+1}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Tomando factores comunes,

$$\begin{aligned}
& \left( [A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} = \{Q\}^{j+1} + \{B\}^{j+1} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} \\
& \quad - \frac{1}{\Delta t_j} \left( \{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j \right)
\end{aligned} \tag{3.44}$$

El algoritmo para la aplicación del método indicado en (3.44) se presenta a continuación

**Algoritmo 3.3.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 3

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,0}$  usando (3.42)
2. Tomar  $k = 0$
3. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.44)
4. Para  $k = 1$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.44)
6. Calcular el error relativo según (3.33)
7. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
8. Siguiente  $k$

En cuanto a lo demás, se procede de manera similar al esquema de integración 2.

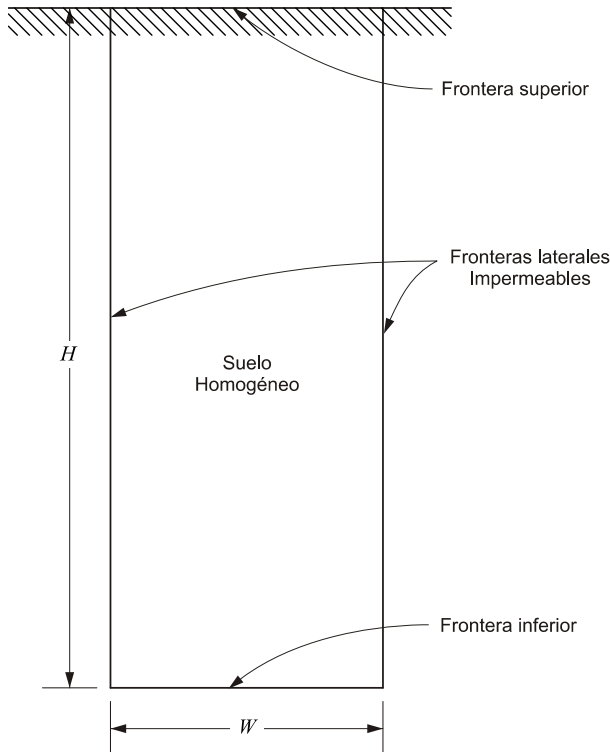
### 3.5. ESFUERZO COMPUTACIONAL Y CONVERGENCIA

Habiendo estudiado en detalle el proceso de integración temporal, resulta de interés observar el proceso de convergencia en cada nivel temporal de la solución de un problema real de flujo. Considérese el problema de flujo bidimensional descrito en la Tabla 3.1, cuya geometría se muestra en la Figura 3.11. Este problema en su forma unidimensional de corresponde a la resuelta por Haverkamp et al. (1977), y es usado comúnmente como modelo de comparación de soluciones numéricas (Bouloutas, 1989).

Se ha obtenido una solución numérica del estado de flujo de este problema usando el esquema de integración 2 y diferentes valores de incremento temporal. El perfil de presión de la columna central de suelo del dominio para  $\Delta t = 7.5$  s, después de 0.3 horas de simulación, se presenta en la Figura 3.12 junto a una solución numérica calculada usando una discretización muy fina (Malla densa), la cual se considera como 'solución exacta' para efectos de comparación. En la Figura 3.13 se muestra, además, la variación temporal de la presión de poros a diferentes profundidades sobre la columna central. Los resultados obtenidos están en buen acuerdo con los obtenidos por Haverkamp et al. (1977) y Bouloutas (1989).

Ahora se procede a evaluar el esfuerzo computacional como función del incremento temporal utilizado en la simulación. El número de iteraciones necesario para alcanzar la convergencia en cada nivel temporal, para diferentes valores de  $\Delta t$ , se ha graficado en la Figura 3.14. De observar estos resultados, resulta evidente que al aumentar el incremento temporal, es en general necesario un mayor número de iteraciones para cumplir el criterio de convergencia y avanzar al nivel temporal siguiente.

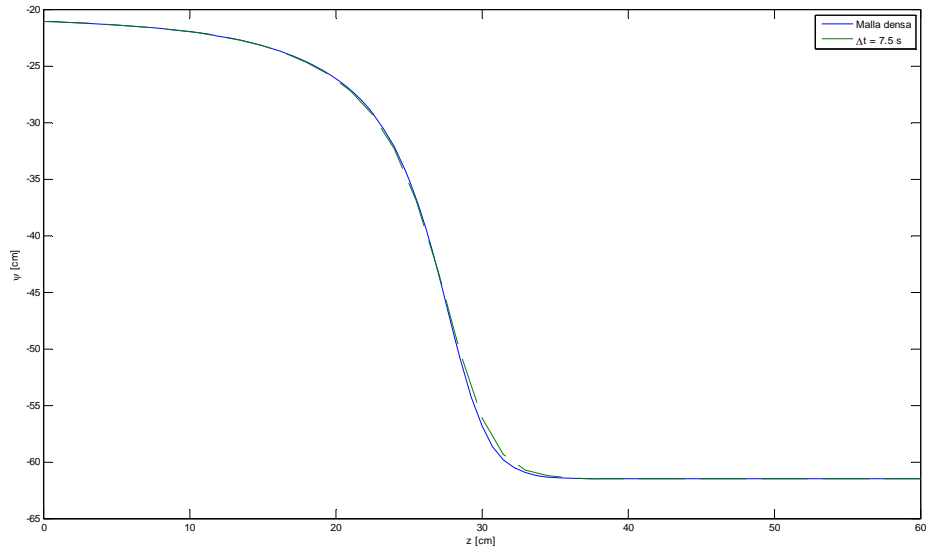
**Figura 3.11.** Geometría del dominio de simulación para las simulaciones 1, 2A y 2B.



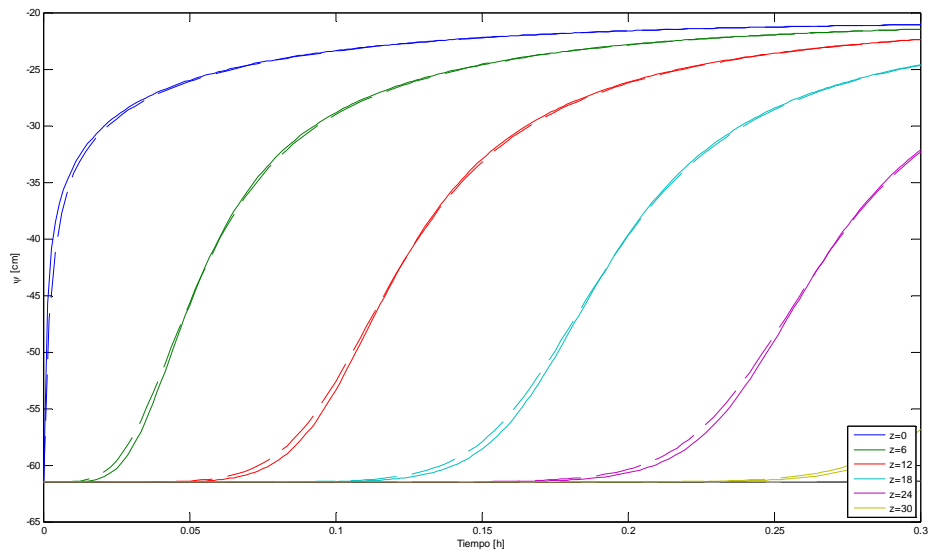
**Tabla 3.1.** Datos de entrada para la simulación 1.

<b>Simulación 1</b>	
Ancho, $W$	40.00 cm
Profundidad, $L$	60.00 cm
Condición inicial	$\psi_0 = -61.50$ cm
Frontera superior	Flujo constante: $q = 13.69$ cm/hora
Frontera inferior	Presión constante: $\psi = -61.50$ cm
Perfil de suelo	Arena Haverkamp
Tiempo máximo de simulación	0.30 horas
$\Delta x$	2.50 cm
$\Delta z$	1.50 cm

**Figura 3.12.** Perfil de presión en la columna central de para la simulación 1, luego de 0.3 horas de infiltración. Método de diferencias finitas



**Figura 3.13.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 1  $\Delta t = 7.5$  s. Método de diferencias finitas. Profundidades en cm



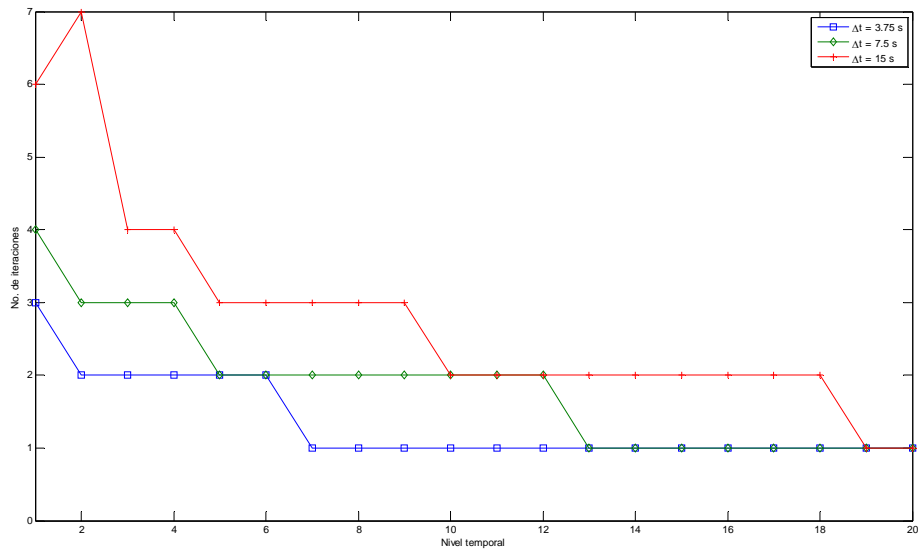
El proceso iterativo de cada nivel temporal, tal como se ha descrito en la Sección 3.4, inicia con una predicción de la presión de poros, con la cual se aplica la fórmula de corrección del esquema de integración utilizado para obtener el primer valor de presión (iteración 0). Este cálculo inicial se mejora usando la fórmula de corrección cuantas veces sea necesario, hasta alcanzar la convergencia. A continuación se analiza el proceso de convergencia del cálculo de la presión de poros en un punto determinado del dominio. El nodo que se va a estudiar es el ubicado en la superficie, sobre la columna central de suelo.

Usando un incremento temporal  $\Delta t$  de 7.5 s (Figura 3.15), el primer valor de presión calculado (iteración 0), tanto para el primer como para el segundo nivel temporal, no está muy lejos de la presión definitiva, y por tanto el proceso de iteración se hace rápido y satisfactorio. Para  $\Delta t = 15$  s (Figura 3.16), en cambio, el cálculo inicial más deficiente hace necesario un mayor número de iteraciones para alcanzar la convergencia. Finalmente, para  $\Delta t = 30$  s, la primera aplicación de la fórmula de corrección arroja un valor de presión positivo, lo cual no tiene sentido físico. Este cálculo deficiente hace inútil la fórmula de corrección, y su aplicación arroja valores de presión claramente errados, tal como se puede apreciar en la Figura 3.17.

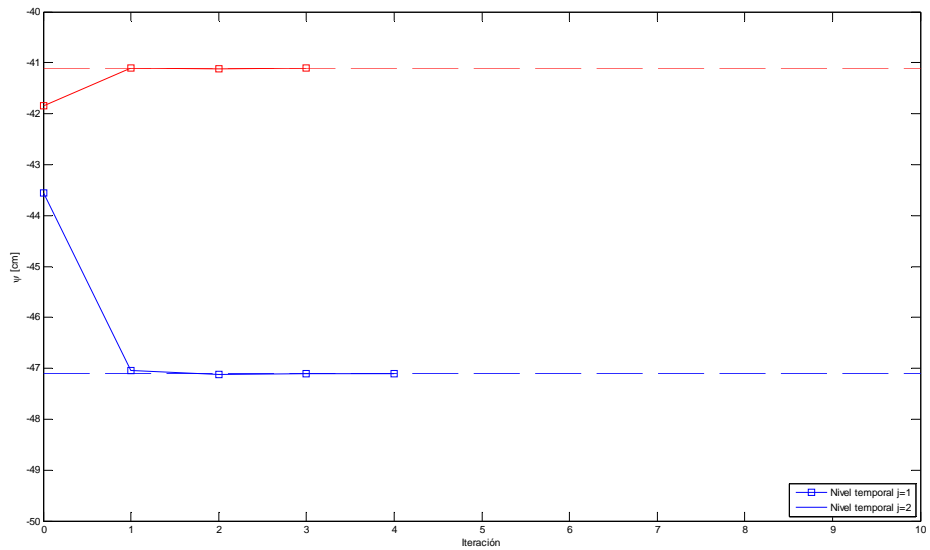
Cuando el valor absoluto de la presión en cualquier punto del dominio llega a ser mayor al máximo del valor absoluto de la lista de presiones  $h_i$  utilizada como descripción del material en la simulación, se hace imposible interpolar la conductividad hidráulica o el contenido de humedad de ese punto, y por tanto la simulación se aborta. Este error se denomina *violación de las presiones límite*, y es la razón por la cual la simulación con  $\Delta t = 30$  s no pudo finalizar con éxito.

Otra variable que puede afectar el proceso de convergencia de la solución es la resolución espacial. Para evaluar su efecto, se ha intentado obtener soluciones numéricas del estado de flujo del problema anterior, esta vez con incrementos espaciales  $\Delta x = 1.25$  cm y  $\Delta z = 0.75$  cm. El esfuerzo computacional invertido en la solución para diferentes valores de incremento temporal se puede apreciar en la Figura 3.18. Comparando las Figuras 3.14 y 3.18, puede observarse que al aumentar la resolución espacial y mantener el incremento temporal constante, el número de iteraciones necesarias para alcanzar la convergencia aumenta; de hecho, aunque con  $\Delta z = 1.5$  cm era posible obtener una solución usando  $\Delta t = 15$  s, esto ya no resulta posible con  $\Delta z = 0.75$  cm.

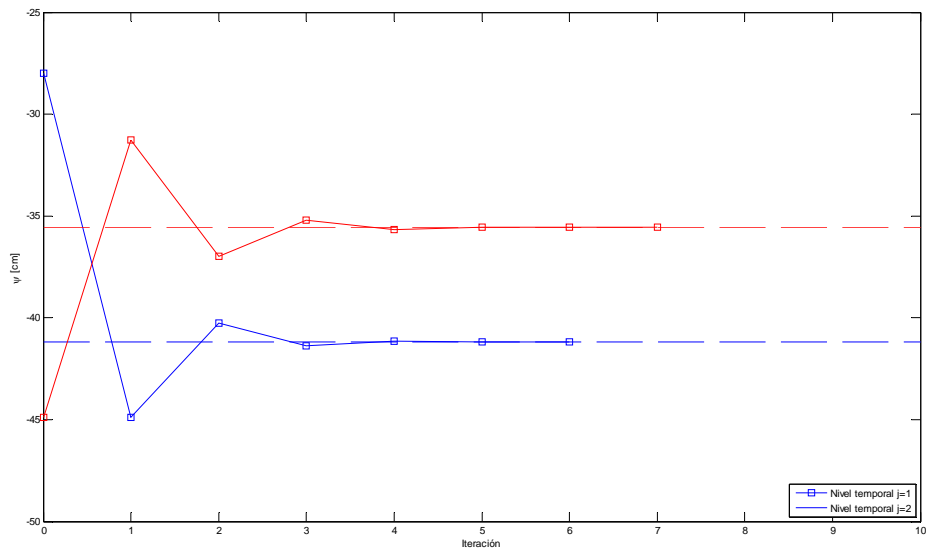
**Figura 3.14.** Número de iteraciones como función del nivel temporal para la Simulación 1, usando el método de diferencias finitas.  $\Delta z = 1.5$  cm. 20 primeros niveles temporales.



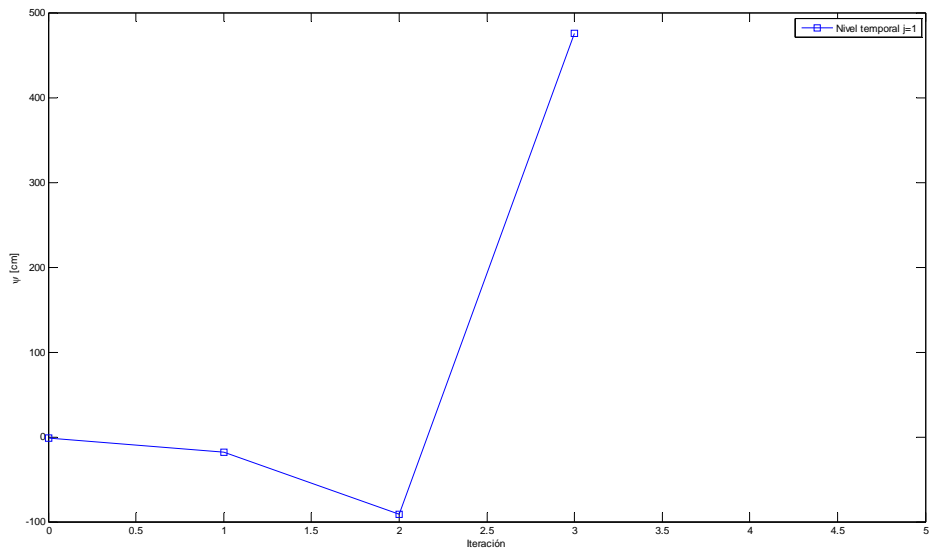
**Figura 3.15.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 1.  $\Delta t = 7.5$  s



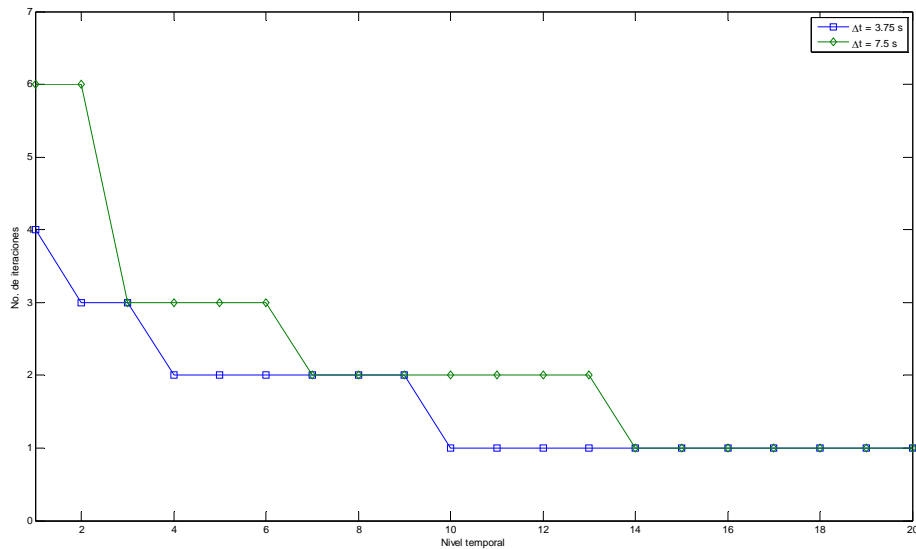
**Figura 3.16.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 1.  $\Delta t = 15$  s



**Figura 3.17.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando el método de diferencias finitas. Simulación 1.  $\Delta t = 30$  s



**Figura 3.18.** Número de iteraciones como función del nivel temporal para la Simulación 1, usando el método de diferencias finitas.  $\Delta z = 0.75$  cm. 20 primeros niveles temporales



La explicación para los efectos anteriores, los cuales, como se verá en la Sección 4.7.1, también se presentan en el método de elementos finitos, radica en la naturaleza del proceso de integración temporal. El esquema 2 de integración, utilizado en todos los cálculos de la presente sección, está basado en el método de Crank-Nicholson, el cual es incondicionalmente estable en el caso de la solución de la ecuación de difusión con coeficientes constantes (Carnahan et al., 1969), pero no necesariamente estable si los coeficientes son variables (Tadjeran, 2007). Lastimosamente, los coeficientes de la ecuación de Richards son altamente variables, y por tanto la estabilidad de la aplicación del esquema 2 (o el esquema 1, también basado en el método de Crank-Nicholson) depende de la relación entre los diferentes parámetros de simulación. Los resultados de esta sección muestran que efectivamente, para garantizar la estabilidad, al menos debe garantizarse que haya cierta relación entre los incrementos espaciales y el incremento temporal. El efecto de los demás parámetros de simulación (e.g., las propiedades hidráulicas de los materiales) en la estabilidad de la solución se reserva para investigaciones futuras.

## 4. MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

El método de elementos finitos es una alternativa al enfoque más tradicional de diferencias finitas para la solución de ecuaciones diferenciales, cuya popularidad se ha extendido a lo largo de las últimas décadas en varias ramas de la ciencia y la ingeniería. Su aplicación trae, en comparación al método de diferencias finitas, varias ventajas y desventajas, e implica un cambio significativo en la forma como se abordan varios de las situaciones que se presentan más comúnmente en la solución de ecuaciones diferenciales. En este capítulo se estudiarán los detalles de la formulación del método y su aplicación al problema de flujo en medio poroso.

### 4.1. INTRODUCCIÓN AL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (MEF)

La solución clásica al problema definido por las ecuaciones (2.4) a (2.11) es una función  $\psi$  que satisface la ecuación (2.4) para todo  $x \in \Omega$  y  $t \in (0, T)$ , las condiciones iniciales para todo  $x \in \Omega$ , y las condiciones de frontera para todo  $x \in \Gamma$ . Esta formulación del problema se conoce como *formulación fuerte*, pues implica condiciones de continuidad excesivamente restrictivas sobre la solución verdadera. Una alternativa a este enfoque es la que se conoce como *formulación débil*, la cual es presentada a continuación:

La ecuación (2.4) puede ser rescrita de la forma

$$L(\psi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - K_{i3} \right) - \frac{\partial \theta}{\partial t} = 0 \quad (4.1)$$

donde  $L(\psi)$  es un operador diferencial cuasilineal definido en  $\Omega$ . La no linealidad de  $L$  radica en que  $K_{ij}$  es una función de  $\psi$ , pero con el fin de poder solucionar el problema, se ignorará momentáneamente este hecho. Supóngase que  $\psi(x_i, t)$ , la función que desea obtenerse, es una función de cuadrado integrable que pertenece a cierto espacio de Hilbert  $V$  de infinitas dimensiones; sea además  $\xi$  una función arbitraria de  $V$ , entonces, multiplicando  $L(\psi)$  por  $\xi$  e integrando sobre  $\Omega$ , se tiene

$$\int_{\Omega} L(\psi) \xi d\Omega = 0 \quad (4.2)$$

Puede asegurarse que si una función satisface (4.2) para todo  $\xi$ , entonces la ecuación (2.4) se satisface para todo el dominio  $\Omega$ . Para probar la validez de la afirmación anterior, supóngase que  $L(\psi) \neq 0$  para todo o parte del dominio, por tanto es posible encontrar un  $\xi$  tal que la ecuación (4.2) sea diferente de cero, lo cual prueba el punto en cuestión.

La formulación débil del problema de flujo en medio poroso puede entonces escribirse como: Encuéntrase un  $\psi \in V$  tal que se cumpla (4.2) para todo  $\xi \in V$ . Esta notación es común en el estudio de ecuaciones diferenciales parciales y su solución mediante elementos finitos.

En virtud de la fórmula de Green es posible escribir la ecuación (4.2) de la forma:

$$\int_{\Omega} C(\xi) D(\psi) d\Omega + \int_{\Gamma} E(\xi) F(\psi) d\Gamma = 0 \quad (4.3)$$

Los operadores diferenciales  $C, D, E$  y  $F$  contienen derivadas de orden inferior al de las derivadas de  $L$ , lo cual implica que para que las integrales en (4.3) sean finitas se requiere un grado menor de continuidad de parte de  $\psi$  que el exigido por la formulación fuerte (Zienkiewicz y Taylor, 2000).

## 4.2. EL MÉTODO DE GALERKIN

La solución al problema (4.2) pertenece al espacio  $V$  de dimensiones infinitas, y es en general imposible de obtener. Para solucionar esta dificultad de manera práctica, se escribe la secuencia de subespacios  $\{V^N\}_{N=1}^{\infty} \subset V$ ,  $V^N \subset V^{N+1}$  que llena el espacio  $V$  en el límite. En vez de intentar solucionar (4.2) en  $V$ , se puede obtener una solución exacta en  $V^N$ . Esto nos resulta en una secuencia de soluciones  $\{\psi^N\}_{N=1}^{\infty}$ ,  $\psi^N \in V^N$  que converge a la solución exacta de (4.2) (Šolin, 2006). El problema escrito en estos términos se conoce como problema discreto de Galerkin.

El método de Galerkin establece que puede encontrarse una aproximación de  $\psi(x_i, t)$  de la forma

$$\psi^N(x_i, t) = \psi_n(t) \xi_n(x_i), \text{ para } n = 1, 2, \dots, N \quad (4.4)$$

donde  $\{\xi_n(x_i)\}_{n=1}^N$  es un conjunto de  $N$  funciones de coordenadas linealmente independientes. La solución aproximada  $\psi^N(x_i, t)$  debe pertenecer a un subespacio  $N$ -dimensional de  $V$ ,  $V^N$ , cuyos elementos satisfacen todos los criterios de continuidad y las condiciones de frontera del problema. La ecuación (4.4) a su vez implica que cada elemento de  $V^N$  puede ser escrito como una combinación lineal de todos los  $\xi_n$ . Por tanto, las funciones  $\{\xi_n(x_i)\}_{n=1}^N$  deben ser elegidas de modo que constituyan un conjunto completo que cubra todo el subespacio  $V^N$ , por tanto formando una base para  $V^N$ . (Neuman, 1973).

A continuación presentamos una descripción general de la estrategia de solución del método de Galerkin. El problema discreto de Galerkin para el caso en estudio es:

$$\int_{\Omega} L(\psi^N) \xi d\Omega = 0 \quad (4.5)$$

Dado que la función arbitraria  $\xi$  pertenece a  $V^N$ , puede escribirse como una combinación lineal:

$$\xi = \beta_n \xi_n, \text{ para } n = 1, 2, \dots, N \quad (4.6)$$

Reemplazando  $\xi$  por las funciones base  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$  en (4.5), tiénesse el sistema de ecuaciones

$$\Phi_m(\psi^N) = \int_{\Omega} L(\psi^N) \xi_m d\Omega = 0, \text{ para } m = 1, 2, \dots, N \quad (4.7)$$

La implicación de (4.5) a (4.7) es fácil de observar pues toda función base  $\xi_m \in V^N$  es un caso especial del caso general  $\xi \in V^N$ . La implicación en el sentido contrario también es válida. Multiplicando la ecuación (4.7) por  $\beta_m$ , se obtiene

$$\int_{\Omega} L(\psi^N) \beta_m \xi_m d\Omega = 0$$

Sumando la ecuación anterior para todo  $m$ , se vuelve a obtener la ecuación (4.5):

$$\int_{\Omega} L(\psi^N) \beta_m \xi_m d\Omega = \int_{\Omega} L(\psi^N) \xi d\Omega = 0$$

La estrategia de solución es escribir (4.7) para todo  $m$ , de modo que se tiene un sistema de ecuaciones donde las incógnitas son los  $\beta_m$ . Resueltos estos valores, se combinan con las funciones de coordenadas según (4.4) para obtener la solución al problema discreto de Galerkin.

### 4.3. DISCRETIZACIÓN DE LA REGIÓN DE FLUJO

La interpretación física del método de Galerkin, es el cálculo de una aproximación a la solución de la ecuación de flujo, mediante la combinación lineal de la variación de la presión en  $N$  puntos o *nodos* del dominio  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$  y  $N$  funciones de coordenadas asociadas a los nodos. Estos nodos se unen formando una malla compuesta por polígonos denominados *elementos finitos*, con nodos en cada una de sus esquinas.

Considérese un dominio acotado bidimensional  $\Omega$  con una frontera Lipschitz-continua  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ . Para poder obtener una solución aproximada del problema (4.2) debe hacerse una serie de aproximaciones que se alejan de la rigurosidad del esquema de trabajo de Galerkin. Dichas aproximaciones se encuentran descritas en detalle en (Šolin, 2006):

### 1. Aproximación del dominio

El dominio  $\Omega$  es aproximado por el dominio poligonal  $\Omega_h$  (Fig. 4.1). Como puede observarse, Puede presentarse que  $\Omega_h \neq \Omega$  e incluso  $\Omega_h \not\subset \Omega$ , lo que significa que la función solución no estará definida en lugares donde va a ser aproximada o evaluada.

### 2. Malla de elementos finitos

El dominio  $\Omega_h$  se divide en una malla  $T_{h,p}$  compuesta por un número finito de subdominios abiertos poligonales  $E_1, \dots, E_M$ , o *elementos finitos*, tales que

$$\bigcup_{i=1}^M E_i = \Omega_h$$

y  $E_i \cap E_j = \emptyset$  para  $i \neq j$ . Dicha malla se dice regular si cada intersección  $\bar{E}_i \cap \bar{E}_j = \emptyset$ ,  $i \neq j$  es bien un lado compartido o un vértice único. Ejemplos de dicha partición se puede observar en la Figura 4.2.

### 3. Aproximación de las condiciones de borde

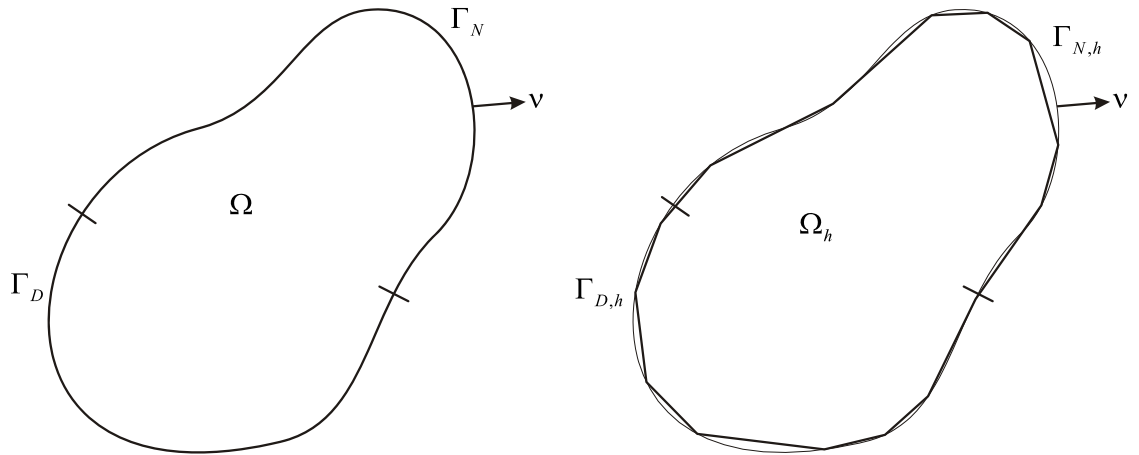
Después de reemplazar el dominio  $\Omega$  por el dominio poligonal  $\Omega_h$ , las fronteras originales  $\Gamma_D, \Gamma_N$  en las que las condiciones de borde habían sido prescritas se perdieron. Para suplir esto, hace falta transferir las condiciones de borde a las contrapartes poligonales  $\Gamma_{D,h}, \Gamma_{N,h}$  sin violar la física detrás del fenómeno analizado.

### 4. Aproximación del espacio $V$

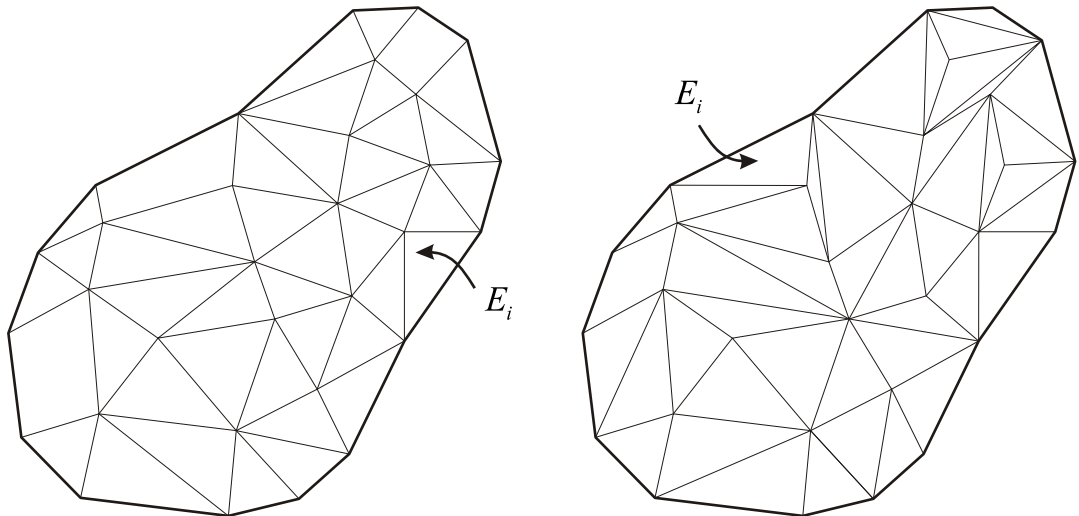
El espacio  $V(\Omega)$  debe ser aproximado por un espacio polinomial  $V_{h,p}(\Omega_h)$  de acuerdo con la aproximación  $\Omega_h \approx \Omega$ . De la misma manera, las integrales definidas sobre  $\Omega$  y  $\Gamma$  deben escribirse sobre sus contrapartes aproximadas.

Otros conceptos relacionados con la discretización de la región de flujo se pueden observar en la Figura 4.3. Todo nodo  $n$  de la malla de elementos finitos tiene relacionada un *Área aferente*, que no es más que la unión de las áreas de cada elemento al cual  $n$  pertenece, definidas como el lugar geométrico de los puntos del dominio de flujo, que están más cercanos a  $n$  que a cualquiera de los otros nodos que componen el elemento. De manera similar, todo nodo  $n$  que hace parte de  $\Gamma_{N,h}$ , tiene relacionada una *Frontera propia*. Dicha frontera propia es la unión de las fronteras exteriores de los elementos a los cuales  $n$  pertenece, y sirve para definir el aporte del nodo  $n$  al flujo hacia adentro o hacia fuera del dominio de flujo.

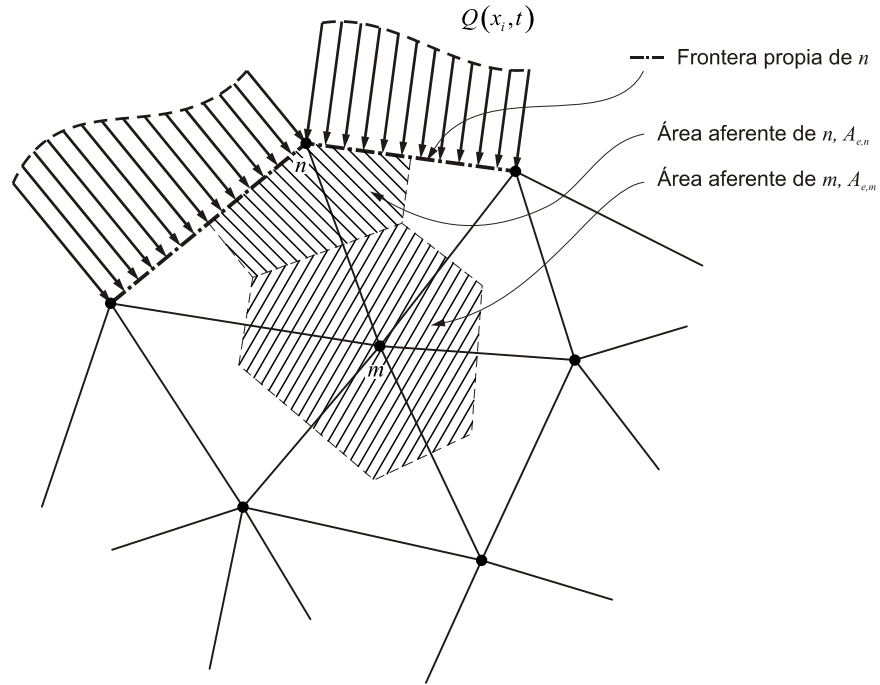
**Figura 4.1.** Aproximación del dominio



**Figura 4.2.** Partición del dominio en elementos finitos



**Figura 4.3.** Frontera propia y área aferente de nodos de la malla de elementos finitos



#### 4.4. FUNCIONES DE FORMA

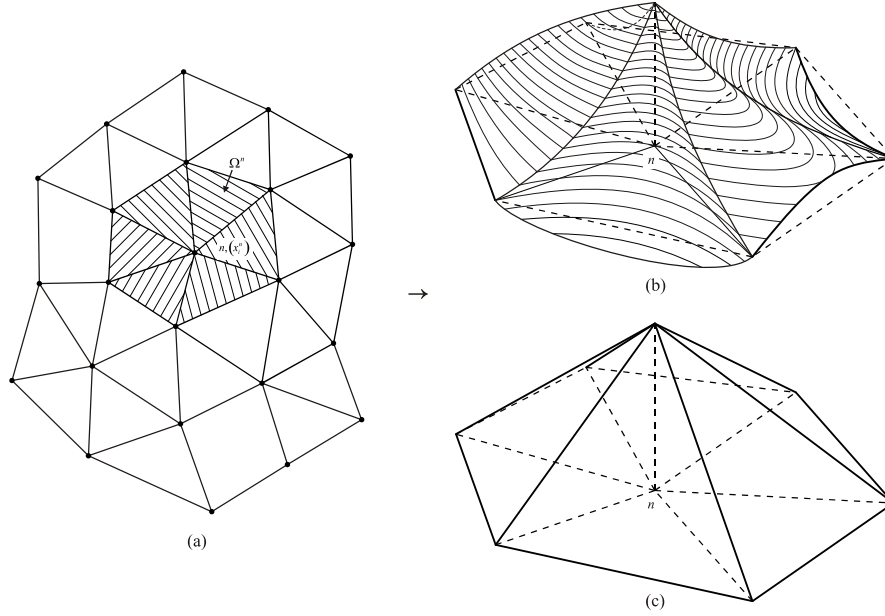
Analícese un nodo en particular  $n$  de la malla  $T_{h,p}$  de coordenadas espaciales  $x_i^n$ . Dicho nodo tiene asociada una subregión de  $\bar{\Omega}$ ,  $\bar{\Omega}^n$ , compuesta por todos los elementos vecinos a  $n$  (Fig. 4.4a), y una función de coordenadas  $\xi_n(x_i)$  que cumple las relaciones

$$\begin{aligned} \xi_n(x_i^m) &= \delta_{nm} \text{ para todo } x_i^m \text{ en } \bar{\Omega} \\ \xi_n(x_i^m) &= 0 \text{ para todo } x_i^m \text{ no en } \bar{\Omega}^n \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde  $\delta_{nm}$  es el delta de Kronecker, esto es,  $\delta_{nm} = 1$  si  $n = m$  y  $\delta_{nm} = 0$  si  $n \neq m$ . Unas formas posibles de  $\xi_n(x_i)$  para el caso bidimensional se puede apreciar en la Figuras 1.4b y 1.4c. La finalidad de las funciones de coordenadas se puede apreciar observando la ecuación (4.4). Es claro que ésta ecuación sirve como una fórmula de interpolación de  $\psi^N$  en  $\bar{\Omega}$ , tal como se puede apreciar en la Figura 4.5.

La función de coordenadas asociada a un nodo puede pensarse en términos de la unión de varias funciones de coordenadas elementales  $\xi_n^e$ , cada una asociada no solo al nodo a cuestión sino a los elementos finitos a los que pertenece el nodo. Esto es, si el nodo  $n$  pertenece a  $r$  elementos, tenemos entonces

Figura 4.4. Funciones de forma para el caso bidimensional



$$\xi_n = \bigcup_{e=1}^r \xi_n^e \quad (4.9)$$

La relación anterior es ilustrada en la Figura 4.6. Las funciones de coordenadas elementales cumplen también con la propiedad delta, esto es,

$$\begin{aligned} \xi_n^e(x_i^m) &= \delta_{nm} \text{ para todo } x_i^m \text{ en } \bar{E}^e \\ \xi_n^e(x_i^m) &= 0 \text{ para todo } x_i^m \text{ no en } \bar{E}^e \end{aligned} \quad (4.10)$$

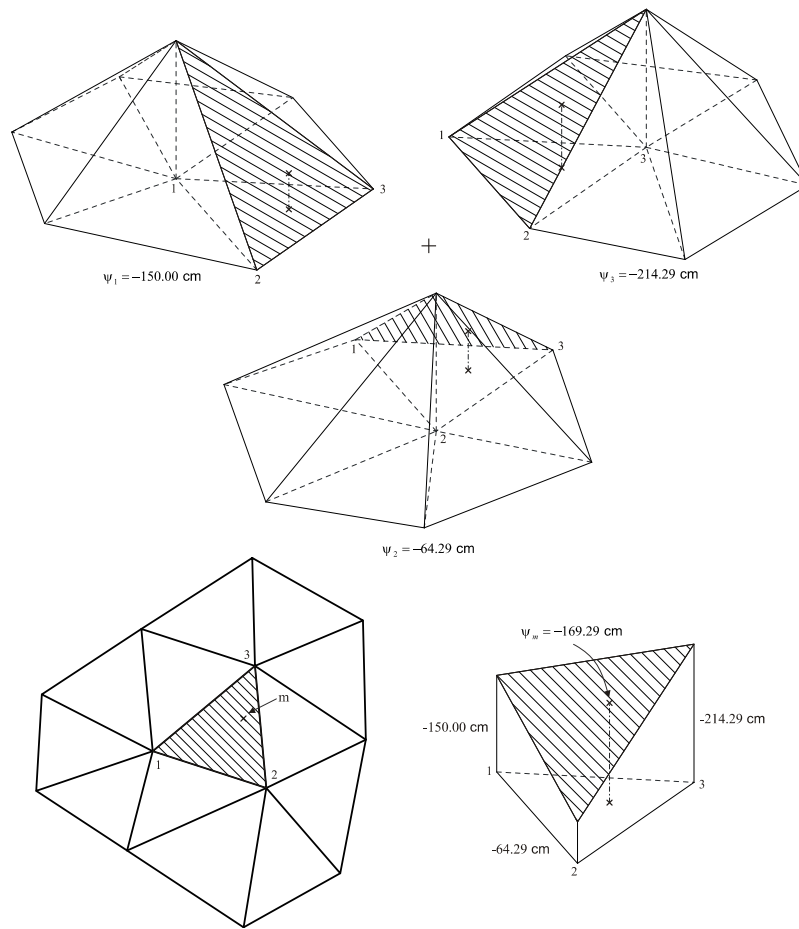
La ecuación (4.7) puede escribirse ahora en términos de elementos finitos utilizando la relación (4.9):

$$\begin{aligned} \Phi_m(\psi^N) &= \Phi_m(\psi_n \xi_n) = \Phi_m\left(\psi_n \bigcup_{e=1}^r \xi_n^e\right) \\ \Phi_m(\psi^N) &= \sum_{e=1}^r \Phi_m^e(\psi_n \xi_n^e) = 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

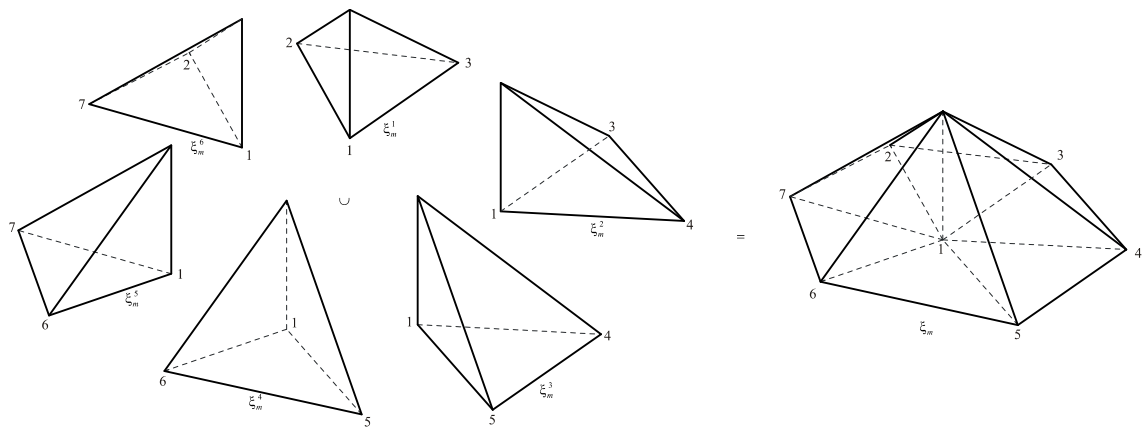
donde

$$\Phi_m^e(\psi_n \xi_n^e) = \int_{E^e} L(\psi_n \xi_n^e) \xi_m^e d\Omega \quad (4.12)$$

**Figura 4.5.** Funciones de coordenadas como fórmula de interpolación



**Figura 4.6.** Funciones de coordenadas como la combinación de funciones de coordenadas elementales



## 4.5. IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

### 4.5.1. Formulación general

Para resolver (4.11), hace falta desarrollar las integrales indicadas. La variación de la conductividad hidráulica dentro de un elemento se aproxima de manera similar a la presión  $\psi$ , usando las mismas funciones de coordenadas:

$$K_{ij} = K_{ij,l} \xi_l^e \quad (4.13)$$

donde  $l$  representa las esquinas del elemento finito en cuestión. De la misma manera, el contenido de humedad volumétrico puede escribirse como una combinación lineal usando como base las funciones de coordenadas  $\xi_n$

$$\theta^N(x_i, t) = \theta_n(t) \xi_n(x_i), \text{ para } n=1, 2, \dots, N \quad (4.14)$$

Reemplazando estas aproximaciones en (4.12), se llega a la expresión

$$\Phi_m^e(\psi^N) = \int_{E^e} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_j} - K_{i3} \right) - \frac{\partial(\theta_n \xi_n^e)}{\partial t} \right] \xi_m^e d\Omega = 0 \quad (4.15)$$

donde  $\theta^N = \theta(\psi^N)$ . Asumimos que el material es isotrópico, esto es,  $K_{ii} = K$ ,  $K_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ , de modo que algunos de los términos de la integral se eliminan y las únicas derivadas de segundo orden que permanecen son aquellas con  $i = j$ , por tanto,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_j} - K_{i3} \right) = K_l \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \xi_l^e \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right) - K \frac{\partial \xi_l^e}{\partial x_3}$$

Refiriéndose a la derivada de una multiplicación, se puede escribir

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \xi_m^e \xi_l^e \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right) = \xi_l^e \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_i} \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} + \xi_m^e \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \xi_l^e \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right)$$

$$K_l \frac{\partial}{\partial x_3} (\xi_m^e \xi_l^e) = K_l \xi_l^e \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_3} + K_l \xi_m^e \frac{\partial \xi_l^e}{\partial x_3}$$

Reemplazando en las expresiones anteriores,

$$\int_{E^e} K_l \xi_m^e \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right) d\Omega = \int_{E^e} K_l \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \xi_m^e \xi_l^e \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right) d\Omega - \int_{E^e} K_l \xi_l^e \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_i} \frac{\partial(\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} d\Omega$$

$$\int_{E^e} K_l \xi_m \frac{\partial \xi_l^e}{\partial x_3} d\Omega = \int_{E^e} K_l \frac{\partial}{\partial x_3} (\xi_m \xi_l^e) d\Omega - \int_{E^e} K_l \xi_l^e \frac{\partial \xi_m}{\partial x_3} d\Omega$$

Aplicando la fórmula de Green para los primeros términos en la derecha de las expresiones anteriores, se tiene

$$\int_{E^e} K_l \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \xi_m \xi_l^e \frac{\partial (\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \right) d\Omega = \int_{\Gamma^e} K_l \xi_l^e \xi_m \frac{\partial (\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_i} \hat{x}_i d\Gamma$$

$$\int_{E^e} K_l \frac{\partial}{\partial x_3} (\xi_m \xi_l^e) d\Omega = \int_{\Gamma^e} K_l \xi_l^e \xi_m \hat{x}_3 d\Gamma$$

donde  $\hat{x}_i$  es un vector unitario en la dirección  $x_i$ . Con todas las integrales desglosadas, se reemplaza en (4.15) para llegar a la siguiente expresión, la cual ha sido escrita para el caso bidimensional:

$$\begin{aligned} \Omega_m^e(\psi^N) &= \int_{E^e} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial (\psi_n \xi_n^e)}{\partial x_j} - K_{i3} \right) - \frac{\partial (\theta_n \xi_n^e)}{\partial t} \right] \xi_m^e d\Omega = \\ & \left[ K_l \int_{E^e} \xi_l^e \left( \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_1} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x_1} + \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_3} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x_3} \right) d\Omega \right] \psi_n + \left[ \int_{E^e} \xi_m^e \xi_n^e d\Omega \right] \frac{\partial \theta_n}{\partial t} \\ & + \int_{\Gamma^e} Q(x_i, t) \xi_m^e d\Gamma - K_l \int_{E^e} \xi_l^e \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_3} d\Omega \end{aligned} \quad (4.16)$$

Esta expresión puede ser escrita de manera más compacta:

$$A_{mn}^e \psi_n + F_{mn}^e \frac{\partial \theta_n}{\partial t} = Q_m^e + B_m^e \quad (4.17)$$

donde los coeficientes  $A_{mn}^e$ ,  $F_{mn}^e$ ,  $Q_m^e$  y  $B_m^e$  están dados por

$$A_{mn}^e = K_l \int_{E^e} \xi_l^e \left( \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_1} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x_1} + \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_3} \frac{\partial \xi_n^e}{\partial x_3} \right) d\Omega \quad (4.18)$$

$$F_{mn}^e = \int_{E^e} \xi_m^e \xi_n^e d\Omega \quad (4.19)$$

$$Q_m^e = - \int_{\Gamma^e} Q(x_i, t) \xi_m^e d\Gamma \quad (4.20)$$

$$B_m^e = K_l \int_{E^e} \xi_l^e \frac{\partial \xi_m^e}{\partial x_3} d\Omega \quad (4.21)$$

Los subíndices  $m$  y  $n$  en la ecuación (4.17) representan los nodos del elemento  $e$ . Supóngase que dicho elemento tiene  $s$  nodos numerados de 1 a  $s$ , e introduciendo el vector  $\{\psi\}^e = (\psi_1, \dots, \psi_s)^T$  de funciones de presión de poros  $\psi_n$  en los nodos y el vector  $\{\partial\theta/\partial t\}^e = (\partial\theta_1/\partial t, \dots, \partial\theta_s/\partial t)^T$ , es posible escribir (4.17) de la forma matricial

$$[A]_{s \times s}^e \{\psi\}^e + [F]_{s \times s}^e \left\{ \frac{\partial\theta}{\partial t} \right\}^e = \{Q\}_s^e + \{B\}_s^e \quad (4.22)$$

Sumando la ecuación anterior sobre todos los elementos de la malla, se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$[A]_{N \times N} \{\psi\} + [F]_{N \times N} \left\{ \frac{\partial\theta}{\partial t} \right\} = \{Q\}_N + \{B\}_N \quad (4.23)$$

con  $\{\psi\} = (\psi_1, \dots, \psi_N)^T$  y  $\{\partial\theta/\partial t\} = (\partial\theta_1/\partial t, \dots, \partial\theta_N/\partial t)^T$ . Las semejanzas entre la ecuación (4.23) y la (3.28) saltan a la vista.

La matriz  $[A]$  es conocida como la matriz global de rigidez o de conductancia,  $[F]$  como matriz de capacitancia o de masa, y el vector  $\{Q\} + \{B\}$  como vector de carga.

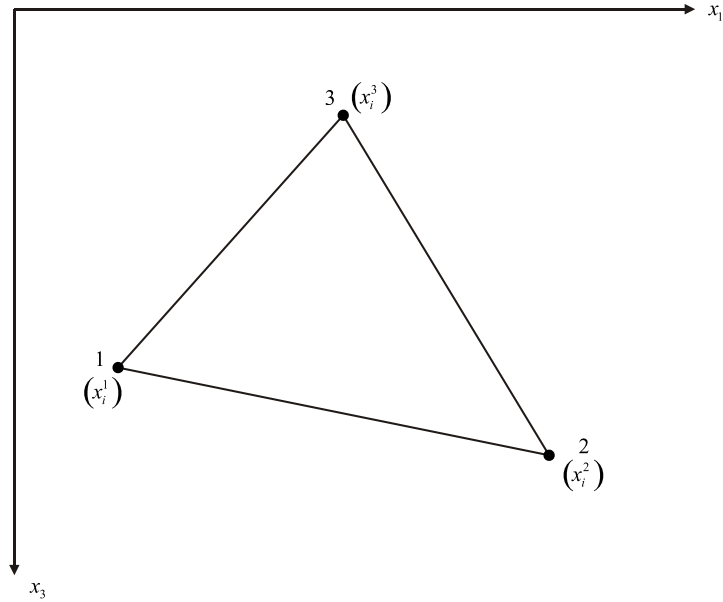
Antes de intentar resolver (4.23) se deben determinar los coeficientes  $A_{mn}^e, F_{mn}^e, Q_m^e$  y  $B_m^e$ , los cuales dependen de la geometría del elemento finito y de las funciones de coordenadas. Para el presente trabajo se manejaron dos tipos de elementos finitos y funciones de coordenadas lineales en  $x_i$ , los cuales se describen a continuación.

#### 4.5.2. Elemento triangular

La forma geométrica más simple utilizada para aproximar regiones de flujo irregulares es el triángulo. Su popularidad radica en su facilidad de implementación y su capacidad de representar regiones altamente irregulares de manera sencilla, la cual puede ser mejorada utilizando algoritmos de refinamiento de mallas no estructuradas (Lewis, Nithiarasu, y Seethamaru, 2004).

El elemento triangular general se encuentra representado en la Figura 4.7. Sus tres esquinas están numeradas en sentido contrario al de las manecillas del reloj y tienen asociadas coordenadas espaciales  $x_i^1, x_i^2$  y  $x_i^3$ , respectivamente. Supóngase que las funciones de coordenadas locales son lineales en  $x_i$ , entonces la relación entre las coordenadas globales y las funciones de coordenadas locales definida por las ecuaciones (4.24) y (4.25) (Neuman, 1973):

Figura 4.7. Elemento triangular



$$\begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & x_1^3 \\ x_3^1 & x_3^2 & x_3^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1^e \\ \xi_2^e \\ \xi_3^e \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

$$\begin{bmatrix} \xi_1^e \\ \xi_2^e \\ \xi_3^e \end{bmatrix} = \frac{1}{2\Delta} \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 \\ \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad (4.25)$$

donde  $\Delta$  y los coeficientes  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  y  $\gamma_i$  están dados por

$$2\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1^1 & x_3^1 \\ 1 & x_1^2 & x_3^2 \\ 1 & x_1^3 & x_3^3 \end{vmatrix} = \beta_1\gamma_2 - \beta_2\gamma_1 \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= x_1^2 x_3^3 - x_1^3 x_3^2; & \beta_1 &= x_3^2 - x_3^3; & \gamma_1 &= x_1^3 - x_1^2 \\ \alpha_2 &= x_1^3 x_3^1 - x_1^1 x_3^3; & \beta_2 &= x_3^3 - x_3^1; & \gamma_2 &= x_1^1 - x_1^3 \\ \alpha_3 &= x_1^1 x_3^2 - x_1^2 x_3^1; & \beta_3 &= x_3^1 - x_3^2; & \gamma_3 &= x_1^2 - x_1^1 \end{aligned} \quad (4.27)$$

Obsérvese que  $\Delta$  es numéricamente igual al área del triángulo en cuestión. De las ecuaciones anteriores, interesa conocer las primeras derivadas espaciales de las

funciones de coordenadas locales, las cuales se pueden obtener a partir de la ecuación (4.25):

$$\frac{\partial \xi_i^e}{\partial x_1} = \frac{b_i}{2\Delta}; \quad \frac{\partial \xi_i^e}{\partial x_3} = \frac{c_i}{2\Delta} \quad (4.28)$$

De la misma manera, se puede demostrar la siguiente fórmula de integración para elementos triangulares lineales:

$$\int_{\Omega} (\xi_i^e)^a (\xi_j^e)^b (\xi_k^e)^c d\Omega = 2\Delta \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!} \quad (4.29)$$

Valiéndose de las ecuaciones (4.29) y (4.28), se puede resolver las integrales definidas en (4.18) a (4.21), y definir las matrices elementales para el triángulo.

$$[A]^e = \frac{\bar{K}}{4\Delta} \left( \begin{bmatrix} \beta_1\beta_1 & \beta_1\beta_2 & \beta_1\beta_3 \\ \beta_2\beta_1 & \beta_2\beta_2 & \beta_2\beta_3 \\ \beta_3\beta_1 & \beta_3\beta_2 & \beta_3\beta_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \gamma_1\gamma_1 & \gamma_1\gamma_2 & \gamma_1\gamma_3 \\ \gamma_2\gamma_1 & \gamma_2\gamma_2 & \gamma_2\gamma_3 \\ \gamma_3\gamma_1 & \gamma_3\gamma_2 & \gamma_3\gamma_3 \end{bmatrix} \right) \quad (4.30)$$

$$[F]^e = \frac{\Delta}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

$$\{B\}^e = \frac{\bar{K}}{2} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

$$\{Q^e\} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} L_{12}V_{12} + L_{13}V_{13} \\ L_{12}V_{12} + L_{23}V_{23} \\ L_{23}V_{23} + L_{13}V_{13} \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

$L_{ij}$  y  $V_{ij}$  representan la longitud de la cara del triángulo que une los puntos  $i$  y  $j$ , y el flujo específico a través de dicha cara, respectivamente.  $\bar{K} = (K_1 + K_2 + K_3)/3$  es el promedio de la conductividad hidráulica en los nodos del triángulo. Si el flujo específico a través de alguna de las caras del elemento no está prescrito, esto es, no está definido como condición de frontera, entonces se toma igual a cero.

#### 4.5.3. Elemento rectangular

Otra forma geométrica comúnmente utilizada para definir elementos finitos es el cuadrilátero, en particular el rectángulo regular de lados paralelos al sistema de

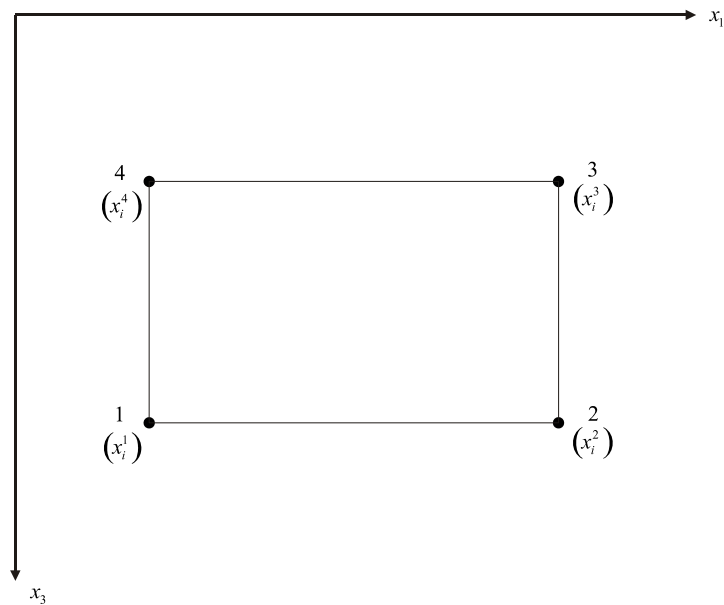
coordenadas. El elemento finito rectangular puede apreciarse en la Figura 4.8. Siendo consistentes con la convención usada para el triángulo, las cuatro esquinas del rectángulo están numeradas en sentido contrario al de las manecillas del reloj y tienen asociadas coordenadas espaciales  $x_i^1, x_i^2, x_i^3$  y  $x_i^4$ , respectivamente; la base del rectángulo es

$$m = x_1^2 - x_1^1 = x_3^3 - x_3^4$$

y su altura

$$l = x_3^3 - x_3^2 = x_3^4 - x_3^1$$

**Figura 4.8.** Elemento rectangular



Puede hacerse sobre el rectángulo un análisis similar al del elemento triangular con funciones de coordenadas lineales para obtener las matrices elementales. Los detalles de dicho análisis, que se omite en la presente tesis, se pueden encontrar en Lewis, et al., 2006. Las fórmulas resultantes se encuentran consignadas en las ecuaciones

$$[A]^e = \frac{\bar{K}}{6} \left( \frac{m}{l} \begin{bmatrix} 2 & -2 & -1 & 1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \end{bmatrix} + \frac{l}{m} \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & -2 \\ 1 & 2 & -2 & -1 \\ -1 & -2 & 2 & 1 \\ -2 & -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \right) \quad (4.34)$$

$$[B]^e = \frac{lm}{36} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

$$\{F\}^e = \bar{K} \frac{l}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

$$\{Q\}^e = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} L_{12}V_{12} + L_{14}V_{14} \\ L_{12}V_{12} + L_{23}V_{23} \\ L_{23}V_{23} + L_{34}V_{34} \\ L_{34}V_{34} + L_{14}V_{14} \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

$L_{ij}$  y  $V_{ij}$  representan la longitud de la cara del triángulo que une los puntos  $i$  y  $j$ , y el flujo específico a través de dicha cara, respectivamente.  $\bar{K} = (K_1 + K_2 + K_3 + K_4)/4$  es el promedio de la conductividad hidráulica en los nodos del rectángulo. Si el flujo específico a través de alguna de las caras del elemento no está prescrito, esto es, no está definido como condición de frontera, entonces se toma igual a cero.

Conocidas las matrices y vectores elementales se pueden construir las matrices y vectores globales de la ecuación (4.23) usando las relaciones de conectividad entre nodos y elementos de la malla. El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias resultante se puede resolver utilizando alguno de los esquemas estudiados en la sección 3.4.

#### 4.5.4. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera que pueden manejarse en la presente implementación del método de elementos finitos son las mismas que se han trabajado en el caso de diferencias finitas. En MEF, las condiciones de frontera están definidas en el vector  $\{Q\}$  en (4.23).

##### 4.5.4.1. Condiciones de Neumann

El significado físico del vector  $\{Q\}$  se puede deducir a partir de las integrales que lo definen. Si determinado nodo  $n$  pertenece a uno o varios elementos en cuyas fronteras el flujo específico está prescrito, la integral (4.20) indica que el  $n$ -ésimo elemento de  $\{Q\}$ ,  $Q_n$ , representa la contribución  $n$  al flujo total que ingresa al dominio, y se calcula como el

flujo a través de la frontera propia de  $n$ , ponderado usando las funciones de forma. El elemento  $Q_n$  se calcula como la suma de los  $Q_n^e$  elementales dados por (4.20). Habiéndose calculado  $\{Q\}$ , se aplica cualquiera de los esquemas de integración temporal estudiados en la sección 3.4. La integridad de las matrices  $[A]$  y  $[F]$  no se ve afectada en este caso.

#### 4.5.4.2. Condiciones de Dirichlet

Si la presión  $\psi$  está prescrita para cierto nodo  $i$  y es constante en el tiempo, debe asegurarse en el esquema de integración temporal a utilizar que se cumpla  $\psi_i^{j+1} = \psi_i^j$ . Esto puede lograrse de dos maneras, el método tradicional de eliminación de filas, y un método alternativo, las cuales son descritas a continuación. Para tales efectos, el sistema de ecuaciones resultante de cualquier esquema de integración puede escribirse como

$$[U]\{\psi\} = \{d\} \quad (4.38)$$

Los dos métodos implican modificaciones a la estructura de los elementos de la ecuación anterior:

- Eliminación de filas: Este método consiste en eliminar las filas de  $[U]$  y  $\{d\}$  que correspondan a los nodos que pertenecen a fronteras  $\Gamma_D$  con condiciones de borde tipo Dirichlet. Para que el sistema de ecuaciones siga siendo cuadrado, hace falta eliminar además las columnas de  $[U]$  correspondientes a  $\Gamma_D$  y pasar a restar los términos de la combinación lineal  $[U]\{\psi\}$ , eliminados a la izquierda para que el resultado sea equivalente a (4.38). Por ejemplo, considérese el sistema

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1p} & u_{1q} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2p} & u_{2q} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_{p1} & u_{p2} & \cdots & u_{pp} & u_{pq} & \cdots & u_{pN} \\ u_{q1} & u_{q2} & \cdots & u_{qp} & u_{qq} & \cdots & u_{qN} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{Np} & u_{Nq} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix}_{N \times N} \begin{bmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_p \\ \psi_q \\ \vdots \\ \psi_N^{j+1} \end{bmatrix}_{N \times 1} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_p \\ d_q \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}_{N \times 1},$$

donde  $p$  y  $q$  son los nodos de la malla que pertenecen a una frontera  $\Gamma_D$ . Recuérdese que  $\psi_p$  y  $\psi_q$  son constantes en el tiempo. Después de la eliminación de filas, se tiene

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1p} & u_{1q} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2p} & u_{2q} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{Np} & u_{Nq} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix}_{N-N_D \times N} \begin{bmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_p \\ \psi_q \\ \vdots \\ \psi_N^{j+1} \end{bmatrix}_{N \times 1} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}_{N-N_D \times 1}$$

Luego de la eliminación de columnas y la resta de elementos a la izquierda, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix}_{N-N_D \times N-N_D} \begin{bmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_N^{j+1} \end{bmatrix}_{N-N_D \times 1} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}_{N-N_D \times 1} - \begin{bmatrix} u_{1p}\psi_p + u_{1q}\psi_q \\ u_{2p}\psi_p + u_{2q}\psi_q \\ \vdots \\ u_{Np}\psi_p + u_{Nq}\psi_q \end{bmatrix}_{N-N_D \times 1}$$

El sistema de ecuaciones resultante es equivalente a (4.38). La ventaja de esta aproximación es que reduce efectivamente el orden del sistema de ecuaciones, lo cual facilita su resolución.

- Método alternativo: En el enfoque tradicional, los valores de  $\psi_p$  y  $\psi_q$  en el nivel temporal  $j+1$  son excluidos del vector de incógnitas, pues son valores conocidos. En el enfoque alternativo, estos valores se conservan como incógnitas, y en cambio se escriben ecuaciones adicionales de la forma  $\psi_p^{j+1} = \psi_p^j$  y  $\psi_q^{j+1} = \psi_q^j$ . Para tales fines, se hacen todos los elementos de las filas correspondientes a los nodos de las fronteras  $\Gamma_D$  de la matriz  $[U]$  iguales a cero, excepto los elementos de la diagonal principal, los cuales se hacen igual a uno. Los elementos del vector  $\{d\}$  correspondientes a los nodos de las fronteras  $\Gamma_D$  se hacen iguales a la presión de poros en esos nodos, de modo que se conserve la relación  $\psi_i^{j+1} = \psi_i^j$ . A modo de ilustración, la forma matricial del sistema de ecuaciones del ejemplo anterior luego de aplicar el método alternativo sería:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1p} & u_{1q} & \cdots & u_{1N} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2p} & u_{2q} & \cdots & u_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \cdots & u_{Np} & u_{Nq} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix}_{N \times N} \begin{bmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_p^{j+1} \\ \psi_q^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_N^{j+1} \end{bmatrix}_{N \times 1} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ \psi_p^j \\ \psi_q^j \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}_{N \times 1}$$

Como se puede observar, en este método no se reducen las dimensiones del sistema, lo cual es una desventaja frente al enfoque tradicional en cuanto a esfuerzo computacional invertido para su solución, pero es también una ventaja en cuanto a facilidad de implementación pues su aplicación no requiere modificaciones al tamaño o estructura de los elementos de la ecuación (4.38), y es en esencia muy similar a la manera como se han trabajado las condiciones de Dirichlet en el método de diferencias finitas (Sección 3.3.2.1).

Bien sea que las fronteras del dominio de flujo tengan condiciones de borde tipo Neumann o Dirichlet,  $Q_i$  es nulo para los nodos  $i$  de la malla que no pertenecen a la frontera.

#### 4.5.5. Estructura de las matrices de coeficientes

De manera similar a la matriz de coeficientes  $[A]$  del método de diferencias finitas, descrita en la sección 3.3.3, las matrices globales de coeficientes  $[A]$  y  $[F]$  derivadas de la formulación del método de diferencias finitas, poseen cierta estructura y características de las que se puede hacer uso para facilitar la solución de (4.23). Estas son:

- Simetría: Las matrices  $[A]$  y  $[F]$  son simétricas, esto es

$$A_{ij} = A_{ji}, F_{ij} = F_{ji} \text{ para todo } i, j.$$

Este hecho se puede apreciar de manera clara en las ecuaciones (4.18) y (4.19).

- Definidas positivas: Las matrices  $[A]$  y  $[F]$  son definidas positivas. Esta propiedad implica que ambas matrices son no singulares, y por tanto invertibles; además, la matriz  $[M] = \alpha[A] + \beta[B]$  es también definida positiva, con  $\alpha > 0$  y  $\beta > 0$ . Una demostración detallada de este hecho se puede encontrar en Šolin, 2006.

Esparsidad: En cada fila  $i$  de las matrices  $[A]$  y  $[F]$ , los únicos elementos no nulos son aquellos correspondientes a los nodos inmediatamente vecinos al nodo  $i$ , tal como puede observarse en la Figura 4.9. Esta característica es resultado de las ecuaciones (4.22), (4.23) y la propiedad delta de Kronecker de las funciones de coordenadas de cada nodo, lo que hace que las matrices en cuestión sean altamente esparcidas, esto es, tengan muchos elementos nulos. Las matrices  $[A]$  y  $[F]$  pueden manejarse usando un sistema de almacenamiento similar al descrito en la sección 3.3.3 gracias a la cantidad relativamente reducida que los compone, y al hecho de que las posiciones de éstos en las matrices de coeficientes obedecen a relaciones geométricas. En la Figura 4.10 se puede apreciar la ilustración de esta metodología para el caso de la matriz de coeficientes mostrada en la Figura 4.9.



El número de columnas de  $[A']$  y  $[P_A]$  es igual al número máximo de vecinos que puede tener un nodo de la malla más uno. Si un cierto nodo  $i$  tiene menos vecinos que el máximo, quedarán algunos elementos vacíos en la fila  $i$  de  $[A']$  y  $[P_A]$ , los cuales se llenan con ceros a modo de convención. Para la matriz  $[F]$  se puede proceder de una manera similar.

#### 4.5.6. Forma basada en la presión de la ecuación de Richards

Para reescribir la ecuación de Richards en términos de la presión, recuérdese que

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

donde  $C(\psi)$  es capacidad específica de humedad. Reemplazando la relación anterior en (4.23), tiénese

$$[A]_{N \times N} \{\psi\} + [G]_{N \times N} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} = \{Q\}_N + \{B\}_N \quad (4.39)$$

La matriz  $[G]$  es la combinación de varias matrices elementales  $[G]^e$  cuyos elementos están dados por

$$G_{mn}^e = \int_{E^e} C(\psi) \xi_m^e \xi_n^e d\Omega$$

La variación espacial de la capacidad específica de humedad se aproximará de manera similar a la presión y a la conductividad hidráulica, esto es,

$$C = C_l \xi_l^e, \quad (4.40)$$

donde el subíndice  $l$  representa de nuevo las esquinas de un elemento finito. Usando esta aproximación, se obtiene

$$G_{mn}^e = C_l \int_{E^e} \xi_l^e \xi_m^e \xi_n^e d\Omega. \quad (4.41)$$

Otra forma de manejar la variación espacial de la capacidad específica es tomar  $C$  constante sobre todo el elemento e igual a la capacidad en el centroide del elemento, lo que equivale al promedio de los valores de  $C$  en las esquinas si se asume una variación lineal de  $C$  en el espacio. De esta manera,

$$G_{mn}^e = \langle C \rangle \int_{E^e} \xi_m^e \xi_n^e d\Omega, \quad (4.42)$$

donde  $\langle C \rangle$  es la capacidad específica en el centroide del elemento.

Para elementos triangulares, usando la ecuación (4.41), la matriz elemental  $[G]^e$  estará dada por

$$[G]^e = \frac{\Delta}{60} \begin{bmatrix} 6C_1 + 2C_2 + 2C_3 & 2C_1 + 2C_2 + C_3 & 2C_1 + C_2 + 2C_3 \\ 2C_1 + 2C_2 + C_3 & 2C_1 + 6C_2 + 2C_3 & C_1 + 2C_2 + 2C_3 \\ 2C_1 + C_2 + 2C_3 & C_1 + 2C_2 + 2C_3 & 2C_1 + 2C_2 + 6C_3 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

donde  $C_1$ ,  $C_2$  y  $C_3$  son los valores de  $C$  en las esquinas del elemento. Usando la ecuación (4.42) se obtiene una expresión diferente:

$$[G]^e = \langle C \rangle [F]^e = \frac{\Delta \langle C \rangle}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

Obsérvese que si  $C$  es igual en todas las esquinas, las expresiones (4.43) y (4.44) son equivalentes.

De manera similar a los elementos triangulares, para elementos rectangulares, la matriz elemental  $[G]^e$  estará dada por las ecuaciones (4.45) y dependiendo de si se usa el enfoque de (4.41) o (4.42), respectivamente:

$$[G]^e = \frac{lm}{144} \begin{bmatrix} 9C_1 + 3C_2 + C_3 + 3C_4 & 3C_1 + 3C_2 + C_3 + C_4 & C_1 + C_2 + C_3 + C_4 & 3C_1 + C_2 + C_3 + 3C_4 \\ 3C_1 + 3C_2 + C_3 + C_4 & 3C_1 + 9C_2 + 3C_3 + C_4 & C_1 + 3C_2 + 3C_3 + C_4 & C_1 + C_2 + C_3 + C_4 \\ C_1 + C_2 + C_3 + C_4 & C_1 + 3C_2 + 3C_3 + C_4 & 3C_1 + 3C_2 + 9C_3 + 3C_4 & C_1 + C_2 + 3C_3 + 3C_4 \\ 3C_1 + C_2 + C_3 + 3C_4 & C_1 + C_2 + C_3 + C_4 & C_1 + C_2 + 3C_3 + 3C_4 & 3C_1 + 3C_2 + 3C_3 + 9C_4 \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

$$[G]^e = \langle C \rangle [F]^e = \frac{lm \langle C \rangle}{36} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

## 4.6. INTEGRACIÓN TEMPORAL

La similitud entre las ecuaciones (3.28), (3.29), (4.23) y (4.39) hace posible utilizar los mismos esquemas de integración estudiados en la sección 3.4 tanto con la formulación del método de diferencias finitas como con el de elementos finitos; sólo hace falta reescribir algunas ecuaciones para que se tenga en cuenta el cambio en las matrices de

coeficientes. En esta sección se presentan los algoritmos y ecuaciones reescritos para el caso del método de elementos finitos.

#### 4.6.1. Esquema 1

La expresión de integración temporal para este esquema y el método de elementos finitos, es:

$$\left( \frac{1}{2}[A]^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1/2} \right) \{\psi\}^{j+1} = \{\mathcal{Q}\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2} - \left( \frac{1}{2}[A]^{j+1/2} - \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1/2} \right) \{\psi\}^j \quad (4.47)$$

Las matrices y vectores de coeficientes deben ser de nuevo evaluados en el nivel de tiempo  $j+1/2$ . La fórmula de extrapolación usada para determinar la primera estimación de  $\{\psi\}^{j+1/2}$  es la misma utilizada en el método de diferencias finitas:

$$\{\psi\}^{j+1/2} = \{\psi\}^{j+1/2} + \frac{\Delta t_j}{2\Delta t_{j-1}} (\{\psi\}^j - \{\psi\}^{j-1}) \quad (4.48)$$

En el algoritmo 4.1 se presenta detallado el proceso iterativo para mejorar la estimación de la presión de poros en el siguiente nivel temporal.

#### 4.6.2. Esquema 2

La fórmula de recurrencia de este esquema de integración es:

$$\begin{aligned} [A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1,k} (\{\psi\}^{j+1,k+1} - \{\psi\}^{j+1,k}) + \frac{1}{\Delta t_j}[F] (\{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j) \\ = \{\mathcal{Q}\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2} \end{aligned} \quad (4.49)$$

El cálculo de los términos  $[A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2}$ ,  $\{\mathcal{Q}\}^{j+1/2}$  y  $\{B\}^{j+1/2}$  se realiza igual que en la sección 3.4.2.:

**Algoritmo 4.1.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 1

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1/2,0}$  usando la ecuación (4.48)
2. Tomar  $k = 0$
3. Reemplazar  $\{\psi\}^{j+1/2,k}$  en (4.47) y calcular  $\{\psi\}^{j+1,k}$
4. Para  $k = 0$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular un nuevo  $\{\psi\}^{j+1/2,k+1}$  usando  $\{\psi\}^{j+1,k}$ , según

$$\{\psi\}^{j+1/2,k+1} = \frac{1}{2} \left( \{\psi\}^{j+1,k} + \{\psi\}^j \right) \quad (4.50)$$

6. Reemplazar  $\{\psi\}^{j+1/2,k+1}$  en (4.47) y calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$
7. Calcular el error relativo según (3.33)
8. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
9. Siguiendo  $k$

$$[A]^{j+1/2} \{\psi\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} \left( [A]^{j+1} \{\psi\}^{j+1,k+1} - [A]^j \{\psi\}^j \right) \quad (4.51)$$

$$\{Q\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} \left( \{Q\}^{j+1,k+1} + \{Q\}^j \right) \quad (4.52)$$

$$\{B\}^{j+1/2} = \frac{1}{2} \left( \{B\}^{j+1,k+1} + \{B\}^j \right) \quad (4.53)$$

Reemplazando (4.51) en (4.49) y tomando factores comunes, se obtiene a la ecuación de integración temporal

$$\left( \frac{1}{2} [A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} = \{Q\}^{j+1/2} + \{B\}^{j+1/2} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} - \frac{1}{2} [A]^j \{\psi\}^j - \frac{1}{\Delta t_j} [F] \left( \{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j \right), \text{ para } k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.54)$$

La estimación inicial de los valores de presión de poros en el nivel  $j+1$  se realiza usando la fórmula de extrapolación lineal

$$\{\psi\}^{j+1,0} = \{\psi\}^j + \frac{\Delta t_j}{\Delta t_{j-1}} \left( \{\psi\}^j - \{\psi\}^{j-1} \right) \quad (4.55)$$

La aplicación de esta ecuación se realiza según el Algoritmo 4.2.:

**Algoritmo 4.2.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 2

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,0}$  usando (4.55)
2. Tomar  $k = 0$
3. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (4.54)
4. Para  $k = 1$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (4.54)
6. Calcular el error relativo según (3.33)
7. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
8. Siguiendo  $k$

Para  $j = 0$ , se toma  $\{\psi\}^{j+1,0} = \{\psi\}^0$  pues en este nivel no hay valores precedentes con los cuales practicar una extrapolación lineal.

### 4.6.3. Esquema 3

Para este esquema de integración, se modifica la ecuación (3.44) para adaptarla al método de elementos finitos, y se obtiene

$$\left( [A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} = \{Q\}^{j+1} + \{B\}^{j+1} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} - \frac{1}{\Delta t_j} [F] \left( \{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j \right) \quad (4.56)$$

El algoritmo para la aplicación del método indicado en (4.56) se presenta a continuación

**Algoritmo 4.3.** Manejo de la no linealidad del problema en el esquema de integración temporal 3

1. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,0}$  usando (3.42)
2. Tomar  $k = 0$
3. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.44)
4. Para  $k = 1$  hasta  $k_{\max}$
5. Calcular  $\{\psi\}^{j+1,k+1}$  a partir de  $\{\psi\}^{j+1,k}$  usando (3.44)
6. Calcular el error relativo según (3.33)
7. Si  $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
8. Siguiente  $k$

#### 4.7. CONCENTRACIÓN ARTIFICIAL DE MASA

Es de interés estudiar el efecto de la estructura de las matrices de conductancia y masa en la solución del problema de flujo en medio poroso, especialmente la de las matrices de masa. Se puede deducir a partir de la propiedad delta de Kronecker de las funciones de forma, que las matrices de conductancia y masa que resultan de la aplicación del método de elementos finitos al problema en cuestión, poseen la misma estructura de elementos no nulos. Esta estructura, tal como se ha discutido con anterioridad, obedece a las relaciones de vecindad establecidas entre los nodos, durante el proceso de discretización del dominio de flujo. Las matrices elaboradas de esta forma se dice son *consistentes* con la formulación del método de elementos finitos.

Considérese la solución del estado de flujo en un dominio rectangular como el de la Figura 3.11. Los parámetros de simulación, las condiciones iniciales y de frontera, y las propiedades de suelo utilizados para la simulación se encuentran consignados en la Tabla 4.1. Las Figuras 4.11 y 4.12 muestran el perfil de presión de poros de la columna central de suelo para los grupos de datos A y B, respectivamente. Las soluciones mostradas se han calculado para diferentes valores de  $\Delta t$  y se presentan junto a una solución obtenida usando una discretización espacial y temporal densa, la cual se considera la solución 'exacta' para estos problemas.

Para el grupo de datos A, se intentó calcular una solución para  $\Delta t = 7.5$  s, 10 s, 30 s y 120 s. Los únicos casos en los que se logró cumplir la condición de presiones límite fueron los dos primeros. De la misma manera, se intentó obtener una solución para el grupo de datos B con  $\Delta t = 0.3$  min, 0.6 min, 1.2 min, 2.4 min y 6 min, pero sólo se logró cumplir la condición de presiones límite en los primeros tres casos. Estos ejemplos ilustran el hecho de que, al usar el esquema de matrices consistentes de masa, es necesario usar valores de incremento temporal relativamente pequeños.

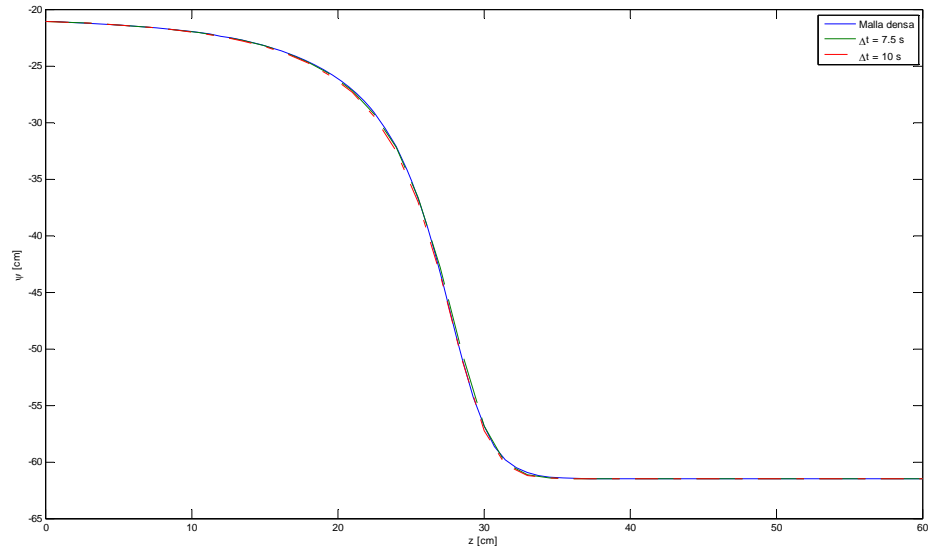
**Tabla 4.1.** Grupos de datos de entrada para las simulaciones 2A y 2

<b>Propiedad</b>	<b>Simulación 2</b>	
	<b>Grupo de datos A</b>	<b>Grupo de datos B</b>
Ancho, $W$	40.00 cm	40.00 cm
Profundidad, $L$	60.00 cm	100.00 cm
Condición inicial	$\psi_0 = -61.50$ cm	$\psi_0 = -1000.00$ cm
Frontera superior	Flujo constante: $q = 13.69$ cm/hora	Presión constante: $\psi = -75.00$ cm
Frontera inferior	Presión constante: $\psi = -61.50$ cm	Presión constante: $\psi = -1000.00$ cm
Perfil de suelo	Arena Haverkamp	Suelo Nuevo México
Tiempo máximo de simulación	0.30 horas	24 horas
$\Delta x_1$	2.50 cm	2.50 cm
$\Delta x_3$	1.50 cm	2.50 cm

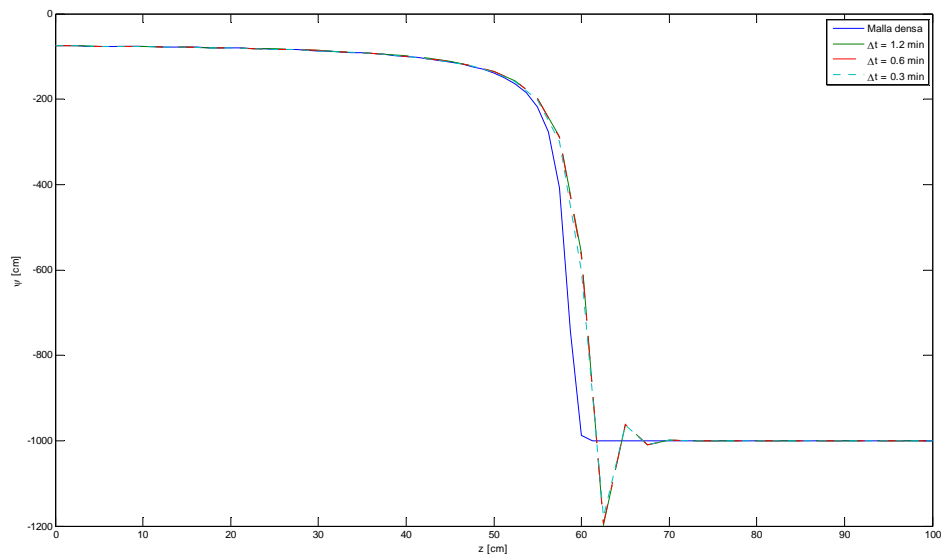
Otra característica importante de la solución se puede apreciar en la Figura 4.12. Obsérvese que en el extremo seco del frente húmedo, los valores de cabeza de presión oscilan espacialmente alrededor de la presión inicial del perfil. Dichas oscilaciones, propias del uso de matrices consistentes de masa, han sido observadas y estudiadas ampliamente por varios autores, entre ellos Bouloutas (1989), Celia (1990) y Pan (1996), para soluciones del problema de flujo en una dimensión. Su existencia no obedece a un comportamiento físico real reproducible en laboratorio, sino a las propiedades de la implementación del método de elementos finitos para la solución numérica del problema de flujo en medio poroso.

Es del interés del presente trabajo estudiar estas oscilaciones para el caso bidimensional, para lo cual se discute el efecto que tiene sobre ellas la discretización espacial y temporal usada para la solución. La magnitud de dichas oscilaciones no parece depender del valor de  $\Delta t$  siempre y cuando se alcance convergencia en la solución, tal como se puede observar en la Figura 4.12, pues para diferentes valores de  $\Delta t$ , la magnitud y extensión de las oscilaciones en el frente húmedo son iguales. La discretización espacial, en cambio, parece tener efecto sobre las oscilaciones. En la Figura 4.13 se muestran diferentes soluciones del perfil de presión para la columna central del grupo de datos B, calculadas con  $\Delta t$  constante y variando  $\Delta x_3$ . A medida que disminuye  $\Delta x_3$ , las oscilaciones se hacen más pequeñas y se extienden menos sobre la longitud del perfil.

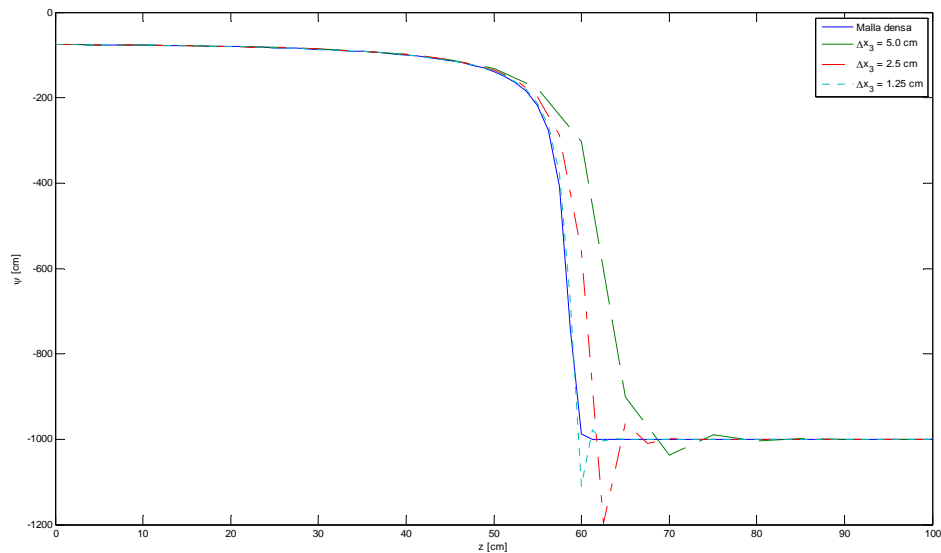
**Figura 4.11.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2A



**Figura 4.12.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2B



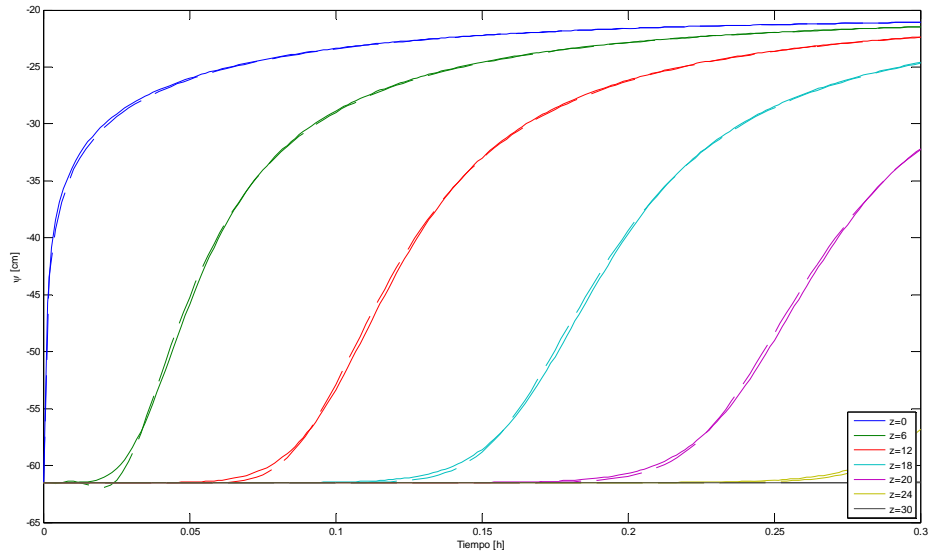
**Figura 4.13.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa consistentes. Grupo de datos 2B.  $\Delta t = 1.2$  min



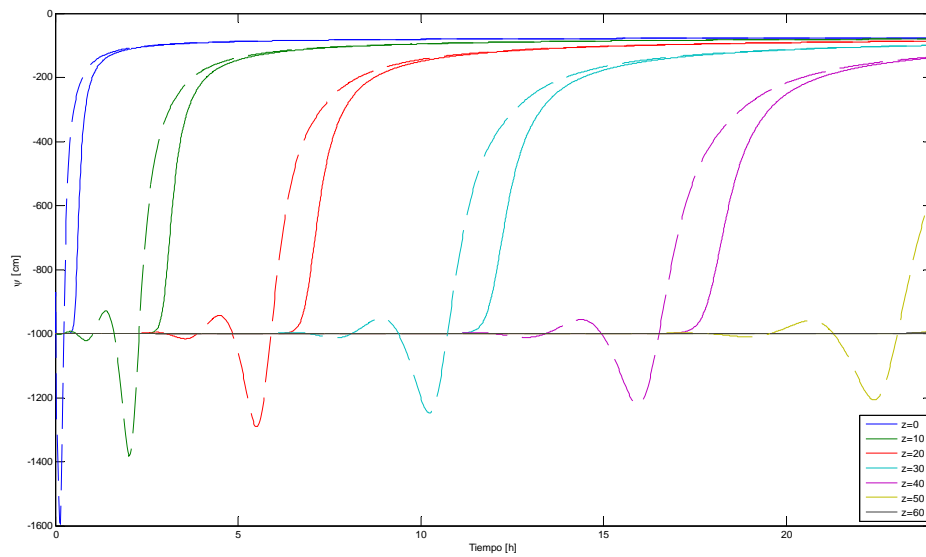
A primera vista parece que la solución para el grupo de datos A está exenta de estas oscilaciones. Para indagar más en este comportamiento, se ha trazado la variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades sobre la columna central de suelo, para ambos grupos de datos. Los resultados numéricos (línea a trazos) se comparan contra los resultados obtenidos usando una malla densa (línea continua) y se presentan en las Figuras 4.14 y 4.15. Los resultados hacen evidentes las oscilaciones, especialmente para el grupo de datos B; menos evidentes son para el grupo de datos A, pero se puede observar que la presión alcanza valores menores a la presión de campo a profundidades pequeñas (alrededor de 6 cm) sobre la columna central.

Dado que las oscilaciones en el frente húmedo no representan un comportamiento real del agua en el suelo, su existencia es un problema para la solución numérica y se debe mejorar para obtener resultados acordes con la realidad física. Una alternativa de solución para éste problema, se deduce a partir de la comparación de la estructura de las matrices de conductancia y masa elaboradas usando el método de elementos finitos (MEF) y el método de diferencias finitas (MDF). Para el caso de MDF, la estructura de elementos nulos de la matriz de conductancia, obedece a las relaciones de vecindad entre nudos, tal como es el caso para MEF; en cambio, la estructura de la matriz de masa para MDF es diagonal, mientras que para MEF todavía obedece las relaciones de vecindad. Lo anterior significa que el método de elementos finitos distribuye espacialmente la aproximación de la derivada temporal de la ecuación de Richards (Celia, 1990).

**Figura 4.14.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2A, usando matrices de masa consistentes.  $\Delta t = 7.5$  s. Profundidades en cm



**Figura 4.15.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2B, usando matrices de masa consistentes.  $\Delta t = 1.2$  min. Profundidades en cm



Para saber si es ésta característica particular del método de elementos finitos el que produce las oscilaciones observadas, se introduce el concepto de concentración o diagonalización artificial de masa, una técnica utilizada para manejar este tipo de comportamiento en la solución de todos los problemas del tipo difusión mediante elementos finitos. La concentración artificial de masa consiste en ‘concentrar’ todos los elementos de las matrices de masa en su diagonal principal. Una forma de lograr esto es sumar todos los elementos de determinada fila de la matriz de masa y colocar el resultado en la diagonal principal. Expresándolo formalmente, los términos de la matriz elemental de masa concentrada  $[G]^{e,L}$  están dados por

$$(G_{ij}^e)^L = \begin{cases} \sum_{i=1}^N G_{ij}^e & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (4.57)$$

La técnica anterior se ha aplicado para la solución del problema de flujo en medio poroso, tanto con elementos finitos triangulares como rectangulares. Las matrices de masa elementales concentradas para elementos triangulares son

$$[G]^{e,L} = \frac{\Delta}{12} \begin{bmatrix} 2c_1 + c_2 + c_3 & 0 & 0 \\ 0 & c_1 + 2c_2 + c_3 & 0 \\ 0 & 0 & c_1 + c_2 + 2c_3 \end{bmatrix} \quad (4.58)$$

$$[F]^{e,L} = \frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

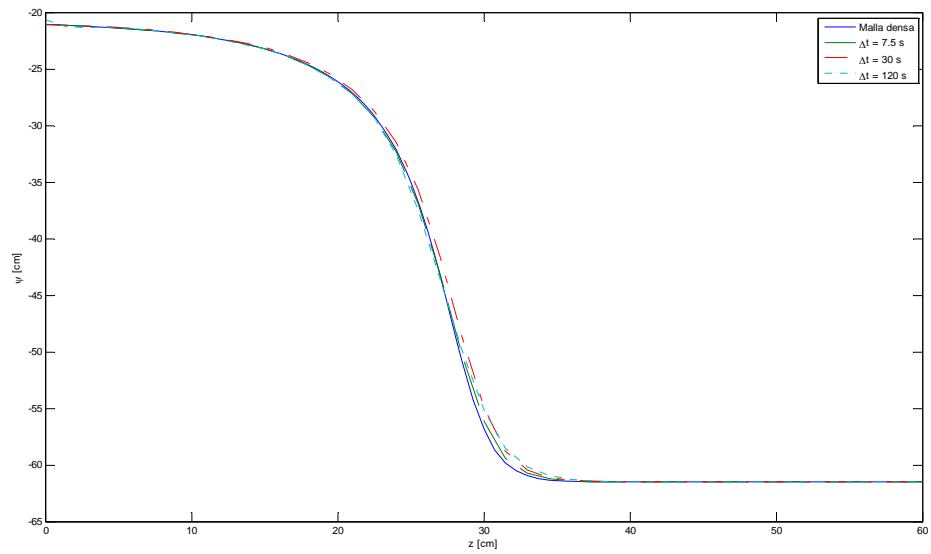
y para elementos rectangulares,

$$[G]^{e,L} = \frac{lm}{36} \begin{bmatrix} 4c_1 + 2c_2 + c_3 + 2c_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4c_1 + 2c_2 + c_3 + 2c_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4c_1 + 2c_2 + c_3 + 2c_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4c_1 + 2c_2 + c_3 + 2c_4 \end{bmatrix} \quad (4.59)$$

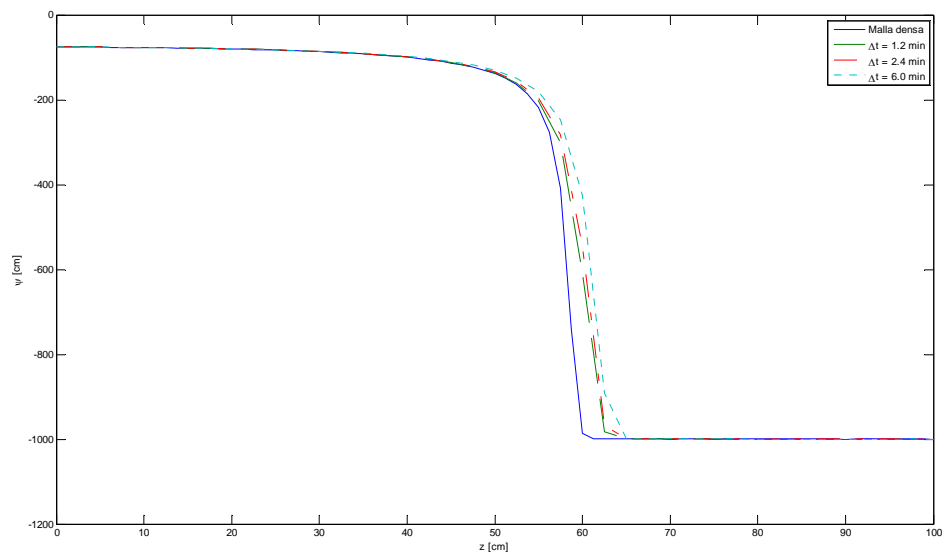
$$[F]^{e,L} = \frac{lm}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se vuelven a solucionar los grupos de datos para la arena Haverkamp y el suelo Nuevo México usando matrices concentradas de masa. Los resultados se pueden apreciar en las figuras 4.16 a 4.19

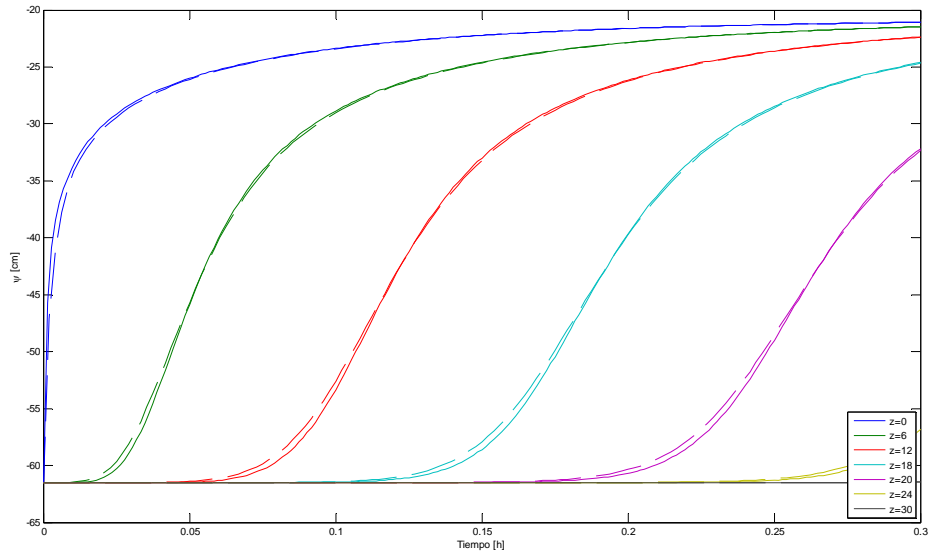
**Figura 4.16.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A.  $\Delta x_3 = 1.5$  cm



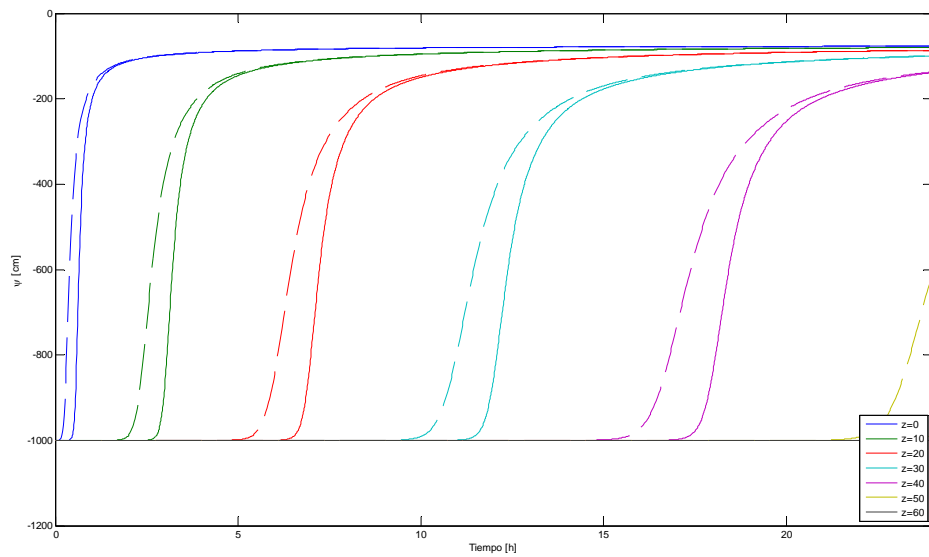
**Figura 4.17.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2B.  $\Delta x_3 = 2.5$  cm



**Figura 4.18.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2A, usando matrices de masa concentradas.  $\Delta t = 7.5$  s. Profundidades en cm



**Figura 4.19.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para el grupo de datos 2B, usando matrices de masa concentradas.  $\Delta t = 1.2$  min. Profundidades en cm



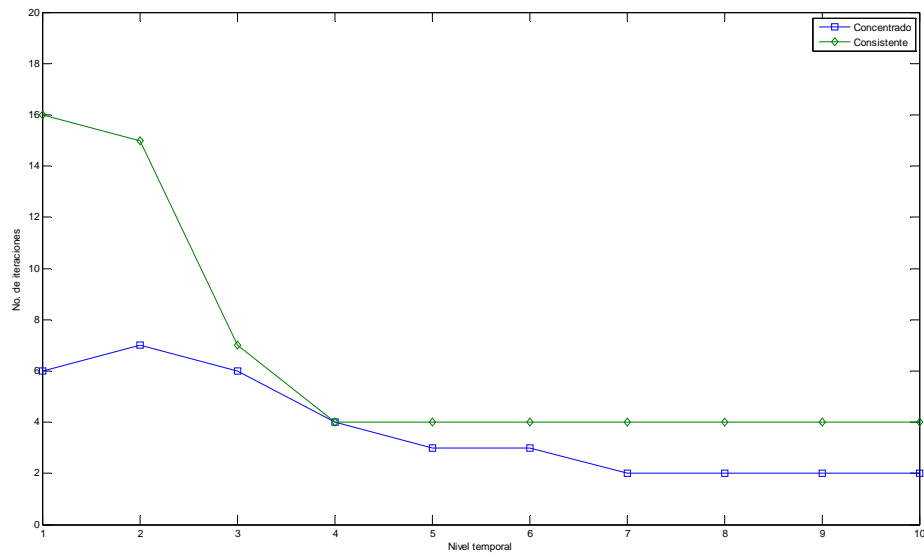
Obsérvese las diferencias entre los resultados obtenidos usando matrices consistentes de masa, y los resultados obtenidos usando matrices concentradas. En el segundo caso ya no se presentan las oscilaciones alrededor de la presión inicial observadas en el primero, y los resultados obtenidos son consistentes con los obtenidos para el caso unidimensional por Haverkamp (1977) y Bouloutas (1989). La explicación para este fenómeno radica en que la solución numérica obtenida con el uso de matrices de masa consistentes tal como se ha estudiado en el presente documento no satisface el principio discreto del máximo y por tanto permite valores de presión de poros más allá de los límites establecidos por las condiciones iniciales y las condiciones de frontera, en cambio que la solución obtenida usando matrices concentradas sí cumple dicho principio y por tanto no permite oscilaciones (Bouloutas, 1989).

Los resultados anteriores indican que el uso de matrices de masa concentradas tiene mejor comportamiento que el uso matrices de masa consistentes, pero esto no significa que lo primero sea un enfoque definitivo, pues la concentración de masa es un procedimiento artificial que no resulta de la formulación del problema con elementos finitos por el método de Galerkin; esto implica que la aplicación de la concentración artificial de masa puede tener otros efectos en la solución final, de hecho, tal como algunos autores han observado, la concentración de las matrices de masa puede producir frentes húmedos poco definidos (Pan et al., 1996). Existe la posibilidad de elaborar esquemas basados en matrices de masa consistentes que satisfagan el principio discreto del máximo (Pan et al.). Dichos esquemas son preferibles a los aquí estudiados, pues están libres de los problemas numéricos mencionados; aún así, su análisis se escapa del alcance del presente documento y se reserva para investigaciones futuras.

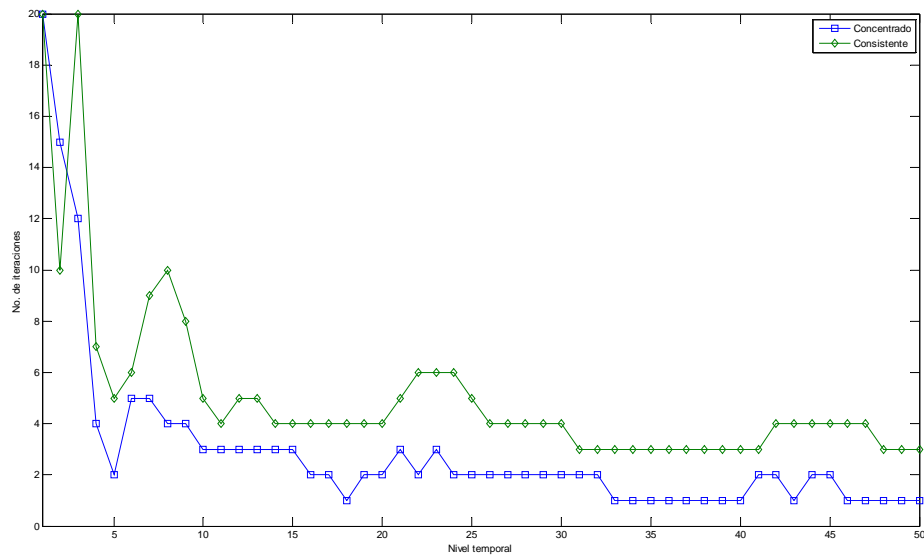
#### **4.7.1. Esfuerzo computacional y convergencia**

Otra ventaja de la aplicación del esquema de matrices de masa concentradas es que la solución de cada nivel temporal requiere menos iteraciones para lograr la convergencia, tanto en los primeros niveles como en el resto del dominio temporal (Figuras 4.20 y 4.21). De estas figuras se puede observar además que es en los primeros niveles temporales donde se presentan mayores dificultades para la convergencia, sea o no que se use concentración artificial de masa, de manera similar a lo que ocurre en el método de diferencias finitas (Sección 3.5). El comportamiento anterior se puede observar con detalle en la Figura 4.22, donde se grafica la variación de la cabeza de presión en la superficie del dominio de flujo para el grupo de datos A, solucionado usando matrices de masa concentradas para diferentes valores de incremento temporal. En esta figura se aprecia que para incrementos temporales relativamente altos, la solución alcanza valores de presión alejados de la presión real en los primeros niveles temporales, también conocidos como 'picos' o 'disparos', los cuales son producto de la falta de convergencia del método de integración temporal en el nivel temporal en cuestión.

**Figura 4.20.** Número de iteraciones como función del nivel temporal y la estructura de las matrices de masa. Grupos de datos 2A.  $\Delta t = 7.5$  s. 10 primeros niveles temporales



**Figura 4.21.** Número de iteraciones como función del nivel temporal y la estructura de las matrices de masa. Grupos de datos 2B.  $\Delta t = 1.2$  min. 50 primeros niveles temporales



Con el fin de ilustrar con mayor detalle las afirmaciones anteriores, se presenta en las Figuras 4.23 a 4.24 el proceso de convergencia en el cálculo de la presión en un punto del dominio, esto es, cómo la presión varía desde un estimado inicial (posición 0) hasta cumplir la condición de paro del proceso iterativo. El punto cuya presión de poros se desea calcular es el ubicado en la superficie del dominio, sobre la columna central de suelo; los niveles temporales en los cuales se calcula dicha presión son el primero y el segundo, aquellos donde generalmente se consume el mayor número de iteraciones para alcanzar la convergencia.

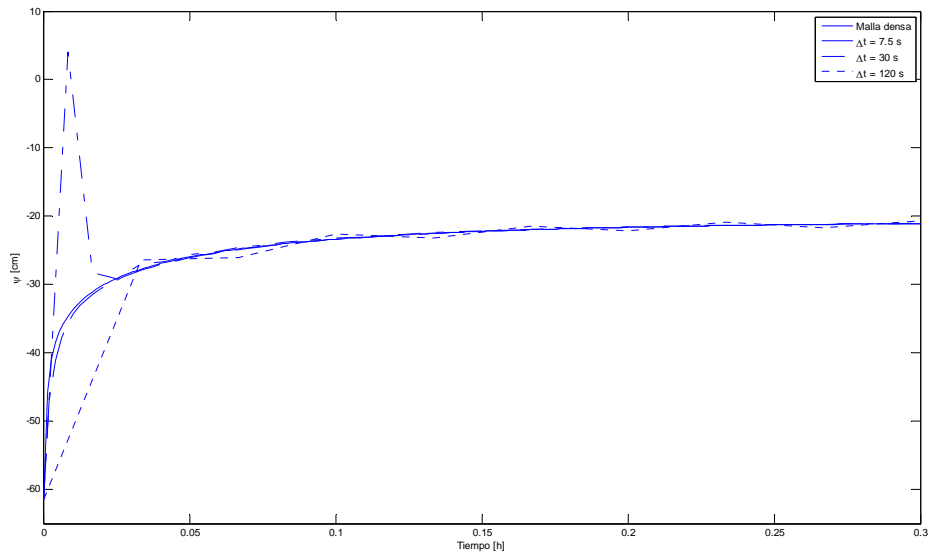
Los resultados de la Figura 4.23, calculados usando un incremento temporal de 7.5 s, muestran un proceso de convergencia satisfactorio, desde una estimación razonable hasta alcanzar el valor de presión deseado en pocas iteraciones. El resultado para el primer nivel temporal de la Figura 4.24, calculado con  $\Delta t = 30$  s, muestra en cambio un caso en que la presión empieza a oscilar y no se alcanza la convergencia en el número límite de iteraciones; éste comportamiento se debe a una estimación inicial deficiente de la presión en el punto (obsérvese que este estimado da una presión positiva, lo cual no tiene sentido físico), y tiene como consecuencia final el ‘disparo’ observado en la Figura 4.22. Esta presión de poros irreal obtenida es corregida en el nivel temporal siguiente, aunque a un costo de 10 iteraciones.

A pesar de lo anterior, no se puede asegurar que todo proceso de convergencia con una mala estimación inicial está condenado a fallar, pues como se muestra en la Figura 4.25, una estimación deficiente puede ser corregida en las iteraciones subsecuentes, incluso con un incremento temporal relativamente alto de 120 s. Lastimosamente, la regla general es que valores de  $\Delta t$  relativamente altos producen malas estimaciones iniciales de la presión, tan malas que, o bien produzcan ‘disparos’ que violen la condición de presiones límites, o no permitan alcanzar la convergencia en la solución.

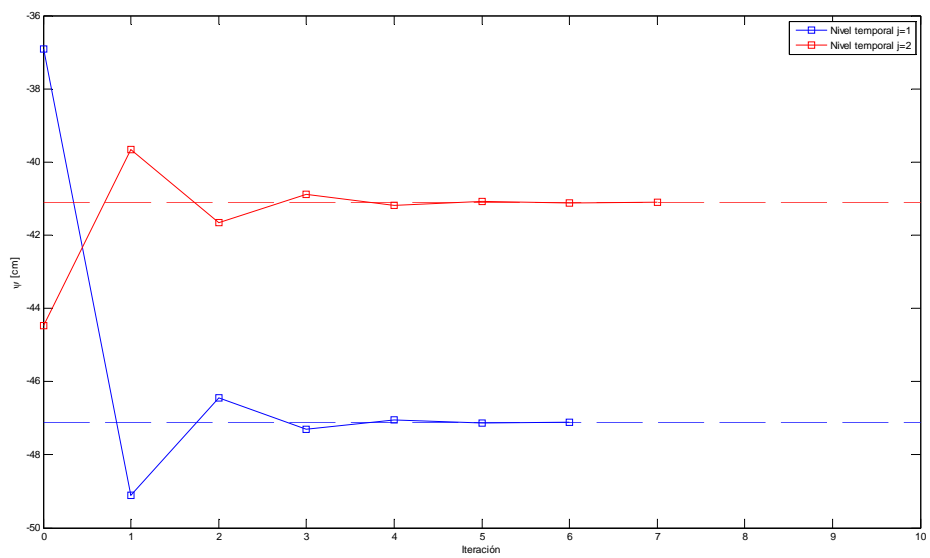
Cuando se habla de incrementos temporales relativamente ‘altos’, es claro que este concepto depende de la naturaleza del problema, las condiciones iniciales, las condiciones de frontera, y las propiedades de los materiales involucrados. Un  $\Delta t$  de 2 minutos puede ser pequeño para un suelo poco permeable, pero muy grande para un suelo altamente permeable. La elección del incremento temporal a utilizar queda pues en manos del modelador, el cual debe tener en cuenta todas las variables anteriormente mencionadas para elegir un valor que le permita obtener buenos resultados con un esfuerzo computacional razonable.

La discusión anterior se efectuó sobre cálculos usando matrices de masa concentradas. Si, como se ha dicho, se requiere un número mayor de iteraciones para alcanzar la convergencia con el esquema de masa consistente que con el esquema de masa concentrada, es claro que el primero de los dos no funcionará para valores de incremento temporal relativamente altos, lo cual está de acuerdo con todos los resultados obtenidos hasta el momento. La concentración artificial de masa, en contraste, alivia significativamente el proceso de convergencia, y por tanto permite el uso de incrementos temporales mayores (Figuras 4.16 y 4.17). Este hecho representa una ventaja práctica significativa, pues implica la reducción del número de sistemas de ecuaciones a resolver, y por tanto del esfuerzo computacional necesario para determinar el estado de flujo para un problema determinado.

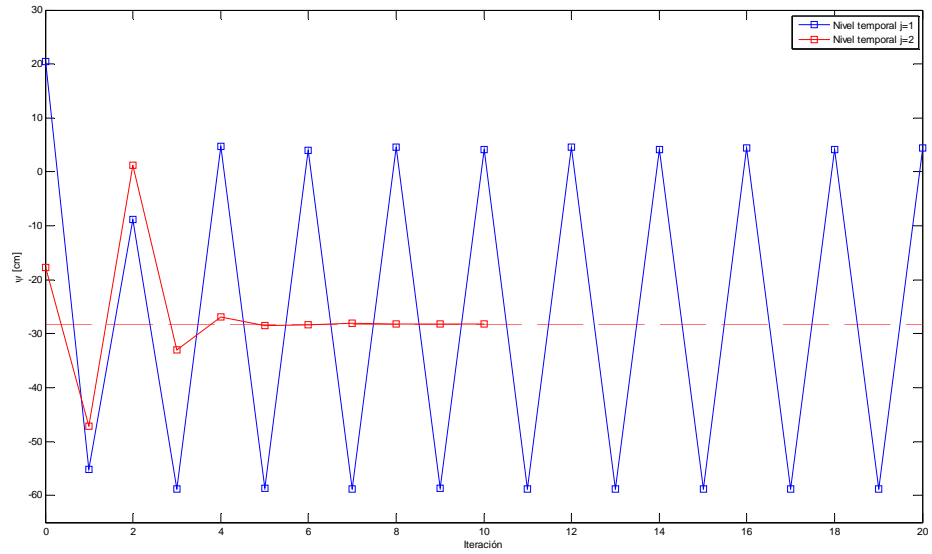
**Figura 4.22.** Variación de la presión de poros en la superficie del dominio de flujo en función del tiempo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A



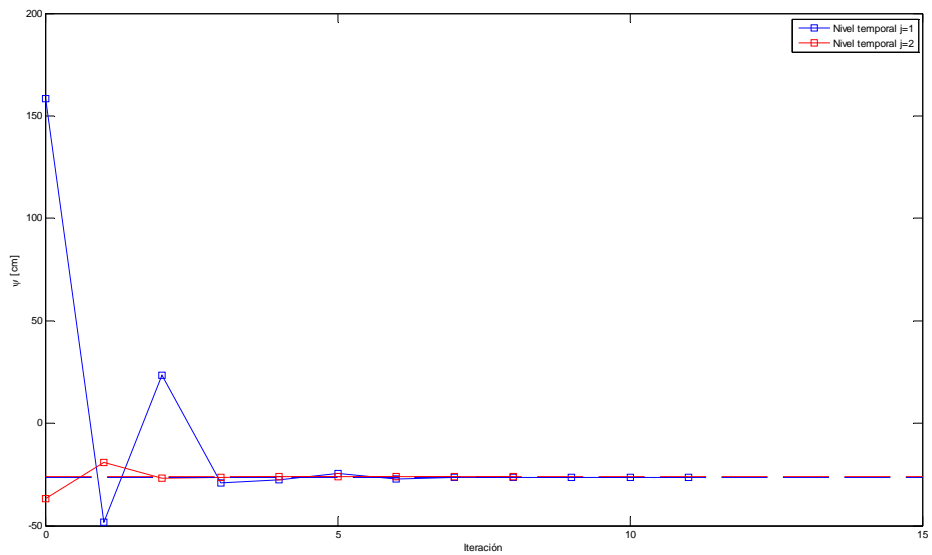
**Figura 4.23.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A.  $\Delta t = 7.5$  s



**Figura 4.24.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A.  $\Delta t = 30$  s



**Figura 4.25.** Proceso de convergencia en la solución de la presión en la superficie del dominio de flujo, usando matrices de masa concentradas. Grupo de datos 2A.  $\Delta t = 120$  s



Un comportamiento que vale la pena notar es la visible sobreestimación del avance del frente húmedo para la solución numérica del grupo de datos B, sea que se usen matrices de masa consistentes o concentradas (Figuras 4.12 y 4.17). Este comportamiento se debe a que la discretización espacial usada no es lo suficientemente fina para aproximar un frente húmedo tan definido como el presentado en la infiltración en suelo Nuevo México (Bouloutas, 1989); de hecho, se puede observar una visible mejoría en la aproximación de la ubicación del frente cuando se disminuye el valor de  $\Delta x_3$  (Figura 4.14).

## 5. MÉTODO DEL GRADIENTE CONJUGADO

La aplicación de los algoritmos de integración temporal estudiados en las secciones 3.4 y 4.6, implica la solución de un sistema de ecuaciones lineales para cada iteración del método. Tal como se ha observado anteriormente, la solución de un problema específico puede requerir un número significativo de avances temporales, cada uno de los cuales requiere a su vez cierta cantidad de iteraciones para lograr la convergencia. Está claro entonces que hace falta resolver una gran cantidad de sistemas de ecuaciones lineales para conocer el flujo de agua y el estado de saturación en un dominio de flujo en particular, y si se quiere plantear soluciones numéricas competitivas al problema de flujo, debe disponerse de un método de solución de sistemas de ecuaciones muy rápido.

Otra característica importante de los sistemas de ecuaciones que resultan de intentar integrar la ecuación de Richards es su tamaño. Considérese un dominio de flujo bidimensional rectangular de 1 m de alto por 1 metro de profundidad, el cual será analizado discretizándolo con  $\Delta x = 1$  cm y  $\Delta z = 1$  cm. Si se considera la posibilidad que la presión  $\psi$  varíe en las fronteras de la región, tendremos en total  $(100/1+1)^2 = 10201$  puntos en los cuales hay que determinar la variación de  $\psi$  en el tiempo, lo cual no es un número excesivamente alto, pero da una idea de qué tan grandes pueden ser los sistemas de ecuaciones a resolver en cada iteración.

Algunos de los métodos de solución de sistemas de ecuaciones lineales utilizados en la práctica son:

- Métodos directos, como el método de Gauss o el de Gauss-Jordan. El número de operaciones de punto flotante (FLOP, por sus siglas en inglés) requerido es del orden de  $2n^3/3$  y  $2n^3/2$ , respectivamente (Chapra et al., 2003).
- Métodos iterativos como el método de Gauss-Seidel, el método de Jordan o el método de sobrerelajación sucesiva. El número de FLOP requerido por iteración en estos métodos es del orden de  $2n_z$ , donde  $n_z$  es el número de elementos no nulos de la matriz de coeficientes. En general son más recomendables que los métodos directos cuando  $n$  es mayor a 3 veces el número de iteraciones requerido para alcanzar la convergencia (Universidad Politécnica de Valencia [UPV], 2007).

Una alternativa a estos métodos clásicos es el que se conoce como el método del gradiente conjugado, el cual hace uso de las propiedades particulares de las matrices de coeficientes de los sistemas de ecuaciones para agilizar la convergencia de la solución.

El método del gradiente conjugado (CG) es un método iterativo de solución de sistemas de ecuaciones lineales de la forma  $[A]\{x\} = \{b\}$ , donde  $[A]_{n \times n}$  es una matriz simétrica definida positiva. El algoritmo CG alcanza una solución exacta (en ausencia de todo error de redondeo) para el sistema en cuestión en  $n$  iteraciones, lo cual es poco práctico pues, como se ha dicho,  $n$  puede llegar a ser bastante grande. Una mejor forma de ver este algoritmo es como método iterativo, en el que se efectúan las iteraciones hasta que se alcanza cierta condición de terminación.

Antes de estudiar el método del gradiente conjugado, es necesario introducir algunos conceptos y nomenclatura:

## 5.1. CONCEPTOS BÁSICOS

En notación matricial, un sistema de ecuaciones lineales puede ser escrito de la forma

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

donde  $\mathbf{A}$  es una matriz no singular  $n \times n$  y  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ . La solución de este sistema está dada por

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$$

La sucesión  $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$  denota la secuencia de soluciones aproximadas obtenidas en cada paso de un método iterativo.

El residuo del sistema es

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax},$$

de modo que  $\{\mathbf{r}^k\}_{k \geq 0}$  denota la secuencia de residuos

$$\mathbf{r}^k = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^k.$$

Una *norma vectorial* en  $\mathbb{R}^n$  es una función,  $\|\cdot\|$ , de  $\mathbb{R}^n$  a  $\mathbb{R}$  que cumple ciertas propiedades que se escapan del alcance del presente trabajo, y para las cuales se remite al lector a un texto de álgebra lineal. Dos tipos de normas son de interés, la norma euclidiana  $l_2$ , y la norma máxima o uniforme  $l_\infty$ :

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left\{ \sum_{i=1}^n x_i^2 \right\}^{1/2}; \quad \|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|,$$

donde  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^t$  (Burden et al., 2002). El *número de condición* de  $\mathbf{A}$  relativo a la norma  $\|\cdot\|$  se define como

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|$$

Donde  $\kappa(\mathbf{A})$  es finito y mayor a 1 para matrices no singulares. Se dice que una matriz está bien condicionada si su número de condición es cercano a 1, y mal condicionada si es significativamente mayor a 1 (Burden et al., 2002).

Puede demostrarse que  $\mathbf{x}^*$  es una solución del sistema de ecuaciones lineales  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  si y sólo si  $\mathbf{x}^*$  minimiza la función

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T \mathbf{b}$$

en un subconjunto  $S \subset \mathbb{R}^n$ . El gradiente de  $\phi(\mathbf{x})$  está dado por

$$\nabla \phi(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} = -\mathbf{r}$$

De esta manera, la solución de un sistema de ecuaciones lineales puede verse como un problema de minimización. El método del gradiente conjugado consiste esencialmente en partir de  $\mathbf{x}^0$ , una suposición de la solución  $\mathbf{x}^*$  e ir mejorando sucesivamente esta aproximación usando la fórmula

$$\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k-1} + \alpha^k \mathbf{p}^k, \quad (5.1)$$

donde  $\mathbf{p}_{k+1}$  es el *vector dirección de búsqueda* y  $\alpha_{k+1}$  es un escalar que determina qué tanto se avanza en la dirección de  $\mathbf{p}_{k+1}$ . Las relaciones entre  $\alpha$ ,  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{r}$  se obtienen usando la propiedad de minimización de la iteración del método del gradiente conjugado, pero el trabajo presente se limitará a presentarlas sin ahondar en las demostraciones. Los detalles completos de estas deducciones se encuentran en (Kelley, 1995).

$$\alpha^k = \frac{(\mathbf{r}^{k-1})^T \mathbf{r}^{k-1}}{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k} = \frac{\rho^{k-1}}{(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A} \mathbf{p}^k} \quad (5.2)$$

$$\mathbf{r}^k = \mathbf{r}^{k-1} - \alpha^k \mathbf{A} \mathbf{p}^k \quad (5.3)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \beta^k \mathbf{p}^k \quad (5.4)$$

$$\beta^k = \frac{(\mathbf{r}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{r}^{k-1})^T \mathbf{r}^{k-1}} = \frac{\rho^k}{\rho^{k-1}} \quad (5.5)$$

donde  $\rho^k = (\mathbf{r}^k)^T \mathbf{r}^k$ . Se puede observar que las ecuaciones (5.1) a (5.5) indican un algoritmo, el cual se presenta con detalle a continuación:

**Algoritmo 5.1.** Método del gradiente conjugado

1.  $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$
2.  $\mathbf{p}^1 = \mathbf{r}^0$
3. Para  $k = 1$  hasta  $k_{\max}$
4.     Calcular  $\alpha^k$  usando (5.2)
5.     Calcular  $\mathbf{x}^k$  usando (5.1)
6.     Calcular  $\mathbf{r}^k$  usando (5.3)
7.     Si  $\|\mathbf{r}^k\| \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
8.     Calcular  $\beta^k$  con (5.5) y  $\mathbf{p}^{k+1}$  con (5.4)
9.     Siguiendo  $k$

Las iteraciones en el algoritmo 5.1 se realizan hasta que la norma del vector residual  $\mathbf{r}^k$  sea menor o igual a cierta tolerancia  $\varepsilon_{\text{tol}}$ . Si el número de iteraciones efectuadas excede el límite  $k_{\max}$ , el proceso iterativo se finaliza.

Si se observa con detenimiento el algoritmo anterior, puede notarse que para la aplicación del método del gradiente conjugado no se necesita almacenar o modificar la matriz  $\mathbf{A}$ , tan sólo hace falta una rutina que multiplique  $\mathbf{A}$  por un vector determinado. Este hecho representa una gran ventaja para el manejo de matrices grandes con un alto número de elementos nulos, como las obtenidas en la solución de la ecuación de Richards. Los detalles de la implementación del método del gradiente conjugado en el contexto del presente trabajo se presentan en la sección 5.3.

Puede demostrarse que el método del gradiente conjugado converge en un número de iteraciones proporcional a  $O(\sqrt{\kappa(\mathbf{A})})$ , lo cual implica una convergencia lenta para sistemas mal condicionados (Burden, 2002).

## 5.2. PRECONDICIONAMIENTO

Se desea resolver un sistema de ecuaciones lineales cuya matriz de coeficientes  $\mathbf{A}$  está mal condicionada. Sea  $\mathbf{M}$  una matriz de preconditionamiento tal que  $\kappa(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) \ll \kappa(\mathbf{A})$ . Entonces, al aplicar el método del gradiente conjugado sobre el sistema preconditionado, se llega a

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b},$$

y se obtendrá una convergencia mucho más rápida. El algoritmo 5.1 puede ser modificado de manera que la multiplicación del sistema algebraico original por  $\mathbf{M}^{-1}$  esté implícita en el procedimiento y no tenga realmente que hacerse. El algoritmo resultante se presenta en el 5.2, mientras que para detalles se remite al lector a Kelley (1995) y Burden (2002):

La cuestión ahora radica en la selección de la matriz  $\mathbf{M}$  de preconditionamiento tal que satisfaga las siguientes condiciones (Saukh, 2003):

- $\mathbf{M}$  debe ser una buena aproximación de  $\mathbf{A}$
- $\mathbf{M}$  puede obtenerse a partir de  $\mathbf{A}$  de manera sencilla y usando estrategias efectivas de manejo de memoria.
- El sistema de ecuaciones  $\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  debe ser más fácil de resolver que el sistema  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ . Esta condición nace del algoritmo 5.2, donde hay que resolver varias veces sistemas de ecuaciones del primer tipo, y no tendría ningún sentido que para resolver cierto problema haya que resolver otro problema más complicado.

Una de las alternativas más populares en el ejercicio de la ciencia e ingeniería, y la opción que se ha decidido usar para el presente trabajo, es tomar  $\mathbf{M}$  igual a  $\mathbf{L}$ , el resultado de la factorización incompleta de Cholesky  $\mathbf{L}\mathbf{L}^T$  de  $\mathbf{A}$ . En la siguiente sección se describe con detalle el proceso de cálculo de dicha factorización para su aplicación en el problema de flujo en medio poroso.

## 5.3. FACTORIZACIÓN INCOMPLETA DE CHOLESKY

La factorización de Cholesky es un procedimiento para descomponer una matriz simétrica definida positiva en una matriz triangular inferior,  $\mathbf{L}$ , y su transpuesta,  $\mathbf{L}^T$ . En el contexto de la construcción de la matriz de preconditionamiento para el método del gradiente conjugado, este método de factorización generalmente se aplica de manera *incompleta*, esto es, sólo se calcula el valor  $L_{i,j}$  para aquellas posiciones  $i, j$  en las que  $A$  es no nulo.

**Algoritmo 5.2.** Método del gradiente conjugado precondicionado

1.  $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$
2.  $\mathbf{M}\mathbf{z}^0 = \mathbf{r}^0$
3.  $\mathbf{M}\mathbf{p}^1 = \mathbf{z}^0$
4.  $\rho^0 = (\mathbf{z}^0)^T \mathbf{z}^0$
5. Para  $k = 1$  hasta  $k_{\max}$
6.  $\alpha^k = \rho^{k-1} / (\mathbf{p}^k)^T \mathbf{A}\mathbf{p}^k$
7.  $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k-1} + \alpha^k \mathbf{p}^k$
8.  $\mathbf{r}^k = \mathbf{r}^{k-1} - \alpha^k \mathbf{A}\mathbf{p}^k$
9. Si  $\|\mathbf{r}^k\| \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ , terminar el ciclo; si no, continuar
10.  $\mathbf{M}\mathbf{z}^k = \mathbf{r}^k$
11.  $\rho^k = (\mathbf{z}^k)^T \mathbf{z}^k$
12.  $\beta^k = \rho^k / \rho^{k-1}$
13.  $\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{z}^k + \beta^k \mathbf{p}^k$
14. Siguiente  $k$
15. Repetir los pasos del 6 al 13.

A modo de ilustrar este concepto, considérese la matriz  $\mathbf{A}$  :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.2 & 0.1 & 1 & 1 & 0 \\ 0.1 & 4 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 60 & 0 & -2 \\ 1 & 1 & 0 & 8 & 4 \\ 0 & -1 & -2 & 4 & 700 \end{bmatrix}$$

Las factorizaciones completa e incompleta de Cholesky están dadas por las matrices  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{C}$ , respectivamente:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0.4472 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2236 & 1.9875 & 0 & 0 & 0 \\ 2.2361 & -0.7547 & 7.3777 & 0 & 0 \\ 2.2361 & 0.2516 & -0.6520 & 1.5848 & 0 \\ 0 & -0.5032 & -0.3226 & 2.4711 & 26.3351 \end{bmatrix}; \mathbf{BB}^T = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0.4472 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2236 & 1.9875 & 0 & 0 & 0 \\ 2.2361 & -0.7547 & 7.3777 & 0 & 0 \\ 2.2361 & 0.2516 & 0 & 1.7137 & 0 \\ 0 & -0.5032 & -0.3226 & 2.4080 & 26.3409 \end{bmatrix}; \mathbf{CC}^T \approx \mathbf{A}$$

Obsérvese las diferencia entre  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{C}$ . El elemento  $B_{4,3}$  es diferente de cero, mientras que  $C_{4,3}$  es igual a cero, y las columnas 4 y 5 no coinciden numéricamente. Esto se debe a que el algoritmo de factorización de Cholesky no garantiza que aquellas posiciones nulas en la matriz original seguirán siéndolo en la matriz factor, mientras que en la factorización incompleta se obliga a que sea así. Esta primera diferencia entre las matrices  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{C}$  produce las diferencias entre las columnas 4 y 5 que se habían mencionado. La idea de la aplicación de la factorización incompleta de Cholesky es obtener una matriz de preconditionamiento cumpliendo las condiciones mencionadas anteriormente, por eso ésta resulta una mejor opción que la factorización normal pues de este modo la matriz  $\mathbf{M}$  consumirá no más que la misma cantidad de recursos de memoria que  $\mathbf{A}$ .

El algoritmo 5.3 presenta el proceso para convertir la parte triangular inferior de la matriz  $\mathbf{A}$  en la matriz  $\mathbf{L}$ . Este algoritmo se puede modificar para que haga uso de la metodología de almacenamiento  $[A'], [P_A]$  y devuelva un par  $[L'], [P_L]$  que utilice la misma estrategia de reducción del uso de memoria.

Con el fin de ilustrar el funcionamiento del método del gradiente conjugado preconditionado, considérese el sistema bidimensional

$$\begin{bmatrix} 4.0000 & 4.0000 \\ 2.0000 & 2.0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.1472 \\ 9.0579 \end{bmatrix},$$

La función a minimizar asociada a este problema está dada por

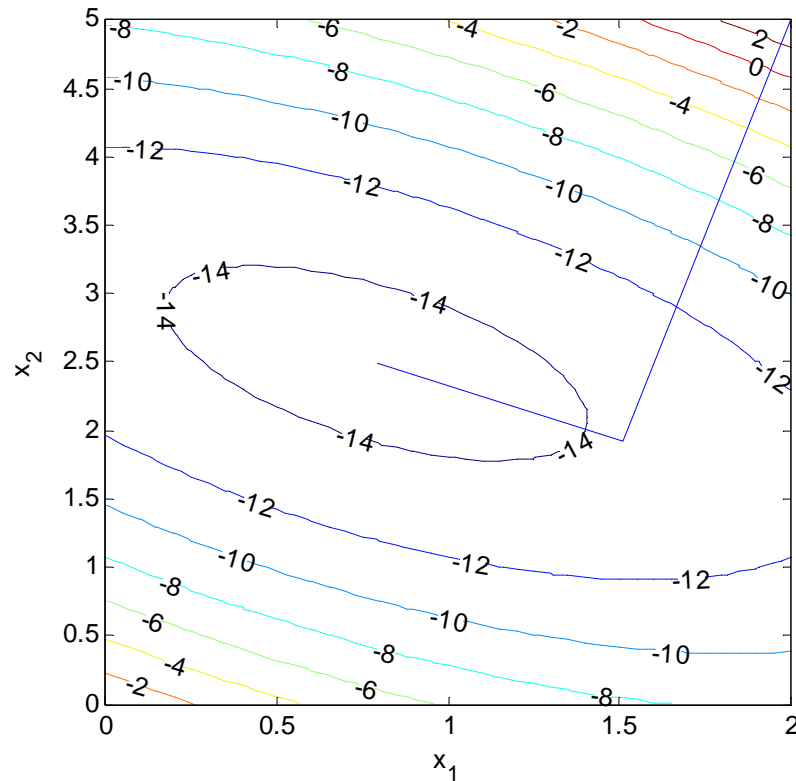
$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b} = 2.0000x_1^2 + 2.0000x_1x_2 + 1.5000x_2^2 - 8.1472x_1 - 9.0579x_2$$

**Algoritmo 5.3.** Factorización incompleta de Cholesky sin relleno

1. Tome  $n$  igual al tamaño de  $\mathbf{A}$  en cada una de sus dimensiones.
2. Para  $j=1$  hasta  $n$ ,
3. 
$$A_{j,j} = \sqrt{A_{j,j}}$$
4. Para  $k=1$  hasta  $j-1$ ,
5. Si  $A_{j,k} \approx 0$ , ejecutar las líneas 6 a 8; si no, pasar a 9:
6. Para  $i=j+1$  hasta  $n$ ,
7. Si  $A_{i,k} \approx 0$  y  $A_{i,j} \approx 0$ , hacer  $A_{i,j} = A_{i,j} - A_{i,k}A_{j,k}$
8. Siguiendo  $i$
9. Siguiendo  $k$
10. Para  $i=j+1$  hasta  $n$ ,
11. Si  $A_{i,j} \approx 0$ , ejecutar las líneas 12 y 13; si no, pasar a 14
12. 
$$A_{i,j} = A_{i,j}/A_{j,j}$$
13. 
$$A_{i,i} = A_{i,i} - (A_{i,j})^2$$
14. Siguiendo  $i$
15. Siguiendo  $j$

El sistema de ecuaciones se ha resuelto utilizando la factorización incompleta de Cholesky de la matriz de coeficientes como preconditionador. Se inicia la búsqueda de la solución con la suposición  $\mathbf{x} = [2 \ 5]^T$  y se usa como criterio de paro que la norma del residuo sea menor a  $1 \times 10^{-5}$ . La solución final  $\mathbf{x} = [0.7907 \ 2.4922]^T$  se encuentra después de 2 iteraciones. En la figura 5.1 se presenta la sucesión de valores  $\mathbf{x}^k$  junto a un diagrama de contornos de  $\phi(\mathbf{x})$ . Se puede observar fácilmente que la solución del sistema de ecuaciones minimiza la función asociada, además que dicha solución se alcanza en un número de iteraciones relativamente bajo.

Figura 5.1. Aplicación del método del gradiente conjugado a un problema bidimensional



#### 5.4. IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DEL GRADIENTE CONJUGADO

Tal como se mencionó en las secciones 3.3.3 y 4.5.5, la naturaleza del problema de flujo de agua en medio poroso confiere propiedades a los sistemas de ecuaciones lineales asociados, que pueden explotarse para facilitar su solución. Entre estas características está el hecho que las matrices  $[A]$ ,  $[F]$  y  $[G]$  derivadas tanto del método de diferencias finitas como del método de elementos finitos sean definidas positivas. Los sistemas de ecuaciones lineales a resolver en los algoritmos de integración temporal 3.1 a 3.3 y 4.1 a 4.3 pueden escribirse todos de la forma

$$[U]\{\psi\} = \{d\},$$

donde  $[U] = [A] + [G]/\Delta t$ ,  $[U] = [A]/2 + [G]/\Delta t$  o  $[U] = [A]/2 + [F]/\Delta t$ , y dado que  $\Delta t > 0$ , en virtud de las propiedades de las matrices definidas positivas mencionadas en 3.3.3 y 4.5.5, se puede asegurar que  $[U]$  es también definida positiva. El método del gradiente conjugado es por tanto aplicable para la integración temporal de la ecuación de

Richards. Como preconditionador se puede utilizar la factorización incompleta de Cholesky de la matriz  $[U]$ .

La posibilidad de expresar las matrices  $[A]$  y  $[F]$  por medio de un par  $[A'], [P_A]$  se puede usar para realizar las multiplicaciones entre matrices y vectores indicadas en el algoritmo 5.2 de manera más eficiente. Sea  $\{r\} = [A]\{p\}$ , entonces los elementos de  $\{r\}$  pueden calcularse según

$$r_i = \sum_k A'_{ik} p_{ij}, \text{ donde } j = P_{A,i,k}$$

Dado que la fila  $i$  de  $[A']$  contiene menos elementos que la fila  $i$  de  $[A]$ , la operación anterior consume menos operaciones que la multiplicación normal entre matrices y vectores.

## 6. SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL PROBLEMA DE FLUJO EN MEDIOS POROSOS

La ecuación de Richards es, ante todo, una expresión matemática que modela un problema real, por tanto, cualquier solución analítica o aproximada que se obtenga de ella debe satisfacer todos los principios físicos que rigen su comportamiento para ser considerada válida. Aunque la afirmación anterior puede sonar obvia, la verdad es que es un punto en el que se debe poner especial énfasis. Cualquier método de solución numérica introduce ciertos términos de error que pueden resultar en la violación de alguno de los principios físicos base, por esto es muy importante analizar el comportamiento de cada uno de los esquemas numéricos estudiados en los capítulos anteriores, para así poder determinar cuáles están más de acuerdo con la realidad física.

En el presente capítulo se someterán a evaluación los métodos de discretización espacial (método de diferencias finitas y método de elementos finitos) e integración temporal (Esquemas 1 a 3 de las secciones 3.4 y 4.6) discutidos en los capítulos anteriores, en virtud de su comportamiento en cuanto a conservación de masa y variación de la presión en estado saturado, dos de los principios físicos violados más comúnmente al intentar obtener una solución de la ecuación de Richards. Se analizará también cómo la descripción de las propiedades de los materiales afecta la solución numérica.

### 6.1. CONSERVACIÓN DE MASA

En la sección 2.2.1 se describieron las diferentes formas de escribir la ecuación de Richards y sus características, y se explicó porqué tanto la forma mixta como la forma basada en la presión son útiles en la práctica para obtener soluciones numéricas del estado de flujo de determinado problema; aún así, diversos autores (Celia, et al. 1990; Bouloutas, 1989) advierten que el uso de la forma basada en la presión de la ecuación de Richards produce soluciones que violan el principio físico de conservación de masa. Para comparar el comportamiento de estos dos enfoques en términos de balance de masa, defínase el siguiente índice de la calidad del balance de masa de cierta solución numérica de la ecuación de Richards (Celia, et al. 1990):

$$BM(t) = \frac{\text{Cambio en la masa acumulada en el dominio, } M_1(t)}{\text{Masa neta que ingresa al dominio, } M_2(t)} \quad (6.1)$$

A continuación se presenta la descripción de cómo se calcula este índice, bien sea que se use el método de elementos finitos o el método de diferencias finitas.

El cambio en la masa adicional acumulada en el dominio desde el inicio de la simulación hasta el nivel temporal  $J$ ,  $M_1^J$ , se calcula numéricamente como la sumatoria de la diferencia entre el contenido de humedad final e inicial, multiplicado por el área aferente de cada uno de los nodos de la discretización espacial, esto es

$$M_1^J = \sum_{n=1}^N [(\theta_n^J - \theta_n^0)(A_{e,n})] \quad (6.2)$$

donde  $N$  es el número total de nodos, y  $A_{e,n}$  es el área aferente correspondiente al  $n$ -ésimo nodo de la malla. Si se está usando el método de diferencias finitas, las áreas aferentes se calculan como en la Figura 3.5; pero si se usan elementos finitos, se calculan como en la Figura 1.3.

La masa neta que ingresa al dominio en el periodo comprendido desde el inicio de la simulación hasta alcanzar el nivel temporal  $J$ ,  $M_2^J$ , se calcula como el flujo a través de la frontera del dominio multiplicado por el incremento temporal. Si toda la frontera estuviese sometida a un cierto flujo prescrito a través de ella como condición de borde, se podría calcular  $M_2^J$  incluso antes de iniciar la simulación; pero si existen segmentos de la frontera con condiciones de borde del tipo Dirichlet, el flujo a través de las fronteras dependerá del estado de flujo en el dominio y variará con el tiempo, lo cual lo hace objeto de cálculo. La forma como se realiza la aproximación de estas cantidades depende del tipo de discretización espacial utilizado para la solución del problema bidimensional, bien sea una grilla de diferencias finitas o una malla de elementos finitos. A continuación se presenta la metodología de cálculo para ambos enfoques de solución.

### 6.1.1. Índice de balance de masa para el método de elementos finitos

Recordando que el  $n$ -ésimo elemento del vector  $\{Q\}$  (donde  $n$  es un nodo de la frontera) representa el aporte de  $n$  al flujo a través de su perímetro aferente, podemos calcular  $M_2(t)$  en el nivel temporal  $J$  como la suma de todos los elementos de  $\{Q\}$  en dicho nivel temporal, multiplicado por el incremento temporal, esto es

$$M_2^J = \sum_{j=1}^J \sum_{n=1}^N (Q_n^j \Delta t) \quad (6.3)$$

La manera de calcular el vector  $\{Q\}$ , cuando éste no está definido por las condiciones de frontera, está implícita en la formulación del método de elementos finitos. Supóngase que se ha utilizado el esquema 2 de integración temporal para determinar el estado de flujo en el nivel temporal  $j+1$ , para lo cual fue necesario realizar  $k+1$  iteraciones. El vector  $\{Q\}^{j+1/2}$  se puede entonces despejar directamente de la fórmula de recurrencia del esquema de integración:

$$\begin{aligned} \{Q\}^{j+1/2} = & \left( \frac{1}{2}[A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} + \{B\}^{j+1/2} - \frac{1}{\Delta t_j}[G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} \\ & + \frac{1}{2}[A]^j \{\psi\}^j + \frac{1}{\Delta t_j}[F] \left( \{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j \right), \end{aligned}$$

donde todos los vectores y matrices de coeficientes son los mismos que los usados para calcular las iteraciones, sólo que sin las alteraciones de la aplicación del método alternativo para el manejo de las condiciones de Dirichlet. Recuérdese que el propósito de estas alteraciones es eliminar las ecuaciones relacionadas con los nodos que hacen parte de la frontera  $\Gamma_D$ , y dado que es en estos nodos donde nos interesa determinar los elementos de  $\{Q\}$ , es necesario recuperar estas ecuaciones.

### 6.1.2. Índice de balance de masa para el método de diferencias finitas

La determinación del flujo en las fronteras sometidas a condiciones de Dirichlet para el caso del método de diferencias finitas no es tan evidente como para el caso de elementos finitos. Recordando la ley de Darcy, el flujo específico de agua se puede escribir como el producto de la conductividad hidráulica y la variación espacial de la cabeza de presión; por tanto, conocidos los valores de presión en los nodos de la grilla de diferencias finitas, se puede aproximar el valor real del flujo específico usando las fórmulas de diferencias finitas.

Sea  $n$  un nodo de la grilla de diferencias finitas que pertenece a la frontera y está definido por el par  $(i, j)$ . Si este nodo está sometido a una condición de borde de presión prescrita, sobre él puede presentarse flujo específico en la dirección  $x$ , en la dirección  $z$ , o en ambas al tiempo, dependiendo del tipo de nodo de frontera que sea (Figura 3.8). Las aproximaciones en diferencias finitas para cada uno de los casos son:

Para nodos frontera tipo 1, 5 y 6,

$$q_{i,j}^z = -K_{i,j+1/2} \left( \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta z^+} \right) + K_{i,j+1/2} \quad (6.4)$$

Para nodos frontera tipo 2, 7 y 8,

$$q_{i,j}^z = -K_{i,j-1/2} \left( \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta z^-} \right) + K_{i,j-1/2} \quad (6.5)$$

Para nodos frontera tipo 3, 5 y 7,

$$q_{i,j}^x = -K_{i+1/2,j} \left( \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x^+} \right) + K_{i+1/2,j} \quad (6.6)$$

Para nodos frontera tipo 4, 6 y 8,

$$q_{i,j}^x = -K_{i-1/2,j} \left( \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta x^-} \right) + K_{i-1/2,j} \quad (6.7)$$

Una de las desventajas del método de diferencias finitas es que, dependiendo de las condiciones de borde, algunos nodos de las esquinas pueden o no participar en el cálculo de las cabezas de presión en el dominio. Para que una esquina en particular haga parte del proceso de solución, debe de contar entre sus vecinos con al menos un nodo de frontera con condición de borde tipo Neumann, de modo que participe en la ecuación que define la presión en dicho punto. Si la esquina en cuestión no cumple esta condición, no debe calcularse el flujo a través de ella, pues el hecho que no aparezca en ninguna de las ecuaciones del método de diferencias finitas es numéricamente equivalente a decir que no se presenta ingreso de humedad al dominio a través de él, y su inclusión traería errores en el balance de masa por sobreestimación de la masa que ingresa al dominio.

Conocidos los valores de flujo específico, la masa neta que ingresa al dominio se calcula como

$$M_2^J = \sum_{j=1}^J \sum_{n=1}^N \left[ (q_n^{j,x} l_{x,n} + q_n^{j,z} l_{z,n}) \Delta t \right] \quad (6.8)$$

donde  $q_n^{j,z}$  es la componente del flujo específico en dirección  $z$  a través del nodo  $n$  en el nivel temporal  $j$ ,  $q_n^{j,x}$  la componente de dirección  $x$ , y  $l_{n,z}, l_{n,x}$  las longitudes aferentes asociadas al nodo en cuestión en dirección  $z$  y  $x$ , respectivamente.

### 6.1.3. Comparación entre esquemas de integración temporal

Para la evaluación de la calidad del balance de masa entre la formulación mixta y la forma basada en la presión de la ecuación de Richards, se han comparado los resultados arrojados por la aplicación de los esquemas 1 y 2 de integración temporal a la solución de los problemas de flujo definidos en la Tabla 4.1, todos calculados usando MEF con elementos rectangulares y matrices de masa concentradas. Se han calculado soluciones para diferentes valores de incremento temporal, y en cada caso se ha determinado el índice de balance de masa. Los resultados se pueden apreciar en las Figuras 6.1 a 6.4.

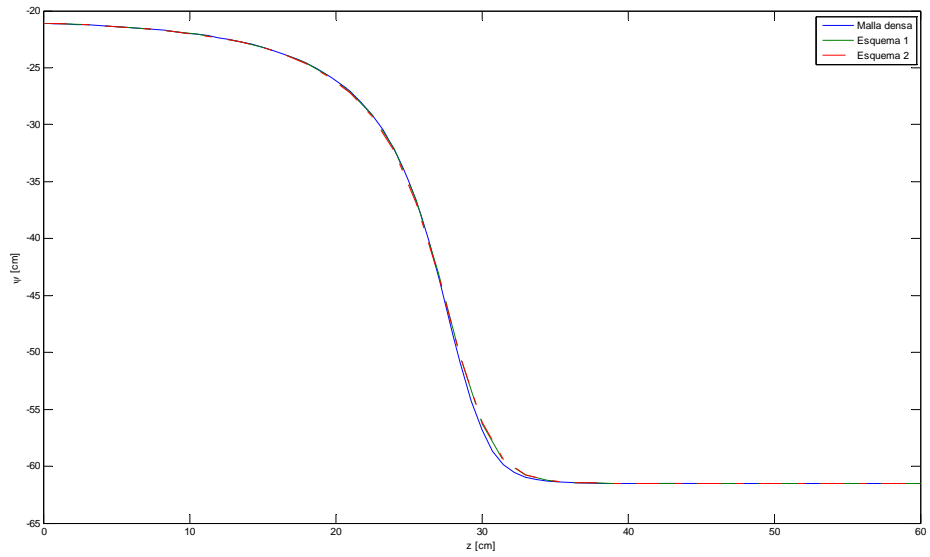
Tal como puede observarse en la Figura 6.1, para la solución del problema con el grupo de datos 2A, no existe diferencia apreciable entre los resultados del perfil de presión obtenidos tanto con el esquema 1 como con en esquema 2. Los índices de balance de masa obtenidos en cada simulación son cercanos a la unidad, lo cual muestra que la solución arrojada por cada esquema es satisfactoria.

En cuanto al problema con el grupo de datos 2B, la Figura 6.3 muestra que el esquema de integración 1 subestima el avance del frente húmedo, mientras que el esquema de integración lo sobreestima. Este comportamiento ya había sido explicado con anterioridad,

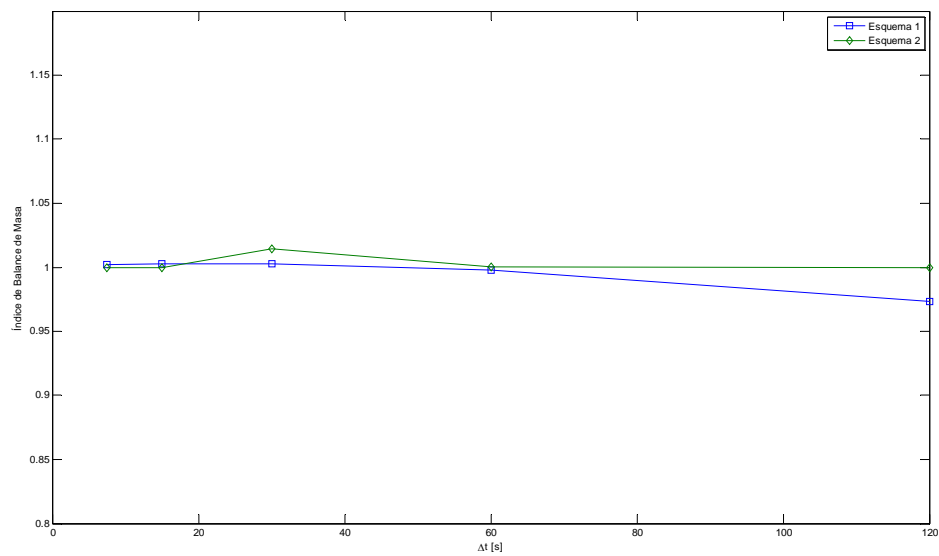
pero con el fin de determinar si el esquema de integración utilizado afecta de algún modo el resultado, se determinó de nuevo el perfil de presiones con el esquema 1 usando un  $\Delta x_3$  menor, igual a 1.25 cm. El nuevo perfil, observado en la Figura 6.5 muestra que, aún usando una malla más densa, el esquema de integración 1 predice todavía de manera errónea la ubicación del frente húmedo. Con respecto al balance de masa, los índices calculados para cada simulación, consignados en la Figura 6.4, muestran el comportamiento claramente superior del esquema 2 de integración, y una subestimación de alrededor del 20% del cambio de contenido de humedad en el dominio por parte del esquema 1, incluso usando una malla más densa (Figura 6.5). Cabe notar que no se logró alcanzar una solución usando el esquema 2 para  $\Delta t = 4.8$  min debido a un error por violación del principio de presiones límite.

De los resultados anteriores se puede concluir que las soluciones numéricas obtenidas usando el enfoque basado en la presión de la ecuación de Richards no necesariamente cumplen el principio de balance de masa, mientras que las soluciones basadas en el enfoque mixto lo cumplen de manera satisfactoria. Esta conclusión está de acuerdo con otros resultados encontrados en la literatura (Celia, et al. 1990), (Bouloutas, 1989). La diferencia entre los dos enfoques se debe a la forma como se maneja la derivada temporal de la ecuación de Richards en cada uno de ellos (Celia et al.); en el primero, al hacer la transformación definida en (2.5) para eliminar la variable contenido humedad de la ecuación, se introduce un error adicional relacionado con la estimación de la capacidad específica de humedad, mientras que en el segundo, aunque permanece la necesidad de estimar  $C(\psi)$ , el uso de series de Taylor se hace una aproximación más robusta de la derivada temporal usando series de Taylor.

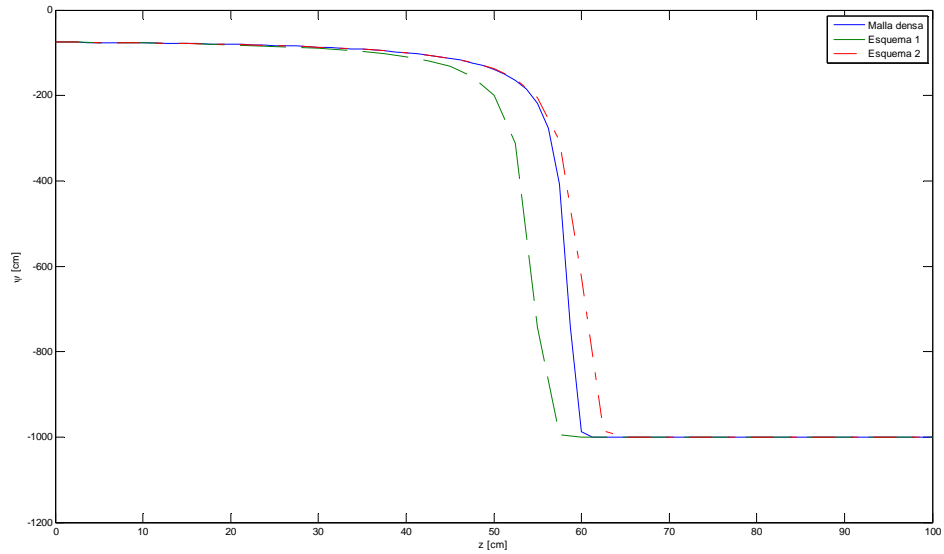
**Figura 6.1.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 0.3 horas de infiltración, usando los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2A.  $\Delta t = 7.5$  s



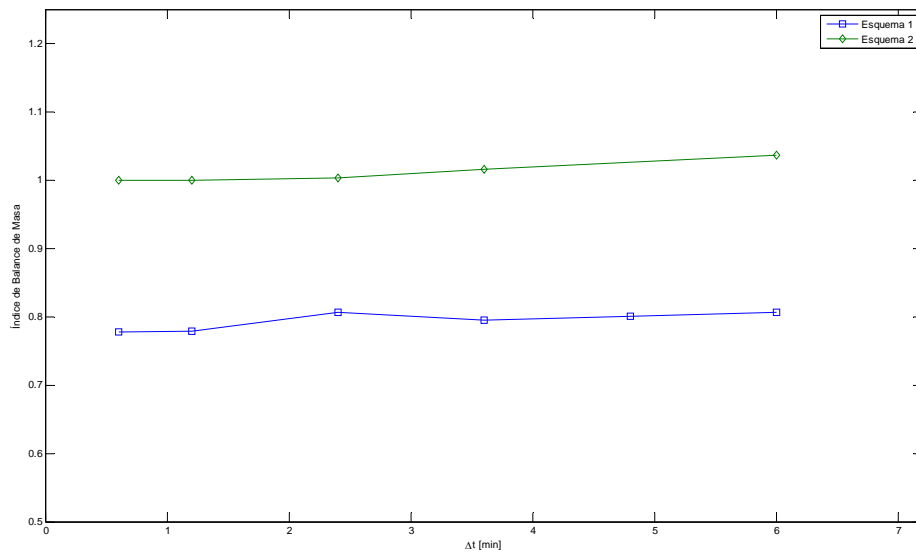
**Figura 6.2.** Variación del Índice de Balance de masa como función de  $\Delta t$ , para los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2A



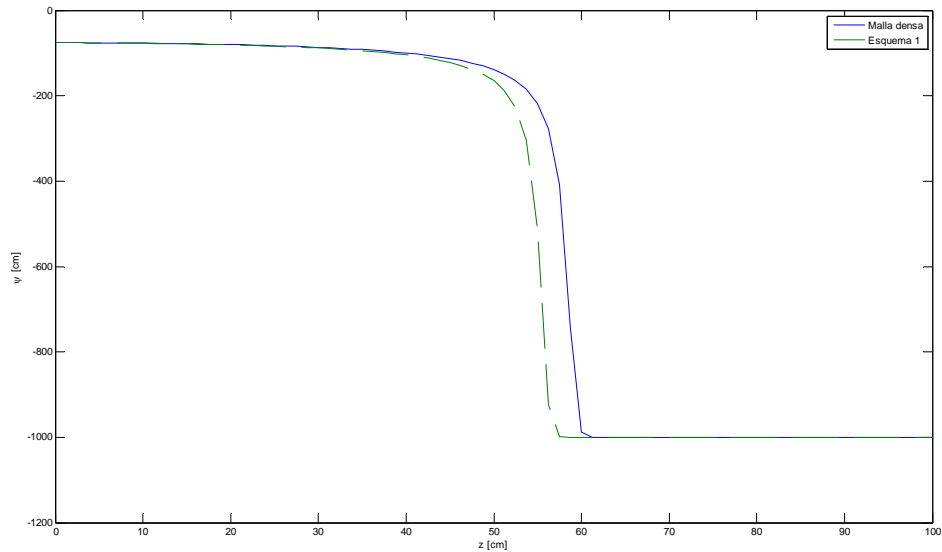
**Figura 6.3.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B.  $\Delta t = 0.6$  min



**Figura 6.4.** Variación del Índice de Balance de masa como función de  $\Delta t$ , para los esquemas 1 y 2 de integración temporal y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B



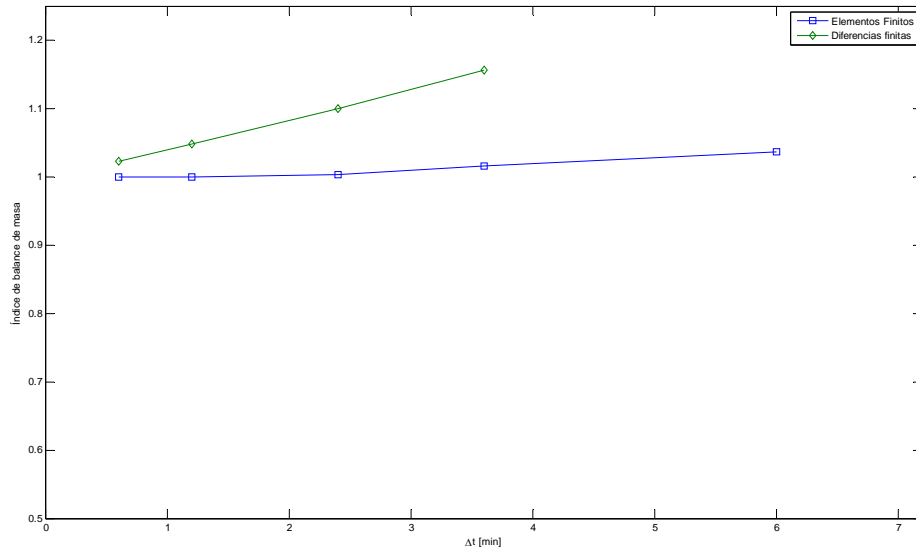
**Figura 6.5.** Perfil de presión en la columna central de suelo luego de 24 horas de infiltración, usando el esquema 1 y el método de elementos finitos. Grupo de datos 2B.  $\Delta x_3 = 1.25$  cm. Índice de Balance de Masa, BM = 0.8668



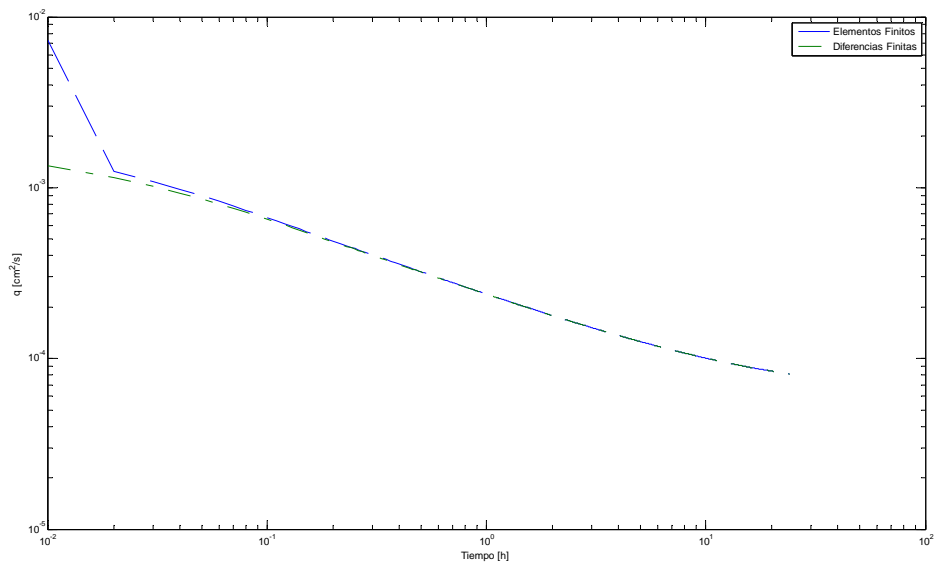
La discusión anterior aplica tanto para el método de elementos finitos como el de diferencias finitas. La Figura 6.6 es similar a la Figura 6.4, sólo que en este caso se compara la calidad del balance de masa de los resultados obtenidos usando MEF y MDF para el problema del grupo de datos B. La gráfica muestra que el comportamiento del método de diferencias finitas no es tan buena como el de elementos finitos, pero tiene la tendencia a mejorar a medida que disminuye  $\Delta t$ . En general, la calidad del balance de masa es similar independiente de que se use elementos finitos o diferencias finitas; el factor realmente determinante es la forma de la ecuación de Richards que se use para elaborar el modelo (Celia, et al. 1990).

Vale la pena realizar una comparación entre los valores de flujo a través de las fronteras calculados con el método de elementos finitos y el método de diferencias finitas. En la Figura 6.7 se presentan los valores de flujo específico a través de la frontera superior del problema con el grupo de datos 2B, calculados usando ambos métodos, el esquema 2 de integración temporal, y un  $\Delta t$  igual a 0.6 min. De la gráfica se puede apreciar que los resultados obtenidos por ambos métodos son muy similares, excepto en el primer nivel temporal, donde la tendencia de la curva permite pensar que el método de elementos finitos ha sobreestimado el flujo.

**Figura 6.6.** Variación del Índice de Balance de masa como función de  $\Delta t$ , para el esquema 2 de integración temporal, usando elementos finitos y diferencias finitas. Grupo de datos 2B



**Figura 6.7.** Flujo a través de la frontera superior del dominio. Grupo de datos B.  $\Delta t = 1.2$  min



## 6.2. FLUJO EN MEDIO SATURADO

Durante un proceso de infiltración, es posible que algunos puntos del dominio de flujo alcancen el estado saturado antes que otros. Esta situación es común cuando el agua pasa de un suelo permeable a uno menos permeable: En este caso, dado que el agua viaja más lentamente en el suelo menos permeable que en el permeable, habrá una tendencia a la acumulación de agua en la interfase entre los dos suelos, y el suelo permeable se saturará. La ecuación de Richards tal como se presenta en (2.4) es válida tanto para flujo en un medio saturado como en un medio parcialmente saturado; por tanto, el análisis y la discusión de la solución numérica realizados hasta ahora son también válidos en el estado saturado, siempre y cuando se tenga la precaución de tener en cuenta las particularidades del flujo en medio saturado.

Sea que un determinado punto del dominio de flujo pasa de estado no saturado a estado saturado, esto es, ha alcanzado el contenido de humedad de saturación. En este punto, la conductividad hidráulica será igual a la conductividad de saturación, y la capacidad específica de humedad será igual a cero. En virtud de lo anterior, el término diferencial temporal en (2.4) desaparecerá también, pues en estado saturado no hay variación del contenido de humedad, y la ecuación de Richards pasará de ser una ecuación parabólica a una elíptica (Neuman, 1973). Este cambio súbito en la naturaleza de la ecuación diferencial que gobierna el fenómeno de infiltración no es tenido en cuenta en los esquemas de integración temporal 1 y 2, los cuales toman la ecuación diferencial en su forma original para todo el intervalo de simulación. Si se quieren obtener soluciones acordes con esta realidad física para problemas con áreas saturadas, es necesario replantear el esquema a utilizar para el avance temporal.

Una posible forma de manejar esta dificultad, planteada por Neuman (1973), consiste en utilizar un esquema de integración completamente implícito, tal como el Esquema 3. Esta aproximación, aún así, trae una desventaja evidente: Su implementación implica pasar de una aproximación de la derivada temporal con error de truncamiento de orden  $O(\Delta t^2)$  (Esquema 2), a una con error de orden  $O(\Delta t)$  (Esquema 3). Este aumento en el orden del error de truncamiento puede manejarse si se pasa del esquema 2 de integración al esquema 3 sólo cuando un área del dominio alcanza la saturación.

Para facilitar el paso de un esquema a otro, y aprovechando las similitudes entre los esquemas 2 y 3, se puede escribir las ecuaciones (4.54) y (4.56) de la forma general

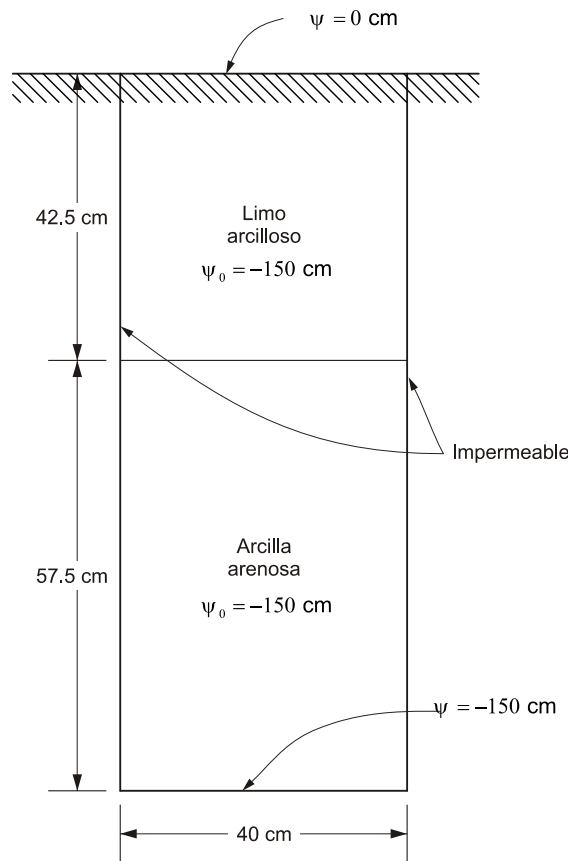
$$\left( \alpha_1 [A]^{j+1,k} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \right) \{\psi\}^{j+1,k+1} = \{Q\}^{j+\alpha_1} - \{B\}^{j+\alpha_1} + \frac{1}{\Delta t_j} [G]^{j+1,k} \{\psi\}^{j+1,k} - \alpha_2 [A]^j \{\psi\}^j - \frac{1}{\Delta t_j} [F] (\{\theta\}^{j+1,k} - \{\theta\}^j) \quad (6.9)$$

Con la ecuación de recurrencia escrita en esta forma, basta con cambiar los coeficientes  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  para pasar de un esquema de avance a otro. Si se hace  $\alpha_1 = 1/2, \alpha_2 = 1/2$  en (6.9), se llega al esquema 2, y si se hace  $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0$ , se obtiene el esquema 3.

Supóngase que desea determinarse la presión de poros en cierto nodo  $n$  de la discretización espacial para el nivel temporal  $j+1$ . La condición usada para definir el esquema de integración a utilizar depende de si se utiliza el método de elementos finitos o el método de diferencias finitas:

- Para el método de diferencias finitas (MDF): La condición en este caso es evidente. Si  $\psi_n^j \leq 0$ , se utiliza el esquema 2 de integración para escribir la ecuación asociada al nodo  $n$ ; de lo contrario, se utiliza el esquema 3.
- Para el método de elementos finitos (MEF): Recuérdese que en elementos finitos las ecuaciones se escriben en grupo por cada elemento de la malla. Sea que el nodo  $n$  pertenece a cierto elemento  $e$  junto con los nodos  $p$ ,  $q$  y  $r$ . Si se cumple  $\max(\psi_n^j, \psi_p^j, \psi_q^j, \psi_r^j) \leq 0$ , se utiliza el esquema 2 para escribir las ecuaciones asociadas a cada uno de los nodos de  $e$ ; de lo contrario, se utiliza el esquema 3.

**Figura 6.8.** Geometría del dominio de flujo para la simulación 3



**Parámetros del Modelo van-Genutchen-Mualem:**

Limo arcilloso:

$$\begin{aligned} \theta_r &= 0.095 \\ \theta_s &= 0.410 \\ \alpha &= 0.019 \\ n &= 1.310 \\ K_s &= 7.222 \times 10^{-5} \text{ cm/s} \end{aligned}$$

Arena limosa:

$$\begin{aligned} \theta_r &= 0.070 \\ \theta_s &= 0.360 \\ \alpha &= 0.005 \\ n &= 1.090 \\ K_s &= 5.556 \times 10^{-6} \text{ cm/s} \end{aligned}$$

La metodología de combinar ambos esquemas se denomina en este documento como esquema mixto de integración temporal.

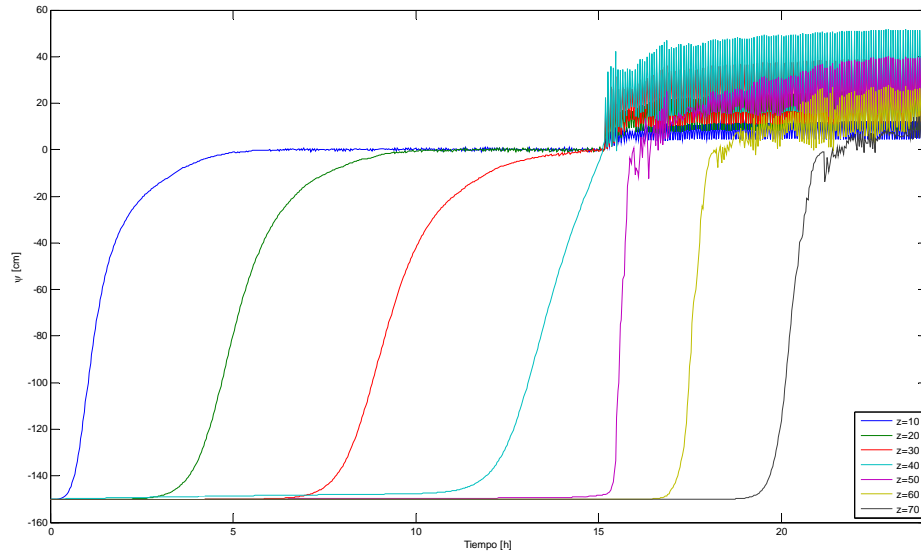
El efecto del tipo de método de avance temporal utilizado se ha evaluado solucionando numéricamente el estado de flujo del problema definido en la Figura 6.8. Los cálculos se realizaron usando el método MEF con matrices de masa concentradas y elementos finitos rectangulares de dimensiones  $\Delta x_3 = 1.5$  cm y  $\Delta x_1 = 2.5$  cm. Las Figuras 6.9 y 6.10 muestran la variación de la presión a diferentes profundidades sobre la columna central de suelo, calculada usando el esquema 2 e incrementos temporales de 120 y 60 s, respectivamente. En ellas se puede apreciar que, luego de pasar a estado saturado, la cabeza de presión en los nodos del dominio presenta un comportamiento altamente oscilatorio, presumiblemente alrededor del valor que alcanzaría realmente. Al disminuir el valor del incremento temporal, lo único que se logra es aumentar la frecuencia de dichas oscilaciones.

Este fenómeno oscilatorio claramente no corresponde a una realidad física, sino a un comportamiento numérico directamente asociado con la forma como se trata el estado de saturación en la integración temporal. Para mostrarlo, se realizan las mismas simulaciones anteriores, ahora usando el esquema mixto descrito con anterioridad. Los resultados, consignados en las Figuras 6.11 y 6.12, revelan que la solución está libre de estas oscilaciones, pero en cambio sufre de pequeñas disminuciones súbitas de la presión de poros, también conocidas como 'disparos', cuya magnitud se puede disminuir utilizando un incremento temporal menor. Obsérvese además la tendencia de la solución en el estado saturado a estabilizarse a medida que se avanza en la simulación, disminuyendo la magnitud y frecuencia de estos disparos.

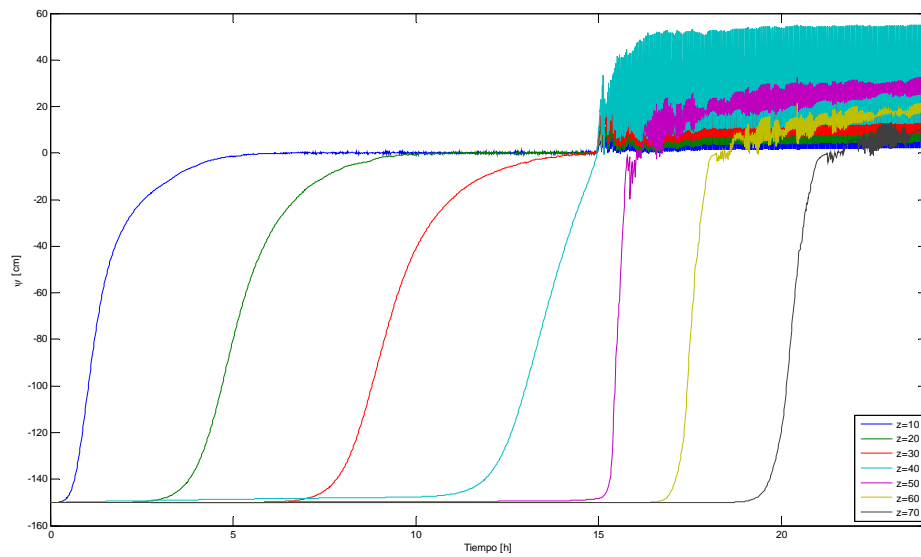
El esquema mixto de integración temporal, aunque aún imperfecto, muestra claramente resultados más acordes con el comportamiento real del agua en el suelo que los obtenidos usando únicamente el esquema de integración 2. Se reserva para investigaciones futuras la posibilidad de estudiar formas para alcanzar soluciones libres de comportamientos numéricos indeseables.

El algoritmo de solución numérica de la ecuación de Richards utilizando diferencias finitas también ha sido adaptado al esquema mixto de integración temporal. Las Figuras 6.13 y 6.14 muestran los resultados obtenidos usando diferencias finitas, los cuales son muy similares a los obtenidos usando elementos finitos.

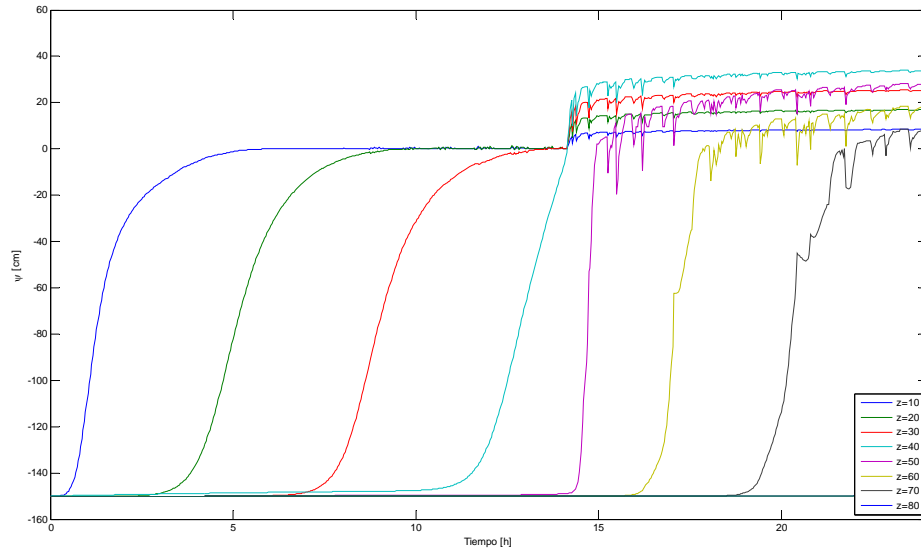
**Figura 6.9.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema 2 de integración temporal y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 120$  s. Profundidades en cm



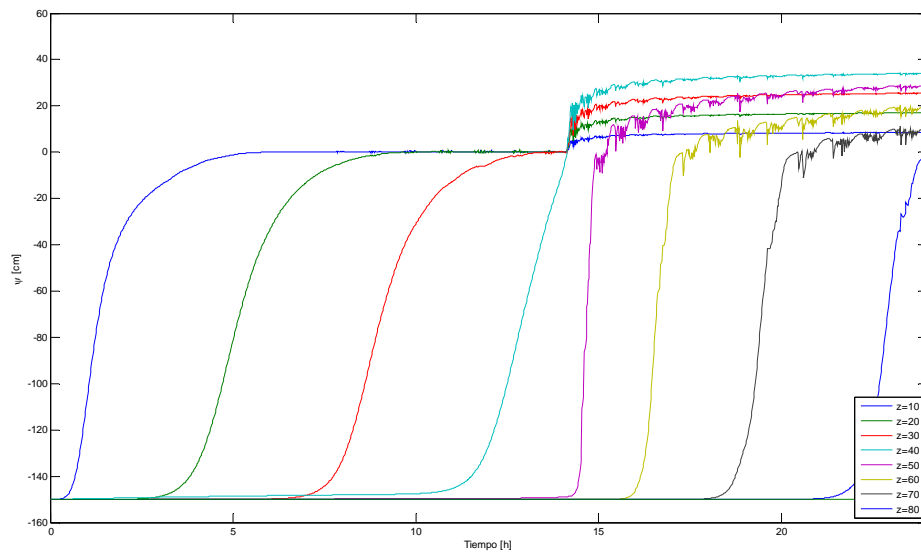
**Figura 6.10.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema 2 de integración temporal y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 60$  s. Profundidades en cm



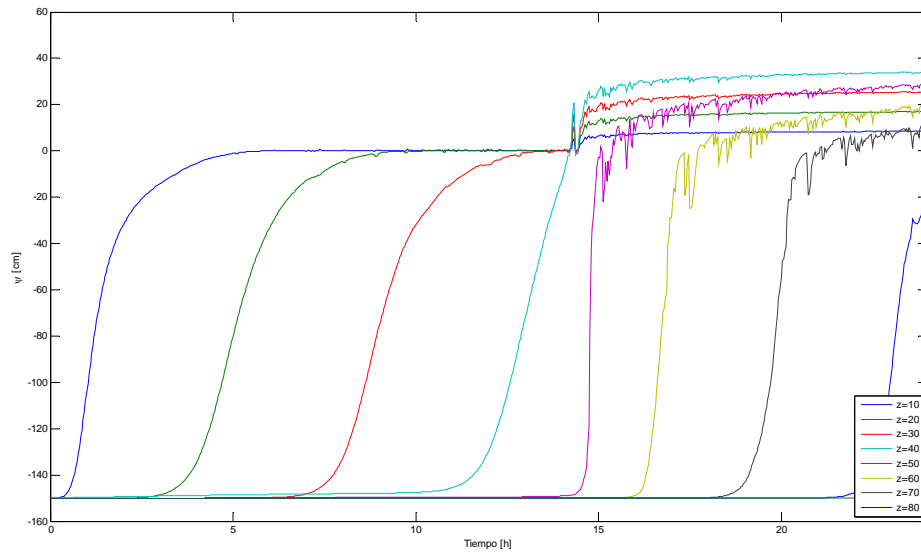
**Figura 6.11.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 120$  s. Profundidades en cm



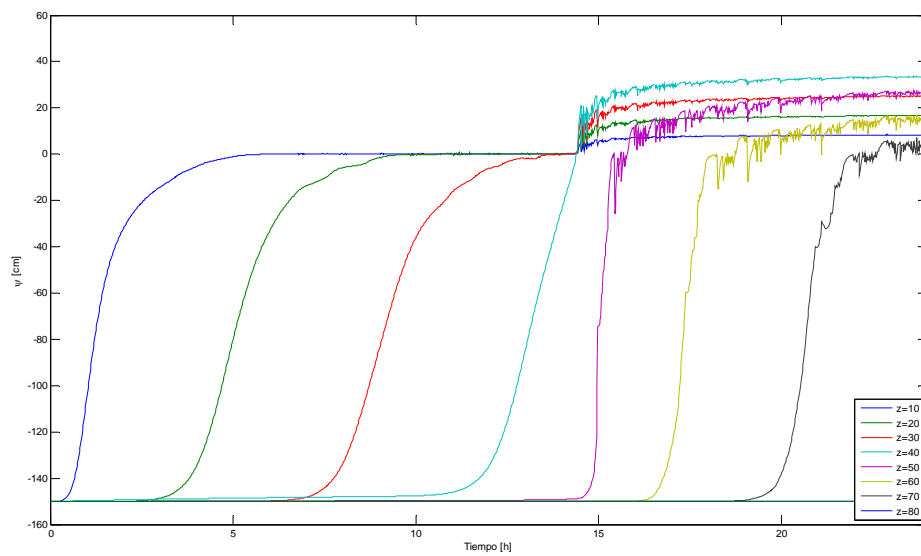
**Figura 6.12.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 60$  s. Profundidades en cm



**Figura 6.13.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de diferencias finitas.  $\Delta t = 120$  s. Profundidades en cm



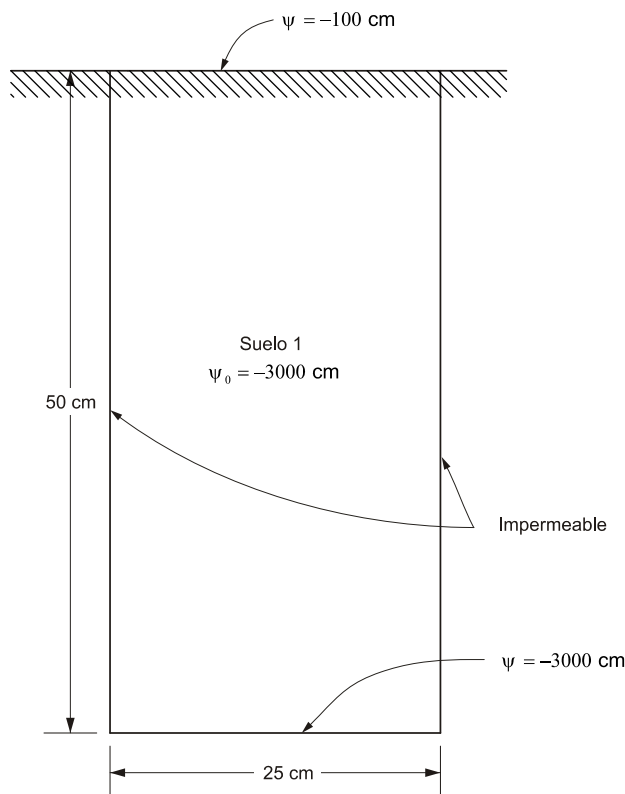
**Figura 6.14.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades para la simulación 3, usando el esquema mixto de integración temporal y el método de diferencias finitas.  $\Delta t = 60$  s. Profundidades en cm



### 6.3. EFECTO DE LA DESCRIPCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LOS MATERIALES

La metodología de descripción de las propiedades del suelo descrita en la sección 2.3.2, junto con un algoritmo de interpolación usando splines cúbicos, resulta satisfactoria para determinar valores intermedios de las cantidades  $K(\psi)$  y  $\theta(\psi)$ , pero puede ser problemática en el caso de la capacidad específica de humedad,  $C(\psi)$ ; la determinación de esta cantidad, con mayor intensidad que las demás, depende de la calidad con la que el algoritmo de interpolación aproxima el comportamiento de los materiales, pues para alcanzar un valor aceptable no solo hace falta que el polinomio de interpolación aproxime satisfactoriamente los valores de  $K$  y  $\theta$ , sino que también represente de manera acertada la variación de estas cantidades con respecto a la presión de poros. En virtud de lo anterior, si la tabla de datos de propiedades no es lo suficientemente refinada (esto es,  $\psi_{i+1}/\psi_i$  no es lo suficientemente pequeño), la calidad con la que la interpolación aproxima la variación de  $\theta$  con respecto a  $\psi$  no será buena, y por tanto no se pueden esperar obtener valores  $C$  adecuados.

Figura 6.15. Geometría del dominio de flujo para la simulación 4



#### Parámetros del Modelo van-Genuchten-Mualem:

Suelo 1:

$$\theta_r = 0.0286$$

$$\theta_s = 0.3658$$

$$\alpha = 0.020$$

$$n = 1.60$$

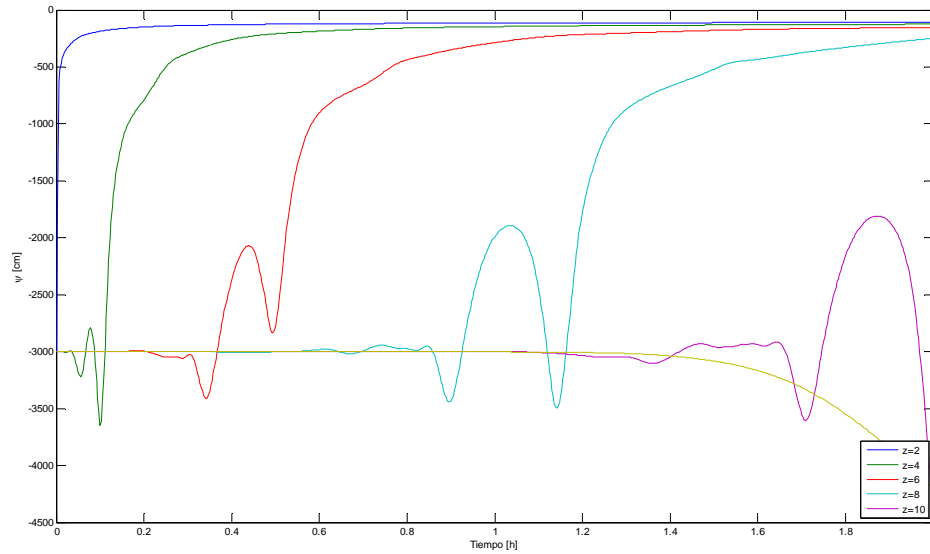
$$K_s = 540 \text{ cm/día}$$

A modo de ilustrar las observaciones anteriores, se ha resuelto el estado de flujo para el problema definido en la Figura 6.15, usando dos diferentes tablas de propiedades del material en cuestión, cada una con un valor de  $\psi_{i+1}/\psi_i$  diferente. La solución se ha calculado usando tanto el método de elementos finitos (con matrices de masa concentradas) como el método de diferencias finitas, combinados con el esquema mixto de integración temporal. La primera tabla de descripción de propiedades (Ingrese número de tabla aquí) ha sido calculada con  $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.50$ , mientras que la segunda (Ingrese número de tabla aquí) la sido calculada usando  $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.25$ .

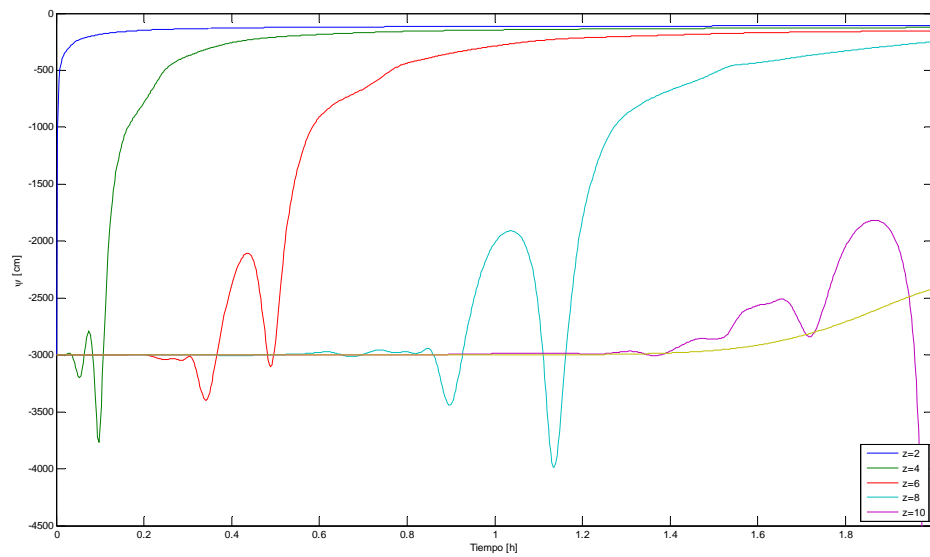
Las Figuras 6.16 y 6.17 muestran la variación de la presión de poros a diferentes profundidades sobre la columna central del dominio, calculada usando la Tabla 1 de descripción de propiedades, y los métodos de elementos finitos y diferencias finitas, respectivamente. Se puede apreciar que las oscilaciones presentadas por la presión de poros violan el principio discreto del máximo, de manera similar a como ocurre al usar matrices de masa consistentes en la formulación de MEF. Ya se ha discutido con anterioridad que las oscilaciones en el caso de las matrices consistentes están relacionadas con el término temporal de la ecuación de Richards; por tanto, dada la similitud entre este comportamiento y el observado en las Figuras 6.16 y 6.17, surge la sospecha de que estas nuevas oscilaciones se deben a una causa similar. Dicha causa no sería de nuevo la forma como se distribuye espacialmente la aproximación de la derivada temporal (obsérvese que el comportamiento es el mismo tanto con MEF como con MDF), sino los valores de capacidad específica de humedad que se utilizan para construir la matriz de masa del sistema.

Para dar mayor validez a la afirmación anterior, se han trazado en las Figuras 6.18 y 6.19 los resultados obtenidos usando la Tabla 2. Estas figuras muestran que la variación de la presión de poros está libre de oscilaciones y cumple satisfactoriamente el principio discreto del máximo, lo que nos permite concluir que las oscilaciones están efectivamente relacionadas con la resolución de la tabla de descripción de propiedades de materiales usada para la simulación. El uso de tablas con una resolución insuficiente facilita la estimación errada de la capacidad específica de humedad real del suelo, lo cual a su vez produce resultados numéricos alejados del comportamiento real del agua en el suelo.

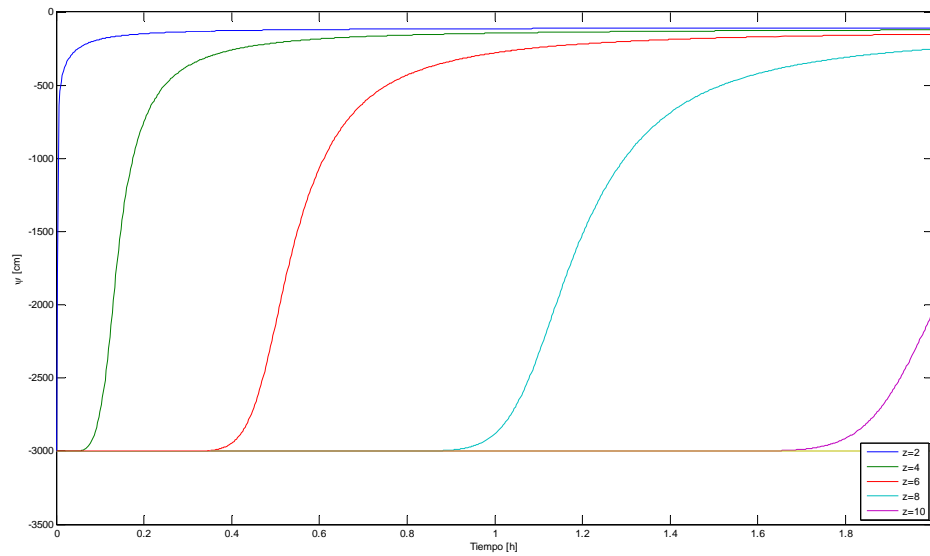
**Figura 6.16.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 10$  s. Profundidades en cm



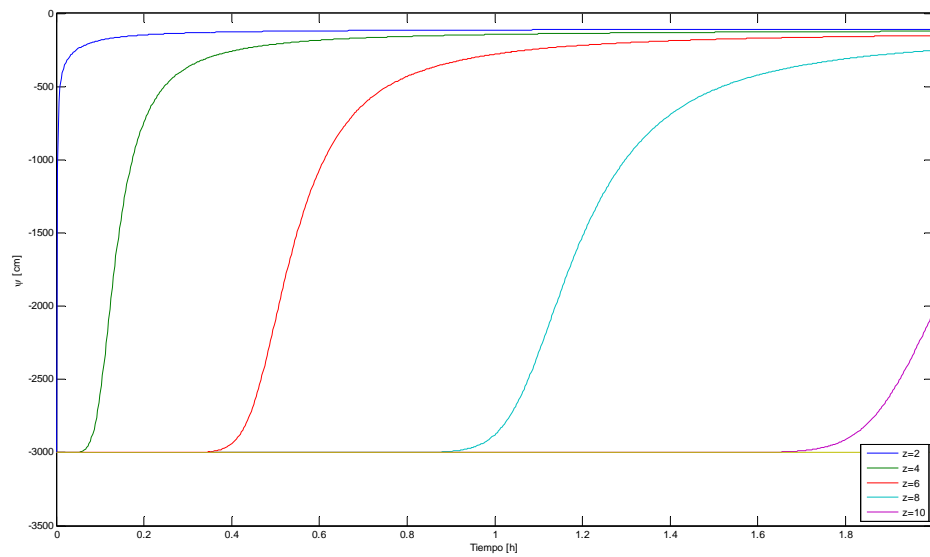
**Figura 6.17.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de diferencias finitas.  $\Delta t = 10$  s. Profundidades en cm



**Figura 6.18.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 2 de propiedades de materiales y el método de elementos finitos.  $\Delta t = 10$  s. Profundidades en cm



**Figura 6.19.** Variación de la cabeza de presión a diferentes profundidades, usando la Tabla 1 de propiedades de materiales y el método de diferencias finitas.  $\Delta t = 10$  s. Profundidades en cm



## 7. RESULTADOS NUMÉRICOS

Habiendo analizado en detalle los detalles de la solución numérica de la ecuación de Richards, se ha elaborado un conjunto de rutinas computacionales para la simulación del estado de flujo en dominios bidimensionales. Dichas rutinas componen SIMFLUX v0.1., un conjunto de funciones escrito para ser utilizado en el ambiente de computación numérica MATLAB, e implementan las observaciones y recomendaciones hechas en el Capítulo 6 y en la Sección 4.7.

Las características del presente modelo de solución numérica son:

- Métodos de elementos finitos y diferencias finitas: Es posible obtener una solución de determinado problema de flujo usando bien el método de elementos finitos o de diferencias finitas, suponiendo dicho problema satisfaga las condiciones de aplicabilidad de cada método estudiadas en los capítulos 3 y 4.
- Forma mixta de la ecuación de Richards: El modelo está basado en la forma mixta de la ecuación de Richards (Ecuación (2.4)), lo cual asegura que las soluciones numéricas obtenidas satisfacen de manera razonable el principio de balance de masa (Sección 6.1).
- Esquema mixto de integración temporal: El uso de este esquema mejora significativamente el comportamiento oscilatorio de la solución numérica de la presión en estado saturado (Sección 6.2).
- Solución de sistemas lineales usando PCG/IC: La solución de los sistemas de ecuaciones lineales resultantes se realiza utilizando el método del gradiente conjugado preconditionado (PCG), usando como preconditionador la factorización incompleta de Cholesky (IC).

La solución mediante MEF tiene las siguientes características adicionales:

- Elementos rectangulares y triangulares lineales: La posibilidad de usar cualquiera de estos tipos de elementos da la posibilidad de aproximar muchos tipos de geometría de manera satisfactoria. Dado que las funciones elementales de forma usadas son lineales, las integrales asociadas a MEF se pueden desarrollar *a priori* de manera analítica con facilidad (Sección 4.5).
- Matrices concentradas de masa: El uso de matrices concentradas de masa, tal como se estudió en la Sección 4.7, elimina las oscilaciones asociadas a la distribución espacial de la aproximación de la derivada temporal.

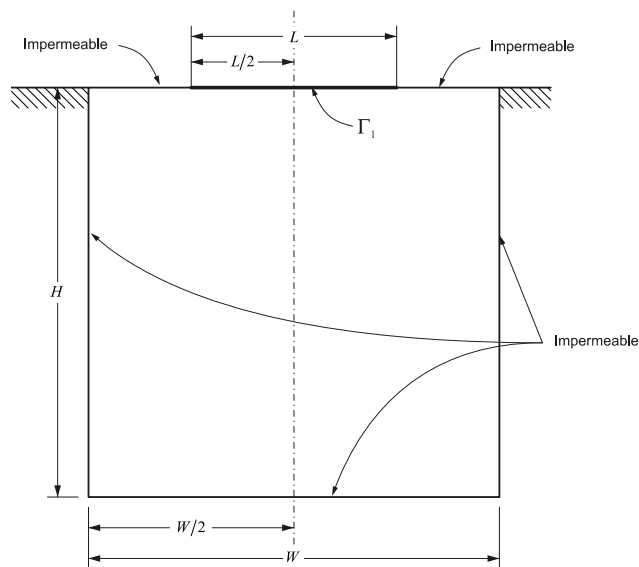
Las limitaciones del modelo son:

- Materiales isotrópicos: Sólo es posible simular problemas de flujo con dominios compuestos por materiales isotrópicos.
- Almacenamiento específico despreciable: La formulación de la ecuación de Richards en la que se basa el modelo asume que el término de almacenamiento específico es despreciable.
- Condiciones de frontera: Sólo puede resolverse el estado de flujo de problemas sometidos a condiciones de frontera de tipo Dirichlet o Neumann, con funciones prescritas independientes del tiempo.

El conjunto de rutinas SIMFLUX ha sido utilizado para obtener soluciones numéricas del estado de flujo de varios problemas, las cuales se ha comparado en lo posible con resultados obtenidos por otros autores. Inicialmente se considerará la solución de 2 problemas de flujo en medios homogéneos, cuya geometría y parámetros de simulación están descritos en la Figura 7.1 y la Tabla 7.1.

Las Figuras 7.2 y 7.3 presentan la variación de la presión de poros para la simulación 5, la cual ha sido obtenida usando el método de elementos finitos y el método de diferencias finitas, respectivamente. De estas figuras es posible observar que no existe diferencia significativa entre el estado de flujo arrojado bien por MEF o MDF; además, resultados son acordes a los obtenidos para el mismo problema por Bouloutas (1989), tal como se puede apreciar en la Figura 7.4. La solución numérica de la presión de poros para este problema muestra un frente de avance muy pronunciado, lo cual está de acuerdo con lo observado por Bouloutas, y con simulaciones anteriores con arena Haverkamp (Simulación 2B, Sección 4.7).

**Figura 7.1.** Geometría del dominio de flujo para las simulaciones 5 y 6

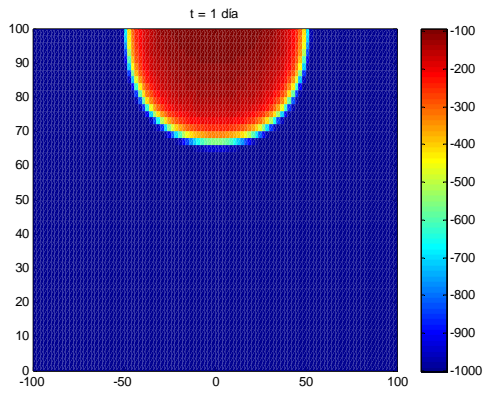


**Tabla 7.1.** Datos de entrada para las simulaciones 5 y 6

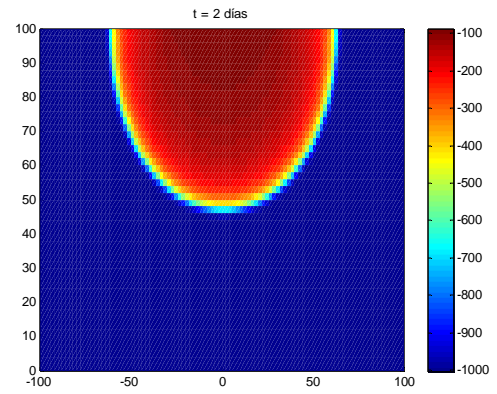
<b>Propiedad</b>	<b>Simulación 5</b>	<b>Simulación 6</b>
Ancho, $W$	200 cm	100 cm
Profundidad, $H$	100 cm	50 cm
Ancho $L$	30 cm	10 cm
Condición inicial	$\psi_0 = -1000$ cm	$\psi_0 = -60$ cm
Condición de frontera en $\Gamma_1$	Flujo constante: $q = 2$ cm/día	Presión constante: $\psi = -20$ cm
Perfil de suelo	Suelo Nuevo México	Arena Haverkamp
Tiempo máximo de simulación	4 días	30 min
$\Delta x_1$	2 cm	1 cm
$\Delta x_3$	2 cm	1 cm

Los resultados obtenidos para la simulación 6 se pueden apreciar en las Figuras 7.5 y 7.6. De manera similar al ejemplo anterior, no existe una diferencia significativa entre las soluciones arrojadas por MEF y MDF. El frente de avance de la presión de poros es en este caso menos marcado que en el anterior, de manera consistente a lo observado en la Simulación 2A.

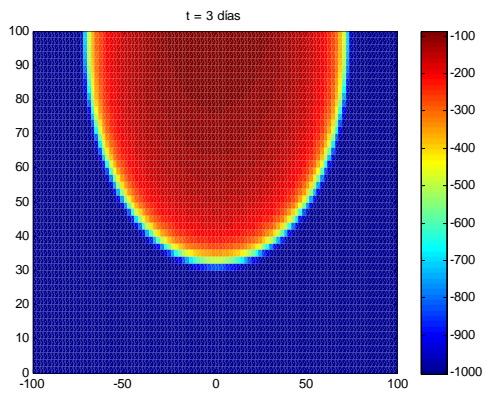
**Figura 7.2.** Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Método de elementos finitos.



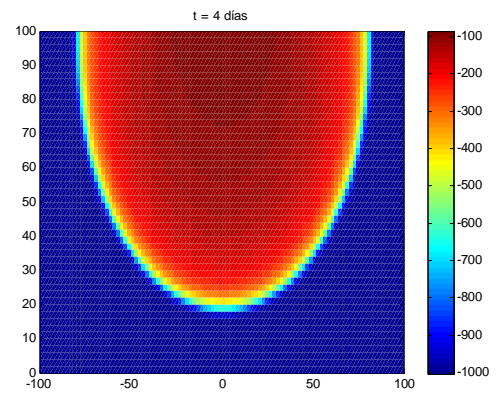
(a)



(b)

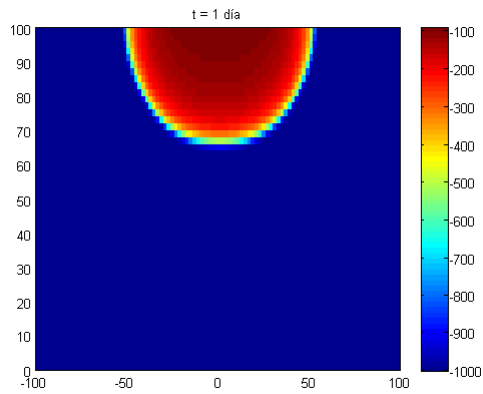


(c)

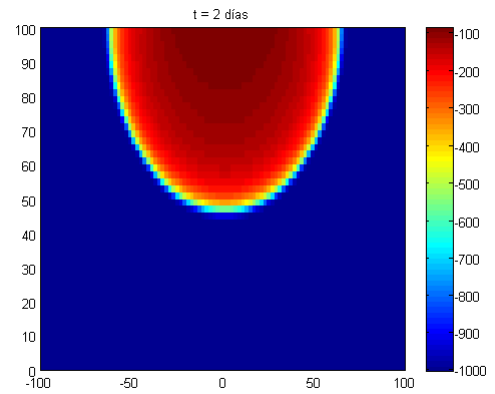


(d)

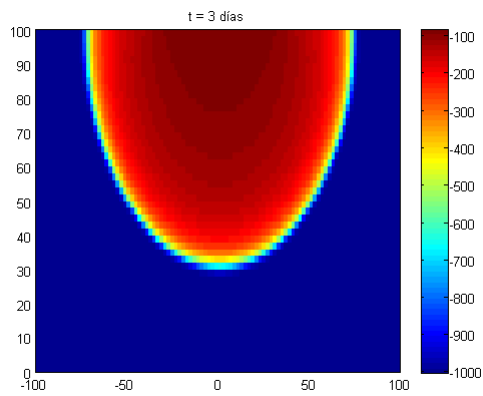
**Figura 7.3.** Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Método de diferencias finitas



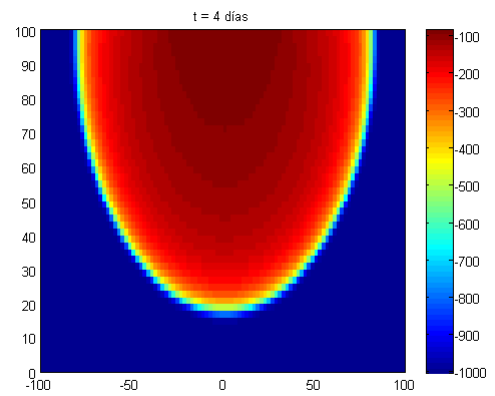
(a)



(b)

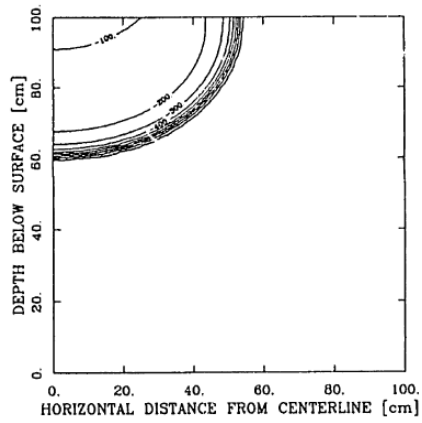


(c)

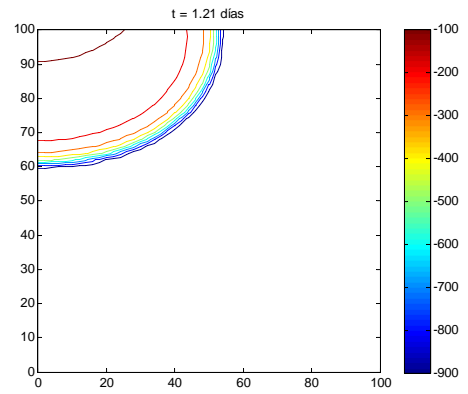


(d)

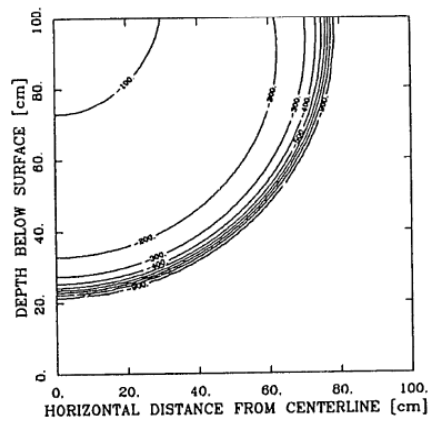
**Figura 7.4.** Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Figuras (a) y (c): Resultados publicados en Bouloutas (1989). Figuras (b) y (d): Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos



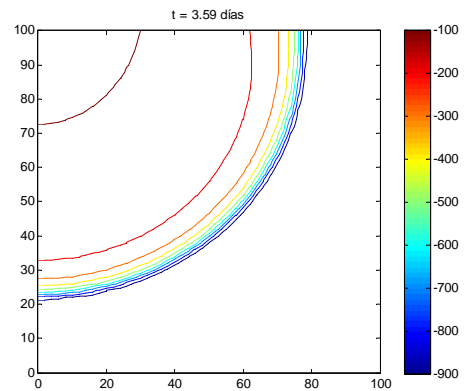
(a)



(b)

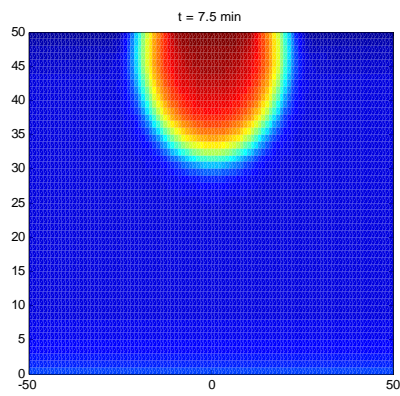


(c)

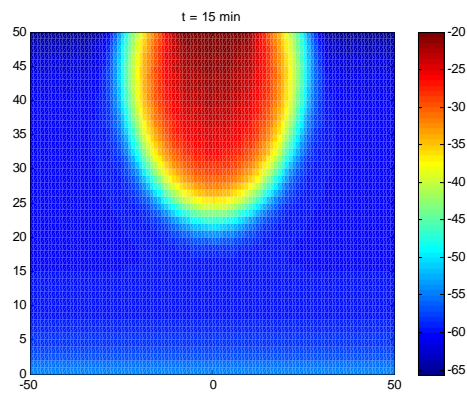


(d)

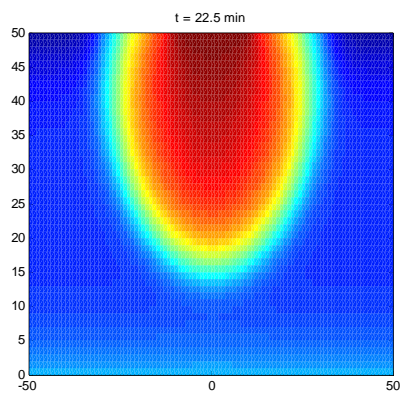
**Figura 7.5.** Variación de la presión de poros para la Simulación 5. Figuras (a) y (c): Resultados publicados en Bouloutas (1989). Figuras (b) y (d): Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos



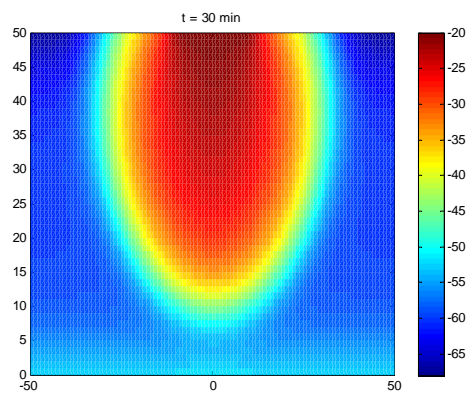
(a)



(b)

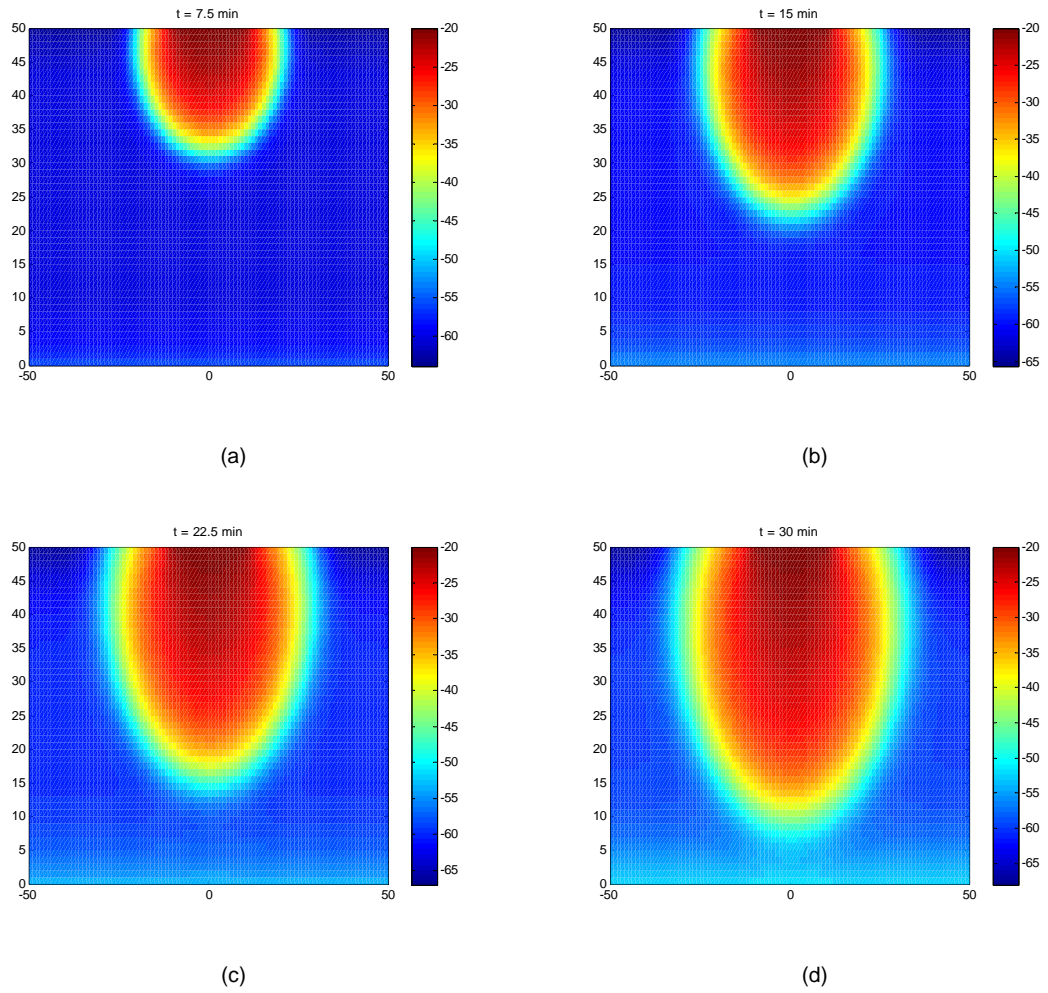


(c)



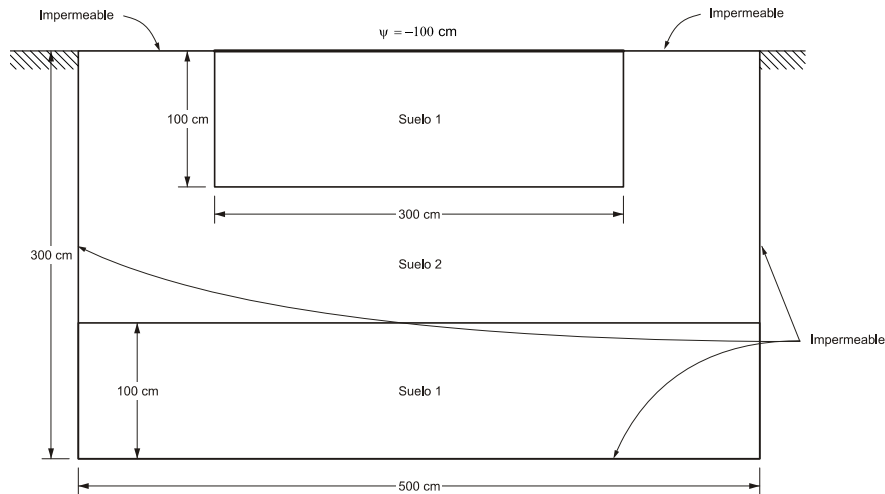
(d)

**Figura 7.6.** Variación de la presión de poros para la Simulación 6. Método de diferencias finitas



Las dos simulaciones anteriores se realizaron sobre dominios compuestos por suelos homogéneos, lo cual produce frentes regulares de avance de la humedad. Un ejemplo más elaborado se presenta en la Figura 7.7 (Simulación 7), el cual consiste de un dominio compuesto por dos tipos de materiales intercalados por capas. Las soluciones numéricas de este problema obtenidas usando SIMFLUX y los métodos de elementos finitos y diferencias finitas, se pueden observar en las Figuras 7.8 y 7.9, respectivamente. Estas figuras muestran cómo la disposición de los diferentes materiales afecta la forma del frente húmedo: Dado que el agua se puede mover más fácilmente a través del material 2 que del 1, la humedad avanza de manera rápida hacia los costados del dominio, y de ahí hacia abajo, formando 3 'frentes' húmedos (Figura 7.8.b y 7.9.b). Al alcanzar en plenitud el área ocupada por el material 2, el frente húmedo se homogeniza, pero cambia drásticamente de forma cuando supera los 2 metros de profundidad (7.8.c, 7.8.d, 7.9.c y 7.9.d). Los resultados obtenidos por SIMFLUX están en general de acuerdo con los publicados por Avellaneda (2003) (Figura 7.10), aunque presentan discrepancias en la predicción de la ubicación del frente húmedo.

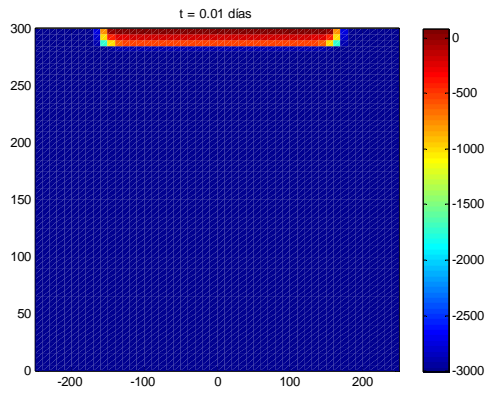
**Figura 7.7.** Geometría del dominio de flujo para la Simulación 7 (adaptado de Avellaneda (2003)).



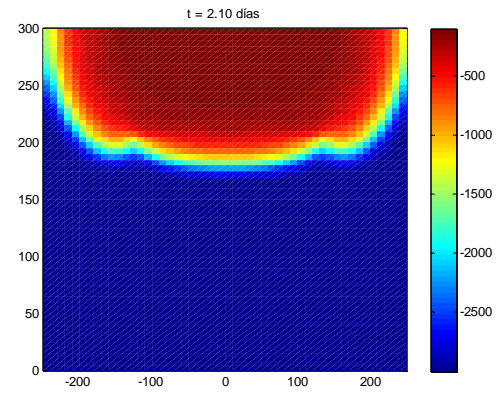
**Parámetros del Modelo van-Genutchen Mualem**

Suelo 1:	Suelo 2:	
$\theta_r = 0.0286$	$\theta_r = 0.1060$	
$\theta_s = 0.3658$	$\theta_s = 0.4686$	
$\alpha = 0.020$	$\alpha = 0.010$	$\psi_0 = -3000$ cm sobre todo el dominio
$n = 1.60$	$n = 1.20$	
$K_s = 540$ cm/día	$K_s = 300$ cm/día	

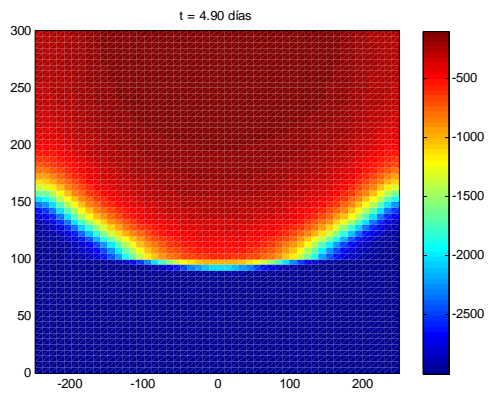
**Figura 7.8.** Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Método de elementos finitos



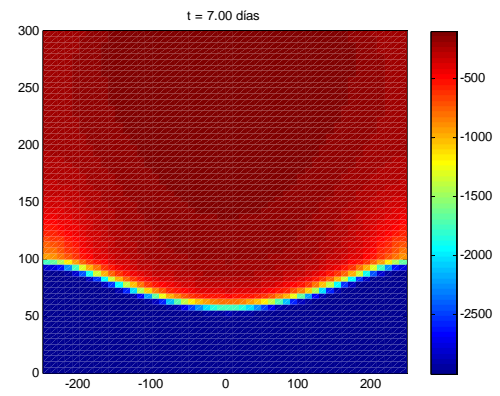
(a)



(b)



(c)



(d)

**Figura 7.9.** Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Método de diferencias finitas

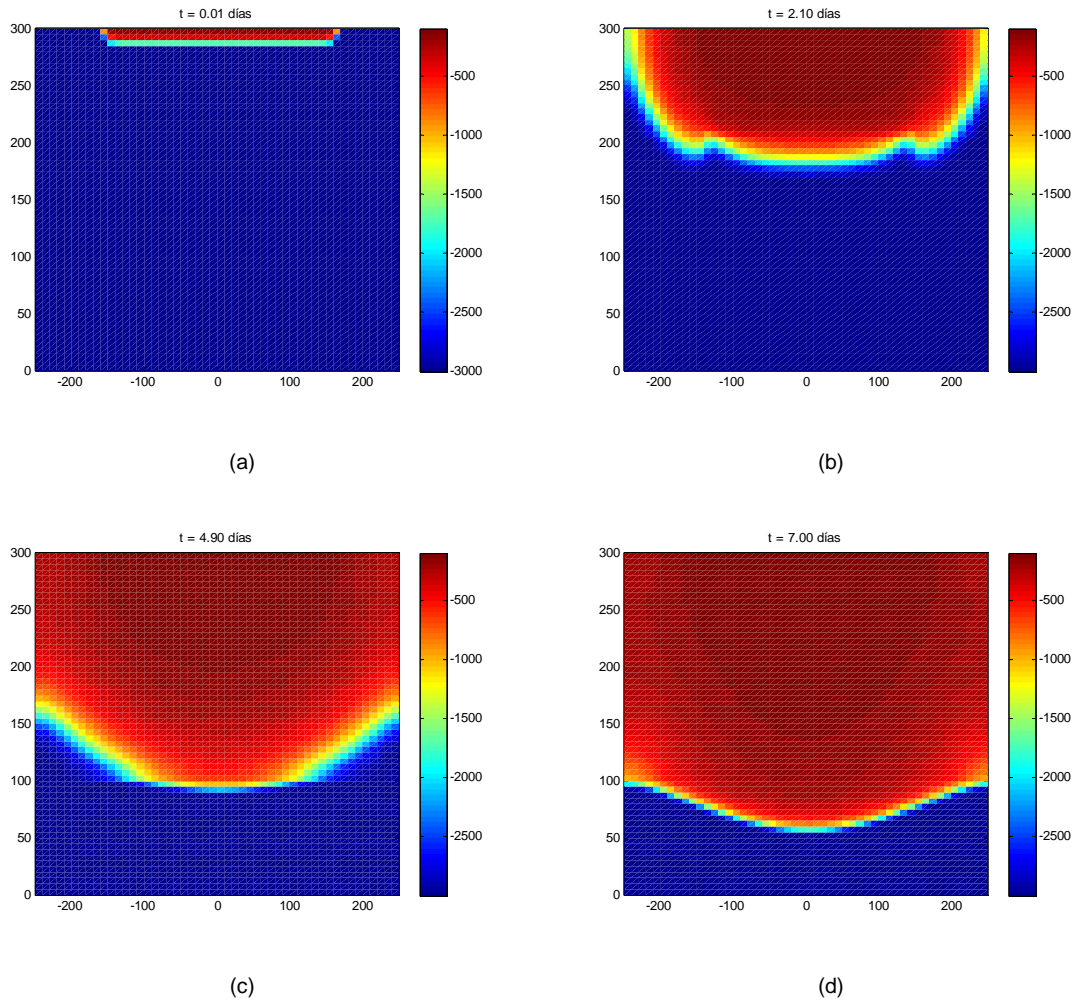
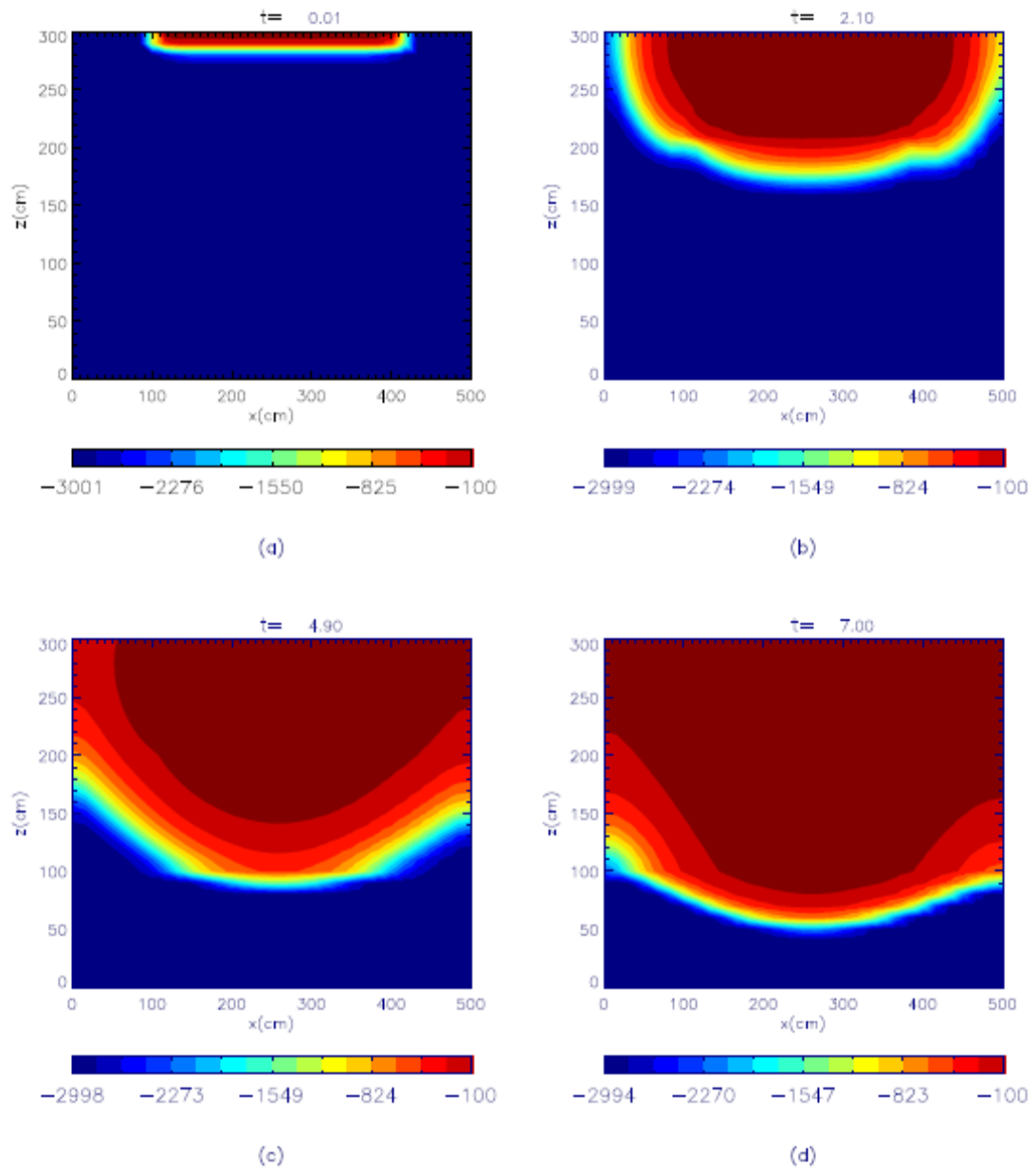


Figura 7.10. Variación de la presión de poros para la Simulación 7. Resultados publicados en Avellaneda (2003)



En la sección 2.2 se menciona que el mecanismo del movimiento de agua en medios porosos es el gradiente hidráulico. En virtud de esto, si cierta área de un dominio de simulación con bajo potencial está ubicada encima de otra con mayor potencial, el agua empezará a ascender hacia el área de menor potencial; éste fenómeno, el cual se debe a la diferencia de potencial entre dos áreas, no debe confundirse con el ascenso capilar.

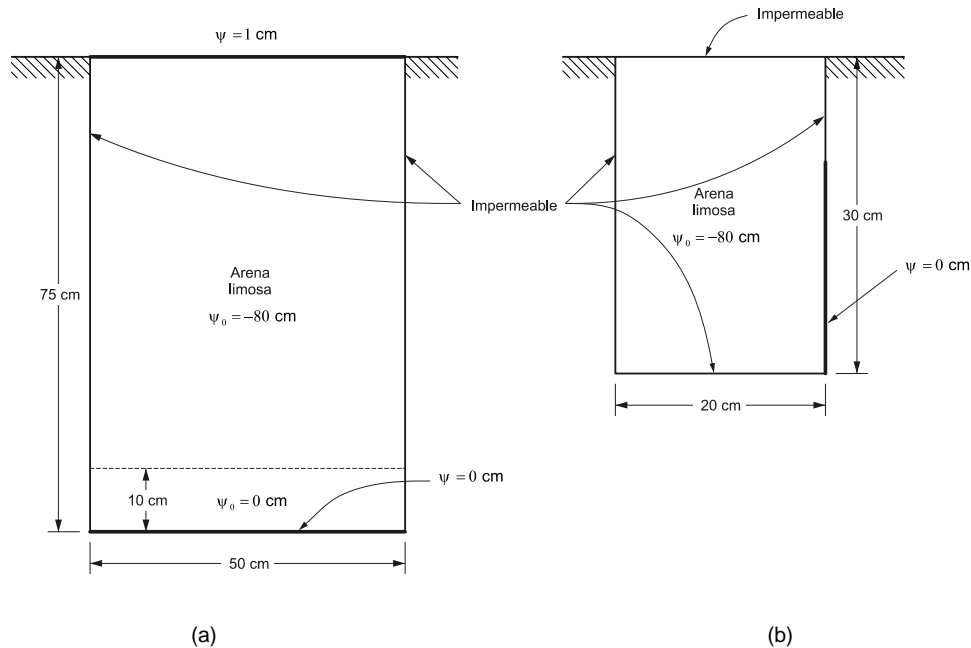
Para ilustrar el efecto anterior, considérense los problemas de flujo planteados en la Figura 7.11.a (Simulación 8) y 7.11.b (Simulación 9). El material que compone los dominios de simulación de estos dos casos es descrito usando el modelo analítico van-Genuchten Mualem con los siguientes parámetros:

$$\text{Arena limosa: } \theta_s = 0.40 \text{ [cm}^3\text{/cm}^3\text{]}, \theta_r = 0.04 \text{ [cm}^3\text{/cm}^3\text{]}, n = 1.23$$

$$K_s = 0.0012 \text{ cms}^{-1}, \alpha = 0.026 \text{ cm}^{-1}$$

Se ha usado SIMFLUX y el método de elementos finitos para obtener soluciones numéricas de los problemas descritos en 7.11, las cuales se muestran en las Figuras 7.12 y 7.13, respectivamente. Para ambas simulaciones, la malla de elementos finitos ha sido rectangular, con incrementos espaciales de 1 cm en ambas direcciones.

**Figura 7.11.** Geometría del dominio de flujo para (a) la Simulación 8, y (b) la Simulación 9

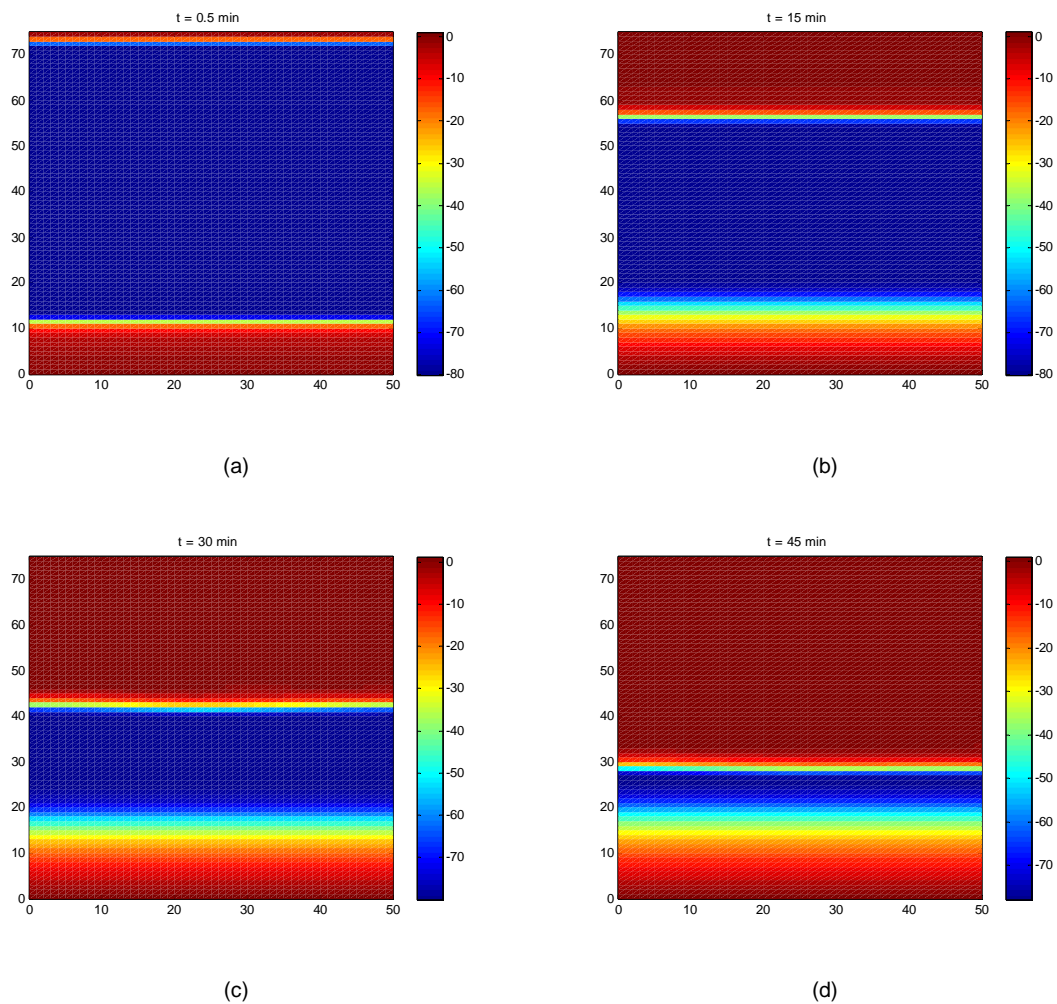


La simulación 8 ilustra el caso de un dominio cuya frontera inferior es el nivel freático, y su frontera superior se mantiene a una presión de poros constante de 1 cm. El contenido de

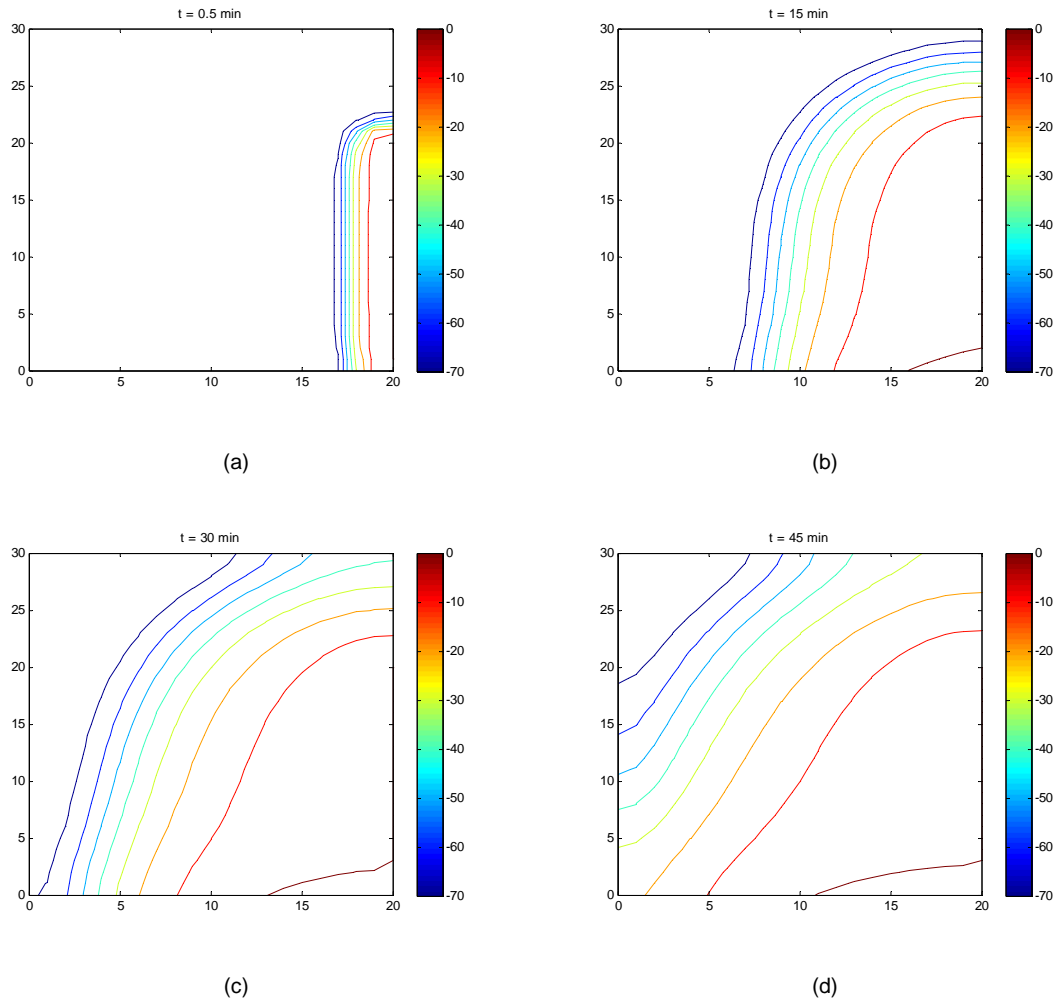
humedad asciende lentamente desde el fondo buscando alcanzar un perfil de presión de poros como el de la Figura 2.3, y a la vez desciende desde arriba en virtud de la condición de frontera superior. Este estado de flujo con dos frentes húmedos se puede apreciar en la Figura 7.12.

El flujo de agua desde una frontera lateral parcialmente sometida a estado de saturación se estudia en la simulación 9. De manera similar al ejemplo anterior, en este caso la humedad avanza hacia la superficie, buscando el estado de equilibrio entre la elevación y la presión de poros definido en la Figura 2.3.

**Figura 7.12.** Variación de la presión de poroso para la Simulación 8



**Figura 7.13.** Variación de la presión de poros para la Simulación 9



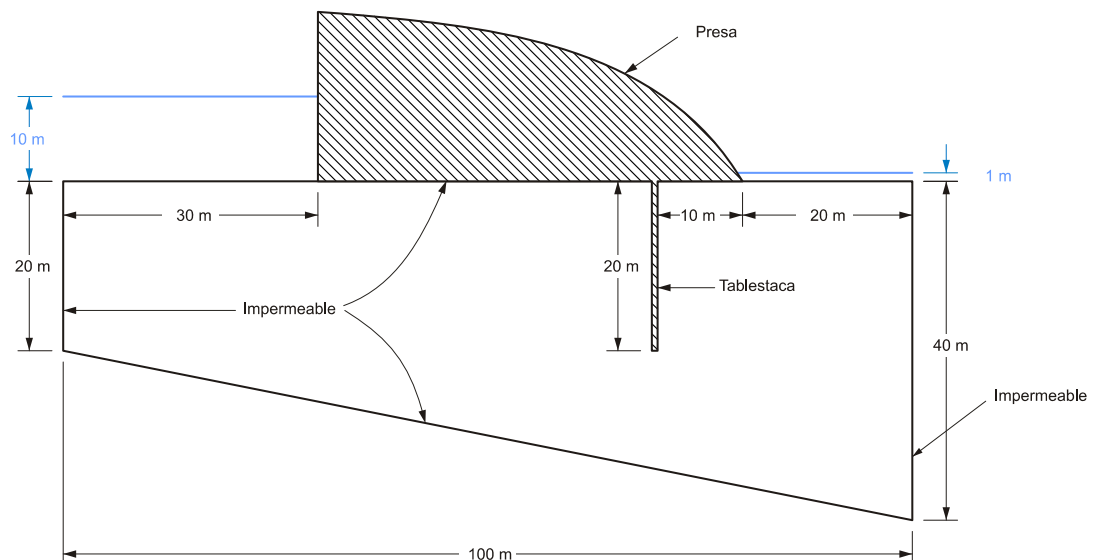
Finalmente, para ilustrar la capacidad de SIMFLUX de manejar mallas de elementos finitos triangulares y fronteras no regulares, se ha calculado el estado de flujo permanente para el suelo bajo la presa de la Figura 7.14. Las condiciones de frontera de la presión de poros son de 10 m aguas arriba y 1 m aguas abajo.

En estado permanente, el dominio se encuentra saturado, por lo que la conductividad hidráulica deja de ser función de la presión de poros y el contenido de humedad se hace constante. La ecuación de Richards en este caso toma la forma

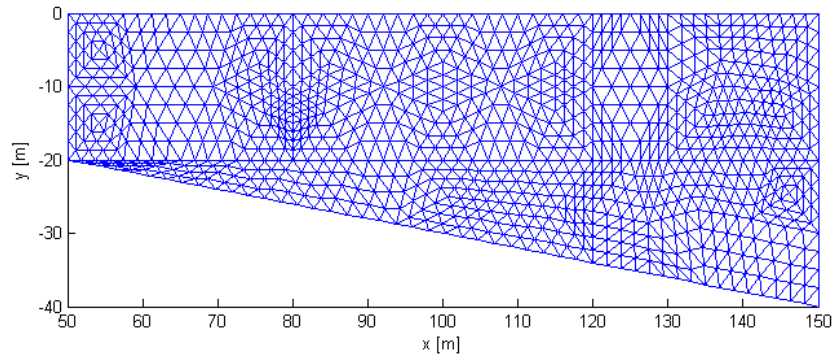
$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) = \nabla^2 H = 0.$$

Se ha obtenido una solución para la ecuación anterior usando el método de elementos finitos, con la malla triangular de 1888 elementos mostrada en la Figura 7.15.a. El diagrama de líneas equipotenciales obtenido con SIMFLUX (Figura 7.15.b) se presentan junto con el publicado por Avellaneda (2003) (Figura 7.15.c) para el mismo problema, y de compararlos se puede asegurar que, aunque difieren ligeramente en la posición de las curvas equipotenciales, ambos son en general consistentes.

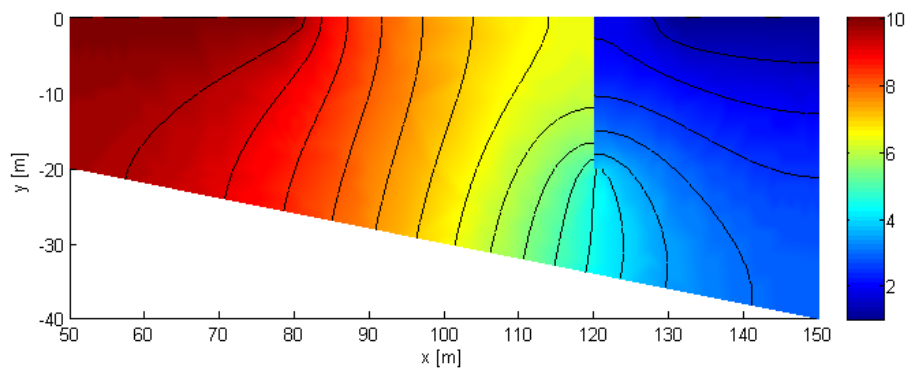
**Figura 7.14.** Simulación 10: Flujo permanente bajo una presa. Los niveles de agua son de 10 m aguas arriba y 1 m aguas abajo (adaptado de Avellaneda (2003))



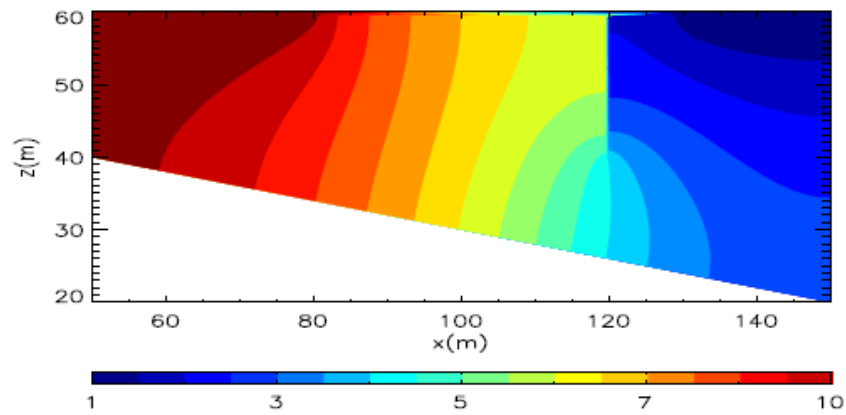
**Figura 7.15.** Variación del potencial de agua para la Simulación 10. (a) Malla de elementos finitos utilizada para la simulación. (b) Resultados obtenidos usando SIMFLUX y el método de elementos finitos. (c) Resultados publicados en Avellaneda (2003)



(a)



(b)



(c)

## 8. CONCLUSIONES

A lo largo del presente trabajo de investigación se han analizado diferentes metodologías, para desarrollar cada uno de los pasos del cálculo de una solución numérica para la ecuación de Richards, tal como se describen en la Sección 2.1.1. Cada uno de estos métodos inicialmente se ha formulado de manera exhaustiva, y luego se ha evaluado su comportamiento en términos de convergencia, esfuerzo computacional, y cumplimiento de las leyes físicas en las que se basa la ecuación de Richards.

En este capítulo y el siguiente se presentan de manera resumida las conclusiones que se han obtenido de la discusión anterior, junto con las recomendaciones que se dejan para aquellos que deseen trabajar en un futuro, sobre lo avanzado en el presente trabajo.

### 8.1. ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN ESPACIAL

La discusión de los esquemas de discretización espacial a considerar, se limitó para efectos del presente trabajo a los métodos de elementos finitos y de diferencias finitas. Las ventajas que ofrece el método de elementos finitos (MEF) en comparación a la aproximación más tradicional con diferencias finitas (MDF) son varias y valiosas:

- Manejo de las condiciones de frontera: La formulación del método de elementos finitos trae implícito el manejo de las condiciones de frontera, bien sea de tipo Dirichlet o de tipo Neumann. Este hecho se puede observar en las ecuaciones (4.20) , (4.22) y (4.23). No hace falta hacer aproximaciones como las indicadas en la sección 3.3.2.2 para MDF.
- Fronteras irregulares: El mecanismo de la malla de elementos finitos le da al método la flexibilidad necesaria para trabajar con fronteras irregulares, lo cual es difícil de hacer con MDF, tal como se expuso en la sección 3.2 y 3.3.2.2 (Feddes et al., 1988).
- Aproximación de las derivadas espaciales: La relación entre los valores de presión de los puntos de la malla en el caso de MDF estaba limitada a los vecinos superior, inferior a la derecha y a la izquierda de un cierto punto. Esta relación se extiende en MEF a todos los nodos inmediatamente vecinos al nodo en cuestión según las conectividades entre nodos y elementos de la malla de elementos finitos, dándole mayor fortaleza a la aproximación de las derivadas espaciales.

Los tres factores anteriores hacen que, en opinión del autor, el método de elementos finitos no sea necesariamente mucho más complicado de implementar que el método de diferencias finitas. Aún así, a pesar de las ventajas evidentes, el método de elementos finitos no es la solución para todos los problemas relacionados con la solución de la ecuación de Richards; de hecho, la implementación de MEF consistente con su formulación trae consigo el problema de oscilaciones estudiado en la Sección 4.7. En cuanto a estas oscilaciones, los resultados obtenidos permiten concluir que:

- Las oscilaciones están relacionadas con el término temporal de la ecuación de Richards. El esquema consistente de MEF distribuye la aproximación de la derivada temporal de cada ecuación diferencia ordinaria en varios puntos del dominio. Si se usa una distribución espacial del término temporal diferente a la del esquema consistente (i.e., el esquema de concentración de masa), el problema de las oscilaciones desaparece.
- La densidad de la malla de elementos finitos afecta la forma y el tamaño de las oscilaciones. Se pudo observar que al aumentar la refinación de la malla, el efecto de las oscilaciones se hace más reducido.

## **8.2. ESQUEMAS DE INTEGRACIÓN TEMPORAL**

La solución numérica de la ecuación de Richards no es por ningún motivo insensible al esquema de integración que se use para el avance temporal; de hecho, la forma como estas metodologías afectan la solución exige que se les estudie y seleccione de manera cuidadosa. A partir de los resultados obtenidos en las secciones 6.1 y 6.2, se puede concluir que:

- La aproximación de la derivada temporal de la ecuación de Richards introduce errores que pueden hacer que la solución numérica obtenida así no cumpla el principio de conservación de la masa. La aproximación del método modificado de Picard, basada en la forma mixta de la ecuación de Richards (Esquema 2), produce resultados con mejor calidad de balance de masa que aquellos obtenidos usando la aproximación de la forma basada únicamente en la presión de poros (Esquema 1).
- La aplicación del esquema mixto de integración temporal planteado en la Sección 6.2, el cual modifica la aproximación de la derivada temporal para tener en cuenta el estado de saturación, disminuye las oscilaciones de la solución numérica para aquellos puntos que durante la simulación alcanzan este estado, aunque no las soluciona de manera definitiva.

### **8.3. ESFUERZO COMPUTACIONAL Y CONVERGENCIA**

En cuanto al proceso de convergencia, el análisis de los resultados obtenidos en las secciones 3.5 y 4.7.1 permiten concluir que:

- El tamaño de los elementos de la discretización espacial, y el valor del incremento temporal que se utilicen, deben cumplir cierta relación para asegurar la estabilidad de la solución numérica. A partir de los resultados de las secciones 3.5 y 4.7.1, se puede concluir que si se desea refinar la discretización espacial, es necesario también reducir el incremento temporal a utilizar; de otro modo es posible que no se logre la convergencia de solución numérica en un cierto nivel temporal.
- El tamaño del incremento temporal utilizado para una simulación afecta el proceso de convergencia. El uso de incrementos temporales relativamente altos implica la necesidad de un mayor número de iteraciones para alcanzar la convergencia de la solución en cierto nivel temporal, y por tanto la inversión de un mayor esfuerzo computacional; además, en virtud de la conclusión anterior, puede no asegurar la estabilidad de la solución, incluso hacer que se incurra en una violación de las presiones límite.
- Los primeros niveles temporales son en los que generalmente se invierte el mayor número de iteraciones por nivel. Se concluye por tanto que en estos niveles es necesario usar incrementos temporales pequeños para asegurar la convergencia de la solución.

### **8.4. SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES**

La limitación más significativa que representan los sistemas de ecuaciones lineales para la solución numérica de la ecuación de Richards es, tal como se ha mencionado anteriormente, el tamaño que pueden adquirir en el caso de dominios grandes o con una discretización espacial muy refinada. Este tamaño limita la capacidad de simulación de dos formas: Sistemas de ecuaciones muy grandes toman mucho tiempo en resolverse usando métodos directos, y requieren recursos de memoria igualmente grandes para almacenar los coeficientes del sistema. El análisis del método realizado en este documento permite concluir que el método PCG es una solución válida a estos dos problemas pues:

- Es un método iterativo, por tanto requiere mucho menos esfuerzo computacional para obtener soluciones razonables (Secciones 5.1 y 5.2). Es incluso menos costoso que otros métodos iterativos (Burden y Faires, 2002; Bouloutas, 1989).
- No requiere almacenar la matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones lineales completa, sólo necesita conocer la estructura de sus elementos no nulos para efectuar multiplicaciones de la matriz por un vector. Esta característica hace que el método sea compatible con sistemas de almacenamiento de matrices que ahorren

espacio de memoria al no almacenar elementos no nulos, tales como los descritos en las secciones 3.3.3 y 4.5.5. La operación asociada de factorización incompleta de Cholesky para el preconditionamiento también se puede adaptar fácilmente para que utilice el sistema de almacenamiento de matrices propuesto.

## **8.5. REPRESENTACIÓN NUMÉRICA DE LAS PROPIEDADES DE LOS MATERIALES**

A partir de la discusión realizada en la Sección 6.3 sobre el efecto que tiene la representación numérica de las propiedades de materiales en el proceso de simulación, es posible afirmar que la refinación de la tabla de descripción de propiedades de materiales que se vaya a utilizar es un factor que afecta la estabilidad de la solución final. Si no se suministra una tabla lo suficientemente densa, esto es, con  $\psi_{i+1}/\psi_i$  lo suficientemente bajo, se corre el riesgo de obtener soluciones numéricas con comportamiento oscilatorio. El modelador debe, por tanto, tener especial cuidado en elaborar tablas descriptivas lo suficientemente detalladas para cada simulación.

## 9. RECOMENDACIONES

El fenómeno del flujo de humedad en medios porosos en la zona no saturada es un problema que cada año atrae una mayor cantidad de trabajo e investigación, y en el que constantemente se logran nuevos avances y se hacen nuevos descubrimientos. Por estos motivos, este trabajo de grado no pretende ser un tratado definitivo sobre el tema, sino que desea sentar las bases para el estudio y discusión futuros alrededor del tema y otros tópicos asociados en la Escuela de Ingeniería Civil de la Universidad Industrial de Santander. En virtud de estas aspiraciones, se dejan consignadas las siguientes recomendaciones para aquellos que quieran realizar investigaciones futuras alrededor del problema físico en cuestión:

- Extender los alcances del modelo matemático para que tenga en cuenta uno o varios de los efectos asociados a la mecánica del flujo de agua en medios porosos, entre ellos, la anisotropía de los suelos y la capacidad de almacenamiento específico de acuíferos.
- Implementar un algoritmo que modifique el tamaño del incremento temporal en función del proceso de convergencia de la solución en cada nivel temporal, de modo que use valores pequeños para los primeros niveles temporales con convergencia difícil, y aumente el incremento a medida que se hace más fácil alcanzar el criterio de convergencia. De esta manera se reduce el tiempo necesario para completar una simulación.
- Estudiar con mayor detalle cómo la relación entre los diferentes parámetros de simulación afecta la estabilidad de la solución numérica. El presente documento se ha limitado a observar el efecto que tiene el tamaño de los elementos de la discretización espacial y el valor del incremento temporal, pero pueden extenderse estas consideraciones para incluir también las propiedades de los materiales, y así poder establecer un criterio general a partir del cual se puedan elegir los parámetros de simulación, conservando siempre la estabilidad.
- Aplicar esquemas de masa consistentes con la formulación del método de elementos finitos que no violan el principio discreto del máximo, tales como los descritos por Pan et al. (1996), y evaluar su comportamiento en comparación con el esquema tradicional de concentración de masa.

## BIBLIOGRAFÍA

AVELLANEDA, P.M. Solución numérica de la ecuación de flujo bidimensional de agua en suelos parcialmente saturados. Aplicación para el caso de infiltración. 2003, 124 p. Trabajo de Grado (Magíster en Recursos Hidráulicos). Departamento de Ingeniería Civil y Agrícola. Universidad Nacional de Colombia.

CARNAHAN, B.; LUTHER, H.A. y WILKES, J.O. Cálculo Numérico, Métodos y Aplicaciones. Madrid: Editorial Rueda, 1979. p. 456-480.

CASTAÑEDA, María Carolina y REYES, Henry. Solución Numérica de la ecuación de Richards, Tesis de grado, Bucaramanga, 2003. 86 p. Trabajo de grado (Ingeniero Civil). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico mecánicas. Escuela de Ingeniería Civil.

CELIA, Michael A.; BOULOUTAS, Efthimios T. y ZARBA, Rebecca L. A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation. Water Resources Research, Vol. 26, No. 7, Julio 1990. p. 1486-1496.

CHAPRA, Steven C. y CANALE, Raymond P. Métodos numéricos para ingenieros. México, D.F.: McGraw-Hill Interamericana Editores, S.A. de C.V., 2003. p. 255-257, 854.

BASHA, H.A. Multidimensional linearized nonsteady infiltration with prescribed boundary conditions at the soil surface. Water Resources Research, Vol. 35, No. 1, 1999. p. 75-93.

BASHA, H.A. Burger's equation: a general nonlinear solution of infiltration and redistribution. Water Resources Research, Vol. 38, No. 11, 2002. p. 29-29.

BOULOUTAS, Efthimios T. Improved numerical approximations for flow and transport in the unsaturated zone, 1989, 281 p. Trabajo de grado (Doctor of Philosophy). Department of Civil Engineering. Massachusetts Institute of Technology.

BREBBIA, C.A. y WALER, S. 1980. Boundary Element Techniques in Engineering. Londres: Newnes-Butterworths, p. 210.

BROADBRIDGE, P y WHITE, I. Constant rate rainfall infiltration: A versatile nonlinear model – 1. Analytic solutions. Water Resources Research, Vol. 24, No.1, 1988. p.145-154.

BURDEN, Richard L. y FAIRES, J. Douglas. Análisis Numérico. México, D.F.: Thomson Learning, 2002. p. 465-477.

FEDDES, R.A.; KABAT, P.; VAN BAKER, P.J.T.; BRONSWIJK, J.J.B. y HALBERTSMA, J. Journal of Hydrology 100, 1988. p. 69-111.

HAVERKAMP, R. y VAUCLIN, M. A Note on Estimating Finite Difference Interblock Hydraulic Conductivity Values for Transient Unsaturated Flow Problems. Water Resources Research, Vol. 15, No. 1, 1979. p. 181-187.

LEWIS, R.W.; NITHIARASU, P. y SEETHAMARU, K. Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow. West Sussex: John Wiley & Sons, 2004.

HUYAKORN, P.S. y THOMAS, S.D. Techniques for Making Finite Elements Competitive in Modeling Flow in Variably Saturated Porous Media.

KUTILEK, M. y NOVAK, V. Aspects of the development of soil physics in central and eastern Europe and impact of a totalitarian ideology upon it. *Advances in GeoEcology* 29, 1997. p. 241-259.

MATHEWS, John T. y FINK, Kurtis D. Métodos Numéricos con MATLAB. Madrid: Pearson educación S.A., 2000. p. 305-316. *Water Resources Research*, Vol. 20, No. 8, 1984. p. 1099-1115.

NEUMAN, S.P. Saturated-unsaturated seepage by finite elements. *Proceedings of ASCE, Journal of Hydraulics*, 1973. p. 2233-2250.

PAN, L.; WARRIK, A.W. y WIERENGA, P.J. Finite elements methods for modeling water flow in variably saturated porous media: numerical oscillation and mass distributed schemes. *Water Resources Research*, Vol. 32, 1996. p. 1883-1889.

PERAL, Ireneo A. Ecuaciones en derivadas parciales. Addison-Wesley / Universidad Autónoma de Madrid, 1995. p. 15.

ROLSTON, D.E. Historical development of soil-water physics and solute transport in porous media. *Water Science & Technology: Water Supply*, Vol. 7, No. 1, 2007. p. 59-66.

ROSS, P.J., 1990. Efficient numerical methods for infiltration using Richard's equation. *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 2, 1990. p. 279-290.

SALVUCCI, G.D. An approximate solution for steady vertical flux of moisture through an unsaturated homogeneous soil. *Water Resources Research*, Vol. 29, No. 11, 1993. p. 3749-3753.

ŠIMUNEK, J.; VAN GENUTCHEN, M. Th. y ŠEJNA, M. The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. Department of Environmental Sciences. University of California Riverside. 2005.

ŠOLIN, Pavel. Partial Differential Equations and the Finite Element Method. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006.

SPOSITO, G. The "Physics" of soil water physics. *Water Resources Research*, Vol. 22, 1986. p. 83-88.

TADJERAN, Charles. Stability analysis of the Crank-Nicholson method for variable coefficient diffusion equation. *Communications in numerical methods in engineering*, Vol. 23, No. 1, 2007. p. 29-34.

VARADO, N.; BRAUD, I. Y Ross, P.J., Haverkamp, R., 2003. Assessment of an efficient numerical solution of the 1-D Richards' equation on bare soil. *Journal of Hydrology* 323, 2006. p. 244-257.

WOODWARD, Carol S. y DAWSON, Clint N. Analysis of Expanded Mixed Finite Element Methods for a Nonlinear Parabolic Equation Modeling Flow into Variably Saturated Porous Media. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 37, No. 3, 2000, p. 701-724.

ZHU, J. y MOHANTY, P. Analytical solutions for steady state vertical infiltration. *Water Resources Research*, Vol. 38, No. 8, 2002. p. 201-20-5.

ZIENKIEWICZ, O.C. y PARECK, C.J. Transient field problems: two dimensional analysis by isoparametric finite element. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2, 1970. p. 61-71.

ZIENKIEWICZ, O.C. y TAYLOR, R.L. *The Finite Element Method*. v.1. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. v.1.

## ANEXOS

### ANEXO A: EJEMPLOS DE TABLAS DE PROPIEDADES DE MATERIALES

Considérese un suelo que puede ser descrito usando el modelo van-Genuchten Mualem con los siguientes parámetros

$$\text{Suelo de prueba: } \theta_s = 0.3658 [\text{cm}^3/\text{cm}^3], \theta_r = 0.0286 [\text{cm}^3/\text{cm}^3], n = 2.24$$

$$K_s = 541 \text{ cm día}^{-1}, \alpha = 0.028 \text{ cm}^{-1}$$

Para este suelo, se ha calculado la tabla de propiedades de materiales descrita en la sección 2.3.2, usando diferentes resoluciones. La Tabla A.1 ha sido elaborada usando un incremento de la presión de poros  $\psi_{i+1}/\psi_i$  igual a 1.50, mientras que la Tabla A.2 se construyó usando una resolución mayor, con  $\psi_{i+1}/\psi_i$  iguala 1.25.

**Tabla A.9.1.** Tabla de propiedades de materiales para el 'suelo de prueba'. Resolución  $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.50$

$i$	$\psi$ [cm]	$\theta$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$K$ [cm/s]	$i$	$\psi$ [cm]	$\theta$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$K$ [cm/s]
30	-85222.6930	0.0286	1.1610E-20	15	-194.6195	0.0694	3.2474E-07
29	-56815.1287	0.0286	9.1717E-20	14	-129.7463	0.0948	2.4193E-06
28	-37876.7524	0.0287	7.2456E-19	13	-86.4976	0.1335	1.6645E-05
27	-25251.1683	0.0287	5.7240E-18	12	-57.6650	0.1869	9.6842E-05
26	-16834.1122	0.0288	4.5219E-17	11	-38.4434	0.2477	4.1898E-04
25	-11222.7415	0.0289	3.5723E-16	10	-25.6289	0.3005	1.2185E-03
24	-7481.8276	0.0290	2.8221E-15	9	-17.0859	0.3346	2.4128E-03
23	-4987.8851	0.0293	2.2294E-14	8	-11.3906	0.3522	3.6093E-03
22	-3325.2567	0.0298	1.7611E-13	7	-7.5938	0.3601	4.5451E-03
21	-2216.8378	0.0306	1.3912E-12	6	-5.0625	0.3635	5.1871E-03
20	-1477.8919	0.0319	1.0987E-11	5	-3.3750	0.3649	5.6002E-03
19	-985.2613	0.0341	8.6742E-11	4	-2.2500	0.3654	5.8579E-03
18	-656.8408	0.0377	6.8416E-10	3	-1.5000	0.3656	6.0162E-03
17	-437.8939	0.0437	5.3834E-09	2	-1.0000	0.3657	6.1127E-03
16	-291.9293	0.0534	4.2112E-08	1	0.0000	0.3658	6.2616E-03

**Tabla A.9.2.** Tabla de propiedades de materiales para el 'suelo de prueba'. Resolución  $\psi_{i+1}/\psi_i = 1.25$

$i$	$\psi$ [cm]	$\theta$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$K$ [cm/s]	$i$	$\psi$ [cm]	$\theta$ [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]	$K$ [cm/s]
63	-87581.1540	0.0286	1.0102E-20	31	-69.3889	0.1609	4.4601E-05
62	-70064.9232	0.0286	3.1506E-20	30	-55.5112	0.1925	1.1276E-04
61	-56051.9386	0.0286	9.8263E-20	29	-44.4089	0.2261	2.5952E-04
60	-44841.5509	0.0286	3.0647E-19	28	-35.5271	0.2591	5.3279E-04
59	-35873.2407	0.0287	9.5584E-19	27	-28.4217	0.2886	9.6516E-04
58	-28698.5925	0.0287	2.9812E-18	26	-22.7374	0.3126	1.5458E-03
57	-22958.8740	0.0287	9.2979E-18	25	-18.1899	0.3306	2.2181E-03
56	-18367.0992	0.0287	2.8999E-17	24	-14.5519	0.3431	2.9071E-03
55	-14693.6794	0.0288	9.0444E-17	23	-11.6415	0.3515	3.5505E-03
54	-11754.9435	0.0289	2.8208E-16	22	-9.3132	0.3569	4.1126E-03
53	-9403.9548	0.0289	8.7978E-16	21	-7.4506	0.3603	4.5815E-03
52	-7523.1638	0.0290	2.7439E-15	20	-5.9605	0.3625	4.9605E-03
51	-6018.5311	0.0292	8.5579E-15	19	-4.7684	0.3638	5.2606E-03
50	-4814.8249	0.0294	2.6691E-14	18	-3.8147	0.3646	5.4949E-03
49	-3851.8599	0.0296	8.3244E-14	17	-3.0518	0.3650	5.6762E-03
48	-3081.4879	0.0299	2.5962E-13	16	-2.4414	0.3653	5.8155E-03
47	-2465.1903	0.0304	8.0968E-13	15	-1.9531	0.3655	5.9221E-03
46	-1972.1523	0.0309	2.5251E-12	14	-1.5625	0.3656	6.0035E-03
45	-1577.7218	0.0317	7.8742E-12	13	-1.2500	0.3657	6.0656E-03
44	-1262.1774	0.0327	2.4553E-11	12	-1.0000	0.3657	6.1127E-03
43	-1009.7420	0.0340	7.6546E-11	11	-0.8000	0.3658	6.1486E-03
42	-807.7936	0.0357	2.3858E-10	10	-0.6400	0.3658	6.1758E-03
41	-646.2349	0.0379	7.4328E-10	9	-0.5120	0.3658	6.1965E-03
40	-516.9879	0.0409	2.3140E-09	8	-0.4096	0.3658	6.2122E-03
39	-413.5903	0.0448	7.1956E-09	7	-0.3277	0.3658	6.2241E-03
38	-330.8722	0.0499	2.2333E-08	6	-0.2621	0.3658	6.2332E-03
37	-264.6978	0.0566	6.9094E-08	5	-0.2097	0.3658	6.2400E-03
36	-211.7582	0.0654	2.1267E-07	4	-0.1678	0.3658	6.2452E-03
35	-169.4066	0.0768	6.4916E-07	3	-0.1342	0.3658	6.2492E-03
34	-135.5253	0.0915	1.9550E-06	2	-0.1074	0.3658	6.2522E-03
33	-108.4202	0.1101	5.7632E-06	1	0.0000	0.3658	6.2616E-03
32	-86.7362	0.1332	1.6436E-05				

## ANEXO B: INTERPOLACIÓN MEDIANTE SPLINES CÚBICOS

Supóngase que se tiene un conjunto de pares ordenados  $(x_i, y_i)$  con  $i = 1, \dots, n$ , los cuales están ordenados de forma creciente, esto es,  $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ . El proceso de interpolación consiste en estimar el valor de la variable dependiente para cierto valor de la variable independiente,  $x_p$ , que no pertenece al conjunto de pares ordenados. Para lograr este propósito, se busca encontrar una función  $S(x)$  a partir de la cual se pueda hacer la estimación  $y_p = S(x_p)$ . Un método de interpolación posible es el de *splines cúbicos*, el cual utiliza un polinomio de tercer orden a trazos como función de interpolación.

Se dice que una función  $S(x)$  es un *spline cúbico* interpolador de los pares ordenados si existen  $m = n - 1$  polinomios cúbicos  $S_k(x)$  de la forma

$$S(x) = S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3$$

Para  $x \in [x_k, x_{k+1}]$  y  $k = 1, \dots, m$ . Estos polinomios cumplen las condiciones:

- $S(x_k) = y_k$ , para  $k = 1, \dots, n$
- $S_k(x_{k+1}) = S_{k+1}(x_{k+1})$ , para  $k = 1, \dots, n - 1$
- $S'_k(x_{k+1}) = S'_{k+1}(x_{k+1})$ , para  $k = 1, \dots, n - 1$
- $S''_k(x_{k+1}) = S''_{k+1}(x_{k+1})$ , para  $k = 1, \dots, n - 1$

Estas limitaciones aseguran que el spline cúbico sea una función a trazos continua hasta la segunda derivada. Si además se agregan las condiciones  $S''(x_1) = 0$  y  $S''(x_n) = 0$ , se obtiene lo que se conoce como spline cúbico *natural* (Mathews y Fink, 1999).

Los coeficientes  $a_k, b_k, c_k$  y  $d_k$  se determinan a partir de las condiciones que se han impuesto al polinomio de interpolación. El proceso de cálculo de estos coeficientes se presenta en el algoritmo A.1, y para los detalles se remite el lector a Mathews y Fink (2000) o a Castañeda y Reyes (2003).

En el contexto de la solución numérica del problema de flujo en medios porosos, es necesario construir dos splines cúbicos que relacionen la presión de poros con la conductividad hidráulica y el contenido de humedad, respectivamente. El modelo numérico SIMFLUX realiza el proceso de interpolación en dos etapas, cada una definida por una función de MATLAB:

- *Cálculo de los coeficientes del spline:* Los coeficientes  $a_k, b_k, c_k$  y  $d_k$  se calculan usando la función

```
[a,b,c,d]=splinecoef(x,y)
```

Donde  $x$  y  $y$  son la representación en vectores columna de los  $n$  pares ordenados, y  $a, b, c$  y  $d$  son vectores columna  $n$  elementos que contienen los coeficientes  $a_k, b_k, c_k$  y  $d_k$ , respectivamente. A modo de ser consistente con la formulación del spline cúbico, se toma  $b_n = d_n = 0$ .

- *Evaluación del estimado:* El cálculo del estimado de  $y$  para un valor  $x_p$  se realiza con la función

`y=keval(a,b,c,d,x,xp)`

Los vectores  $a, b, c, d$  y  $x$  son los mismos definidos anteriormente. Esta función se utiliza para calcular la conductividad hidráulica y el contenido de humedad que corresponden a cierta presión de poros.

Adicional a las funciones anteriores, se ha escrito una tercera rutina que permite estimar la derivada de  $y$  con respecto a  $x$ . Usando diferencias finitas centrales, es posible escribir

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_i} \cong \frac{S(x_i + \Delta x) - S(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}.$$

La función `ceval` implementa la aproximación anterior. Su sintaxis es

`dy=Ceval(a,b,c,d,x,xp,dx),`

donde  $dy$  es el estimado de la derivada de  $y$  en  $x_p$ , y  $dx$  equivale al incremento  $\Delta x$  en la fórmula de diferencias. Esta función es usada por SIMFLUX para determinar la capacidad específica de humedad a partir de la relación entre el contenido de humedad y la presión de poros.

**Algoritmo A.9.1.** Cálculo de los coeficientes del spline cúbico de interpolación

1. Calcúlese  $h_k = x_{k+1} - x_k$ , y  $p_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}$ , para  $k = 1, \dots, m$
2. Hágase  $a_k = y_k$  para  $k = 1, \dots, n$
3. Tómese  $c_1 = 0$
4. Calcúlense los coeficientes  $c_2, c_3, \dots, c_m$  resolviendo el sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} 2(h_1 + h_2) & h_2 & \cdots & 0 \\ h_2 & 2(h_2 + h_3) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & h_{n-2} \\ 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3(p_2 - p_1) \\ 3(p_3 - p_2) \\ \vdots \\ 3(p_{n-1} - p_{n-2}) \end{bmatrix}$$

5. Determinéense los coeficientes  $b_k$  para  $k = 1, \dots, m$  usando la fórmula

$$b_k = \frac{1}{h_k}(a_{k+1} - a_k) + \frac{3}{h_i}(c_{i+1} + 2c_i)$$

6. Determinéense los coeficientes  $c_k$  para  $k = 1, \dots, m$  usando la fórmula

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}$$