

HYDROFEM: UN MODELO TRIDIMENSIONAL PARA LA SIMULACIÓN DEL FLUJO DE AGUA EN MEDIOS POROSOS DE SATURACIÓN VARIABLE

A. Arrarás Ventura

Dpto. de Matemática e Informática, Universidad Pública de Navarra, Campus de Arrosadía s/n, 31006, Pamplona – Iruñea, arraras.30791@e.unavarra.es.

RESUMEN. El presente artículo tiene como objetivo principal la presentación del código HYDROFEM, desarrollado como herramienta de simulación para la caracterización de flujos de agua en la zona no saturada del suelo. Genéricamente, la aplicación está basada en la conocida ecuación de Richards, que posee una naturaleza fuertemente no lineal que hace de las técnicas numéricas el medio apropiado para su integración. Frente a otros modelos existentes, éste facilita la resolución de casos prácticos que tienen lugar sobre dominios espaciales tridimensionales y permite de este modo la simulación de sistemas complejos, cuya parametrización no admite el uso de esquemas simplificados a una o dos dimensiones. De forma adicional, unifica las alternativas incorporadas a distintos programas ampliamente utilizados en el ámbito de la hidrogeología, añadiendo al modelo general los procesos de precipitación y evaporación, drenaje libre y en profundidad o filtración multidireccional –a través de condiciones de contorno específicas–, así como una función de absorción radicular, en sus formulaciones de Feddes y van Genuchten –como término sumidero. El tratamiento de las propiedades hidráulicas del suelo ofrece la posibilidad de introducir diversos modelos analíticos para el estudio de perfiles homogéneos y estratificados (tales como Brooks-Corey, van Genuchten-Mualem y Vogel-Císlerová), asumiendo que su variabilidad espacial queda definida por una componente lineal dominante, caracterizada mediante un conjunto de factores de escala. Por último, HYDROFEM se halla dotado de una interfaz gráfica en entorno Windows, que permite la interacción del usuario tanto para la entrada de datos como para el post-proceso de resultados.

ABSTRACT. In general terms, the main object of this paper is the presentation of HYDROFEM code, developed for its use as a simulation tool for the characterization of water flow in the unsaturated zone. The model is based on Richards' equation, a strongly nonlinear expression which requires efficient numerical methods for its integration. In comparison to other similar codes, HYDROFEM solves the water movement equation in those cases that take place over three-dimensional flow domains, permitting the

simulation of complex systems which may be impossible to model by simplified one- or two-dimensional schemes. Moreover, the code unifies several features developed by highly-used computer programs among the hydrogeology community, including processes such as precipitation and evaporation, free and deep drainage or multidirectional seepage –through specific boundary conditions–, as well as a root water uptake function, in both Feddes' and van Genuchten's formulations –as the sink term. Treatment of the constitutive relationships of soil hydraulic properties takes into account several analytical models for the study of homogeneous and stratified profiles (such as Brooks-Corey, van Genuchten-Mualem and Vogel-Císlerová), assuming that their spatial variability is defined by a dominant linear component, characterized through a set of scaling factors. Finally, HYDROFEM presents a graphical user-friendly interface, developed for Windows workstations, which permits a global control over both the input data and the output results.

1. Introducción

La zona no saturada (ZNS) del suelo representa un papel fundamental como parte integral del ciclo hidrológico. Entre los diversos fenómenos que tienen lugar en ella, destaca de un modo preferente el del flujo de agua, ya que es el responsable del transporte de calor y solutos en el subsuelo, define la tasa de ocurrencia de procesos microbiológicos y de crecimiento vegetal, gobierna la transpiración, afecta a la recarga de acuíferos subterráneos –controlando la escorrentía superficial– y posee otras muchas influencias sobre aspectos del medio natural.

Durante las últimas décadas, se ha realizado un considerable progreso en el desarrollo conceptual y la descripción matemática del flujo de agua en la ZNS, lo que ha dado lugar a una gran variedad de modelos analíticos y numéricos que predicen los procesos de transferencia de agua entre la superficie del suelo y su nivel freático. Entre ellos, la ecuación de Richards constituye el modelo de flujo de agua de mayor aceptación en el ámbito de la

hidrología y ciencias relacionadas. Dicha ecuación –de tipo diferencial en derivadas parciales, parabólica y no lineal– admite diversos esquemas numéricos de resolución, que están basados en la aplicación de técnicas de diferencias finitas o elementos finitos de orden bajo, en espacio y tiempo. El primero de ambos métodos ha sido tradicionalmente utilizado para la integración del modelo de flujo debido a Richards, dada la relativa simplicidad que requiere su planteamiento y resolución. En esencia, puede decirse que la inestabilidad derivada de la versión explícita en diferencias es compensada por su análoga implícita, a pesar de lo cual la técnica presenta una velocidad de convergencia reducida y se hace inflexible en el tratamiento de geometrías complejas o condiciones de contorno variables. Por su parte, el método de elementos finitos ofrece una vía eficiente para la representación de dominios de flujo irregulares, compuestos por medios heterogéneos y con anisotropía variable, en situaciones sujetas a restricciones de frontera no lineales o dependientes de tiempo. En muchos casos, la tasa de convergencia alcanzada por esta técnica supera a la obtenida mediante el esquema en diferencias, lo cual compensa el esfuerzo requerido para la construcción de la malla de elementos sobre el espacio de trabajo.

Las publicaciones relativas a la solución numérica de la ecuación de Richards han sido muy numerosas en los últimos tiempos, lo que ha permitido progresar considerablemente en el diseño y desarrollo de metodologías aproximativas aplicadas a la misma. Por orden cronológico, cabe mencionar en primer lugar los modelos bidimensionales implementados en los años setenta por Neuman (1975) y Feddes *et al.* (1975). Posteriormente, en la búsqueda y optimización de métodos generales, destacaría el trabajo de Milly (1985) sobre modelos conservativos para el flujo de agua en la ZNS, que derivó años después en el estudio de Celia *et al.* (1990), a partir del cual se generalizaría el uso de la formulación mixta de la ecuación de Richards. Todo ello dio lugar a la aparición de un gran número de aplicaciones orientadas al análisis de procesos, en perfiles de suelo sometidos a condiciones de saturación y subsaturación. De entre ellas, serían de especial interés aquéllas basadas tanto en modelos unidimensionales (*e.g.*, SWATRE, posteriormente transformado en SWAP, de Feddes *et al.*), como en bidimensionales (*e.g.*, UNSAT2, desarrollado por Neuman *et al.*; HYDRUS-2D, de Šimůnek *et al.*).

En los últimos años, se han investigado nuevos planteamientos para el tratamiento de las no linealidades inherentes a la ecuación de flujo, tales como el método de las líneas propuesto por Kelley *et al.* (1996) y Tocci *et al.* (1997 y 1998), asociado al uso de integradores de ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE).

El presente informe trata de exponer una nueva aplicación para la modelización y simulación de flujos en medios porosos y, por extensión, aplicable a la ZNS del suelo. Partiendo de la exploración de los modelos señalados previamente, se ha desarrollado el programa HYDROFEM (HYDROlogical Finite Element Method), cuya característica diferencial más importante radica en su

aplicación sobre dominios tridimensionales de geometrías regulares. En efecto, son muchos los casos prácticos que exigen la incorporación de la tercera dimensión a los modelos de simulación propuestos, puesto que, de este modo, permiten introducir variaciones elementales en cualquiera de las direcciones coordenadas. Así, es posible hacer extensible el modelo a un amplio conjunto de situaciones reales (perfiles que presentan desniveles topográficos, cambios geológicos, acuíferos colgantes, canales de drenaje y, en general, cualquier elemento capaz de alterar la homogeneidad del flujo acuoso en el subsuelo), cuya evaluación carecería de sentido bajo esquemas unidimensionales o bidimensionales.

A continuación se realiza una descripción sucinta de los fundamentos teóricos en que se basa el código, demostrando sus características específicas y su potencial de cálculo mediante la aplicación del mismo a un ejemplo práctico sencillo.

2. Formulación del modelo

La ecuación que rige la dinámica del agua en medios porosos parcialmente saturados, debida a Richards, se obtiene por combinación de la ley de Darcy y la ecuación de continuidad. Suponiendo un flujo isotérmico y tridimensional, bajo condiciones de anisotropía y heterogeneidad del medio, dicha expresión adquiere la forma:

$$\text{div} (K\mathbf{K}^A\nabla h) = \frac{\partial\theta}{\partial t} + S, \quad (1)$$

donde K es la conductividad hidráulica [LT^{-1}], \mathbf{K}^A constituye un tensor adimensional de segundo orden que representa la naturaleza anisótropa del medio, h denota el potencial del agua del suelo [L], θ es el contenido de humedad volumétrico [L^3L^{-3}], t se corresponde con la variable temporal [T], siendo S el término sumidero de absorción radicular [T^{-1}]. Expandiendo el primer miembro de la Ec. (1) y teniendo en cuenta que el valor del potencial en la ZNS se reduce a sus componentes matricial y gravitatoria, se tiene:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial\psi}{\partial x_j} + K_{i3}^A \right) \right] - S, \quad (2)$$

donde ψ representa el potencial matricial [L], \mathbf{x} es la variable espacial [L] y los subíndices $i, j = 1, 2, 3$ hacen referencia a las coordenadas en el dominio de flujo.

La definición de la ecuación de Richards se completa con las relaciones constitutivas existentes entre las variables de estado en ella implicadas, de tal modo que, en su formulación, han de incluirse las dependencias funcionales dadas por $\theta = \theta(\psi)$ y $K = K(\psi)$. Este hecho hace posible plantear la relación a través de diversas expresiones, cada una de las cuales posee un comportamiento determinado en función de la situación física y de la técnica de resolución utilizada. En este sentido, el esquema dado por la Ec. (2),

correspondiente a la formulación mixta (cuyo nombre pone de manifiesto la presencia de ambas variables, θ y ψ), posee la propiedad fundamental de ser conservativo, de modo que permite minimizar los errores estimados a través del balance de masas (Celia *et al.*, 1990).

El programa HYDROFEM implementa tres modelos analíticos para las relaciones constitutivas señaladas (Brooks-Corey, van Genuchten-Mualem y Vogel-Císlerová), ofreciendo al usuario la flexibilidad de adaptación a su situación concreta en estudio. Las expresiones funcionales debidas a dichos modelos han sido ampliamente utilizadas por diversos autores (Kutílek y Nielsen, 1994) y requieren para su aplicación de los parámetros hidráulicos asociados a cada uno de ellos. Dentro del dominio espacial discretizado, se supone que cada punto presenta un código relacionado con el tipo de material que le caracteriza, al cual le corresponde un conjunto específico de parámetros hidráulicos. Por tanto, es posible llevar a cabo un análisis exhaustivo de perfiles heterogéneos en los que coexisten horizontes de suelo diferenciados. Finalmente, la variabilidad espacial de las propiedades hidráulicas se expresa en términos de factores de escala dependientes de la ubicación, asumiendo que la componente lineal de la misma domina sobre la no lineal y permite de este modo la transformación de los valores de ψ , θ y K mediante relaciones de proporcionalidad. Dichos factores son denotados para las variables del modelo como α_ψ , α_θ y α_K , respectivamente (Vogel *et al.*, 1991).

2.1. Funciones de absorción radicular

Desde un punto de vista hidrológico, el nivel de extracción por parte del sistema radicular de las plantas, así como la distribución espacial del mismo, ejercen un elevado grado de control sobre los flujos de agua hacia la atmósfera y los acuíferos subterráneos. Genéricamente, dicha influencia puede cuantificarse en cierto modo a partir de modelos de simulación dinámicos.

En este sentido, el código HYDROFEM incorpora un término sumidero, S , que representa el volumen de agua extraído en la unidad de tiempo por un elemento volumétrico del sistema radicular [$L^3L^{-3}T^{-1}$]. Este planteamiento permite la integración directa de la absorción radicular con el flujo de agua transitorio, estableciendo de forma natural las interacciones existentes entre los procesos extractivo y transpirativo.

El valor de S viene dado, según el modelo de Vrugt (Šimůnek *et al.*, 2001), por la relación:

$$S(\psi, x_1, x_2, x_3) = \alpha(\psi) S_p(x_1, x_2, x_3), \quad (3)$$

donde $\alpha(\psi)$ es la función adimensional de respuesta al stress por sequía y S_p constituye la velocidad de absorción radicular potencial [T^{-1}].

Existen dos modelos que tratan de explicar el comportamiento de la función $\alpha(\psi)$ en el intervalo de variación del potencial matricial, debidos respectivamente a Feddes y van Genuchten.

El primero de ellos considera una función $\alpha(\psi)$ definida a tramos, que se encuentra acotada por los valores extremos del punto de anaerobiosis, ψ_1 , y el punto de marchitez permanente, ψ_4 . Según el modelo, la absorción radicular es nula para valores de $|\psi| \geq \psi_1$ o cuando $|\psi| < \psi_4$, alcanzando un valor óptimo unitario en el intervalo comprendido entre los puntos intermedios ψ_2 y ψ_3 . Cuando el potencial matricial se sitúa entre ψ_1 y ψ_2 o entre ψ_3 y ψ_4 , el factor $\alpha(\psi)$ presenta una variación lineal, respectivamente creciente o decreciente. En general, el valor de ψ_2 depende del tipo de suelo considerado, mientras que ψ_3 es función de la demanda atmosférica, por lo que fluctúa según la variación de la velocidad de transpiración potencial, T_p [LT^{-1}] (Feddes *et al.*, 1988). Para llevar a cabo la simulación, HYDROFEM hace uso de los cuatro parámetros que definen el comportamiento del modelo, de tal forma que éstos han de ser evaluados previamente en función del tipo de cultivo considerado.

Por su parte, el modelo de van Genuchten propone una función $\alpha(\psi)$ del tipo:

$$\alpha(\psi) = \frac{1}{1 + \left[\frac{\psi(x_1, x_2, x_3, t)}{\psi_{50}} \right]^p}, \quad (4)$$

donde ψ_{50} es el potencial matricial al cual la velocidad de absorción radicular se reduce en un 50% [L] y p representa un parámetro de ajuste adimensional al que se le suele asignar un valor de 3. Nótese cómo, a diferencia del modelo anterior debido a Feddes, esta formulación depende exclusivamente de los parámetros ψ_{50} y p , y no considera una reducción del valor de $\alpha(\psi)$ en condiciones próximas a la saturación. Esta simplificación se justifica únicamente si se consideran períodos de tiempo relativamente cortos en situaciones en las que $\psi \rightarrow 0$ (Šimůnek *et al.*, 2001).

Finalmente, para completar la definición del término S , se establece la velocidad de absorción radicular potencial, S_p , como:

$$S_p(x_1, x_2, x_3) = \beta'(x_1, x_2, x_3) S_T T_p, \quad (5)$$

siendo β' la distribución espacial normalizada de la velocidad de absorción radicular [L^{-3}] y S_T el área asociada al proceso de transpiración [L^2]. En este caso, los datos de entrada requeridos por HYDROFEM tienen en cuenta la estimación de β' propuesta por Vrugt para cada punto incluido en el dominio de flujo, en función de las longitudes radiculares máximas en las respectivas direcciones de los ejes coordenados ($0 \leq \beta' \leq 1$). Adicionalmente, S_T se calcula como la suma de las subáreas asociadas a los nodos situados en la rizosfera (que verifican la desigualdad $\beta' > 0$) y T_p constituye un dato medido en instantes de tiempo determinados a lo largo de la simulación.

2.2. Condiciones iniciales y de contorno

La ecuación de Richards requiere de un conjunto de condiciones auxiliares que incorporen a su definición la información necesaria para su integración.

En principio, es común expresar la distribución inicial del potencial matricial en el dominio de flujo considerado, de tal modo que:

$$\psi(x_1, x_2, x_3, t) = \psi_0(x_1, x_2, x_3), \quad t = 0, \quad (6)$$

donde ψ_0 [L] es función de las coordenadas espaciales.

Las condiciones de contorno pueden ser clasificadas, en función de su relación con el sistema en estudio, como independientes o dependientes del mismo.

En el primer caso, deben distinguirse como condiciones esenciales o de tipo Dirichlet aquéllas en las que aparece implicada una función espacio-temporal de potencial matricial, ψ_D [L], de la forma:

$$\psi(x_1, x_2, x_3, t) = \psi_D(x_1, x_2, x_3, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad (7)$$

donde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ y Γ_D es la superficie de frontera en la que se verifica la igualdad. Por el contrario, cuando se conoce la distribución de flujo, σ_N [LT⁻¹], en una parte del contorno, Γ_N , a lo largo del tiempo de simulación, las condiciones se denominan naturales o de tipo Neumann, cumpliéndose la expresión:

$$- \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + K_{33}^A \right) n_i \right] = \sigma_N(x_1, x_2, x_3, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad (8)$$

donde n_i representa la i -ésima componente del vector unitario normal a la superficie Γ_N y dirigido hacia el exterior. Adicionalmente, existe un tercer tipo de condiciones, denominadas de gradiente, para las cuales se verifica:

$$\left(K_{ij}^A \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + K_{33}^A \right) n_i = \sigma_G(x_1, x_2, x_3, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_G, \quad (9)$$

donde σ_G [-] es una función determinada de \mathbf{x} y t , siendo Γ_G su área correspondiente. En este caso, bajo condiciones de flujo lentamente variable y si el nivel freático se encuentra a una profundidad considerable respecto a la superficie del terreno, es posible asumir la existencia de un gradiente unitario en la dirección vertical descendente, de modo que el segundo miembro de la Ec. (9) adquiere un valor de $\sigma_G = 1$ (McCord, 1991).

Por otra parte, HYDROFEM incluye un conjunto de condiciones de contorno dependientes del sistema que permite el análisis de un amplio espectro de aplicaciones prácticas.

La primera de ellas hace referencia a las superficies en contacto con la atmósfera, las cuales, en ausencia de procesos de almacenamiento por interceptación, representan focos potenciales de evaporación e infiltración. En el transcurso de una simulación, las condiciones atmosféricas pueden variar de tipo Dirichlet a tipo Neumann, en función de las restricciones:

$$\left| K \left(K_{ij}^A \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + K_{33}^A \right) n_i \right| \leq |E_s|, \quad (10)$$

$$\psi_A \leq \psi \leq \psi_B,$$

donde E_s es el flujo potencial a través de la superficie del suelo [LT⁻¹] y ψ_A y ψ_B constituyen los valores mínimo y máximo del potencial matricial en la superficie, según el estado de humectación del terreno [L] (Feddes *et al.*, 1975). En general, este tipo de restricciones es aplicable a regiones del terreno en las que se puede disponer de un registro detallado de los valores de precipitación y evaporación y que requieren, por su morfología, del uso de modelos espaciales tridimensionales.

Una segunda condición considera la relación existente entre la posición del nivel freático, θ [L], y el flujo vertical de drenaje en profundidad, q [LT⁻¹], a través de la superficie inferior del perfil. En este caso, se tiene:

$$q(\psi) = -A_{q\psi} e^{B_{q\psi} |\psi - \theta_r|} \quad (11)$$

donde $A_{q\psi}$ y $B_{q\psi}$ son dos parámetros empíricos de ajuste [LT⁻¹], [L⁻¹] y θ_r representa el nivel freático de referencia [L] (Hopmans y Stricker, 1989). La expresión anterior establece una condición natural de flujo específico. Por lo común, relaciones de este tipo pueden establecerse siempre que se está en disposición de una serie de mediciones del nivel freático en diferentes planos del dominio analizado.

Finalmente, se incorporan condiciones de contorno que suponen la existencia de caras de filtración y tuberías de drenaje en disposición tridimensional. En ambos casos, la distribución relativa de la superficie de contorno entre las zonas saturada y subsaturada está sometida a una variación temporal imposible de predecir *a priori*. La subárea saturada es considerada como una condición de tipo Dirichlet, con una distribución de potencial matricial uniforme e igual a cero, mientras que la subárea no saturada resulta en una condición de tipo Neumann, en la que el valor del flujo es también nulo (Feddes *et al.*, 1975; Fipps y Skaggs, 1986).

3. Resolución numérica del modelo

Como ya se ha señalado previamente, la complejidad que plantea la búsqueda de soluciones en la ecuación de Richards tiene su origen en la naturaleza no lineal que subyace a su formulación. Por ello, las técnicas numéricas constituyen la alternativa óptima para la resolución aproximada de dicha ecuación. En los epígrafes siguientes se detallan los pasos realizados en el proceso de implementación numérica del modelo de simulación.

3.1. Discretización espacial

Inicialmente, la geometría del medio se reproduce a través de una malla formada por elementos tetraédricos, cuyos vértices se consideran como puntos nodales. Como ya se ha comentado en la Secc. 1, la discretización por

elementos finitos proporciona, frente a las técnicas tradicionales en diferencias, una gran flexibilidad para adaptarse a todo tipo de irregularidades en los contornos o en la variación de las propiedades hidrogeológicas del dominio. De este modo, la variable de estado de la Ec. (2), ψ , es aproximada por una función lineal de la forma:

$$\hat{\psi}(x_1, x_2, x_3, t) = \sum_{n=1}^N \phi_n(x_1, x_2, x_3) \psi_n(t), \quad (12)$$

donde ϕ_n es la función lineal de aproximación correspondiente al nodo n , ψ_n constituye el valor nodal del potencial matricial (incógnita) y N representa el número total de puntos nodales.

El método de Galerkin se construye a partir de la técnica de los residuales ponderados, por igualación de las funciones de ponderación introducidas con el fin de minimizar el error y las funciones de aproximación antes descritas. Para el caso de la ecuación de Richards, se tiene:

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\hat{K} \left(K_{ij}^A \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x_j} + K_{i3}^A \right) \right] + \hat{S} \right\} \phi_n \, d\Omega = 0. \quad (13)$$

En la definición de la expresión obtenida se ha supuesto que las variables asociadas a la conductividad hidráulica y la velocidad de absorción radicular se comportan como funciones lineales similares a la Ec. (12). En general, la Ec. (13) representa la condición de ortogonalidad, por la cual el operador diferencial asociado a la Ec. (2) es ortogonal a cada una de las N funciones de aproximación. Ω constituye el dominio de flujo.

Aplicando la identidad de Green, descomponiendo elemento a elemento y efectuando la integración sobre todos los elementos de Ω , se llega a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias dependientes de la variable temporal y con coeficientes no lineales. En forma matricial, dicho sistema puede representarse como:

$$[F] \frac{d\{\Theta\}}{dt} + [A] \{\Psi\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\}, \quad (14)$$

donde $[F]$ es la matriz de tiempo $[L^3]$, $[A]$ denota la matriz de conductancia $[L^2T^{-1}]$, $\{Q\}$ representa el vector de caudales de contorno $[L^3T^{-1}]$, $\{B\}$ se corresponde con el vector gravitatorio $[L^3T^{-1}]$ y $\{D\}$ es el vector de absorción radicular $[L^3T^{-1}]$. Por su parte, los vectores $\{\Theta\}$ y $\{\Psi\}$ incluyen los valores nodales de las N incógnitas θ_n y ψ_n , respectivamente.

La obtención de una solución precisa que garantice el comportamiento no oscilatorio de los perfiles de infiltración requiere del uso de matrices de tiempo diagonales (Celia *et al.*, 1990). Por tanto, los valores nodales de las derivadas temporales se definen como promedios ponderados sobre la totalidad del dominio de flujo, permitiendo de este modo la diagonalización directa (denominada genéricamente *mass-lumping*) de la matriz $[F]$ (Feddes *et al.*, 1975).

3.2. Discretización temporal

La integración temporal se lleva a cabo mediante un proceso de discretización del dominio del tiempo en una secuencia finita de intervalos, que implica la sustitución de

las derivadas temporales por esquemas en diferencias. Tanto para condiciones de saturación como de subsaturación, se aplica el método de Euler implícito basado en la técnica de diferencias finitas hacia atrás. De este modo, la Ec. matricial (14) adquiere la forma:

$$[F] \frac{\{\Theta\}_{j+1} - \{\Theta\}_j}{\Delta t_j} + [A]_{j+1} \{\Psi\}_{j+1} = \{Q\}_j - \{B\}_{j+1} - \{D\}_j, \quad (15)$$

donde $j+1$ denota el nivel de tiempo actual considerado, j hace referencia al nivel previo y $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$. La Ec. (15) representa el sistema final de ecuaciones algebraicas para el problema de flujo en la ZNS. Puesto que tanto el vector $\{\Theta\}$ como los coeficientes $[A]$, $\{B\}$, $\{D\}$ y $\{Q\}$ (para el caso de condiciones de gradiente específico) son funciones de la variable dependiente, ψ , el sistema de ecuaciones presenta una no linealidad extrema. Obsérvese cómo los vectores $\{D\}$ y $\{Q\}$, contrariamente al esquema puramente implícito, son evaluados en el nivel de tiempo anterior. La inclusión de esta modificación permite generalmente incrementar la velocidad de convergencia del método.

3.3. Criterio de iteración y resolución del sistema lineal

La naturaleza no lineal de la Ec. (15) obliga a aplicar una técnica iterativa para obtener soluciones en cada nivel de tiempo. En este caso, se hace uso del método de Picard modificado, un esquema resolutivo cuasi-Newton que, pese a presentar un orden de convergencia lineal, permite disminuir el coste computacional por iteración, además de preservar la simetría de las matrices del sistema (Paniconi *et al.*, 1991; Li, 1993).

Como consecuencia de la aplicación del bucle iterativo, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales que, tras la incorporación de las condiciones de contorno, debe ser resuelto en cada iteración. El tamaño del problema en estudio constituye el factor determinante del método numérico adecuado para la resolución de dicho sistema. Frente a problemas relativamente pequeños, es posible hacer uso de métodos directos, como la eliminación gaussiana. Por el contrario, problemas de mayor dimensión requieren de la aplicación de técnicas iterativas, como el método del gradiente conjugado con preconditionamiento.

La solución obtenida permite realizar una nueva evaluación de los coeficientes de la Ec. (15), a excepción de los vectores $\{D\}$ y $\{Q\}$, produciendo el correspondiente sistema lineal que deberá ser resuelto. El proceso iterativo va generando soluciones sucesivas hasta que se alcanza un grado de convergencia satisfactorio, que implica que en todos los nodos de la zona saturada (o no saturada), la variación absoluta del potencial matricial (o del contenido de humedad) entre dos iteraciones consecutivas es menor que la tolerancia impuesta al valor de ψ y denotada por δ_ψ (o δ_θ para la variable θ).

3.4. Entorno de programación

El modelo expuesto se halla programado en código FORTRAN y mantiene una estructura modular. Como característica importante, el programa está enteramente

autocontenido, en el sentido de que no requiere el empleo de librerías de subrutinas externas. Al objeto de facilitar la introducción de datos y el post-proceso de resultados, la aplicación dispone de una interfaz gráfica programada en VISUAL BASIC. Mediante dicha aplicación, se generan los archivos de entrada que sirven como *input* al núcleo de cálculo del modelo. Éste a su vez da lugar a un conjunto de archivos de salida, en un formato tal que puede ser leído y ejecutado por el programa GNUPLOT, el cual ofrece los resultados finales en forma gráfica a través de la interfaz inicial. La comunicación que se establece entre las tres aplicaciones permite al usuario un control total sobre los procesos en estudio, facilitando de este modo una labor eficaz en un espacio de trabajo unificado.

4. Ejemplo de aplicación

En este caso práctico se estudia el proceso de lixiviación desde un depósito hacia un acuífero libre en el que existe un pozo de bombeo. La finalidad que se persigue al incluir dicho ejemplo en el presente informe consiste principalmente en poner de manifiesto la capacidad del código HYDROFEM para la simulación de procesos en los que se hallan implicados dominios geométricos en tres dimensiones. Como se ha podido comprobar en la exposición teórica previa, el potencial del modelo abarca aplicaciones muy diversas dentro del ámbito de la ZNS, que difícilmente pueden ser reunidas en un único ejemplo ilustrativo. En consecuencia, ha de tenerse en cuenta que los resultados que se presentan a continuación constituyen tan sólo una muestra parcial de la globalidad que refleja la aplicación implementada.

En primer lugar, la geometría del sistema puede observarse en las vistas en planta y sección de la Fig. 1. Los rangos de variación de cada uno de los ejes del sistema son: $0 \leq x_1 \leq 260$, $-50 \leq x_2 \leq 50$, $0 \leq x_3 \leq 38$.

La discretización espacial de la geometría descrita se lleva a cabo mediante la malla de elementos finitos que se muestra en la Fig. 2, que está constituida por 12144 nodos y 10560 elementos. Debido a la simetría existente en torno al eje x_2 , la simulación sólo se realiza en la mitad de la región considerada. Inicialmente, el nivel freático desciende desde una altura de 28 m sobre la base del acuífero en su parte izquierda hasta los 26 m de la parte derecha del mismo (Fig. 1). En esas condiciones, se supone un valor del potencial matricial en la ZNS en equilibrio con el nivel freático de partida, lo que supone la inexistencia de cualquier tipo de flujo vertical.

El proceso de lixiviación comienza en el momento en que el techo del acuífero desciende repentinamente hasta una altura de 18 m, en el punto específico donde se ubica en concreto el pozo de bombeo ($x_1 = 170$, $x_2 = 0$).

Las condiciones de contorno en las fronteras en que $x_1 = 0$ y $x_1 = 260$ ($-50 \leq x_2 \leq 50$) asumen valores respectivos de $\psi + x_3 = 28$ m y de $\psi + x_3 = 26$ m. El pozo de bombeo queda caracterizado por un valor de $\psi + x_3 = 18$ m a lo largo de la vertical bajo el nivel freático ($x_3 \leq 18$), mientras

que se supone la existencia de una línea de filtración por encima de dicho punto ($x_3 > 18$). En el resto de áreas de frontera se consideran condiciones de flujo nulo. La Tabla 1 describe los parámetros hidráulicos del dominio homogéneo de flujo. Como se puede observar, dichos valores completan la información correspondiente al modelo de Vogel-Císlerová y constituyen los datos introducidos en HYDROFEM para la obtención de la curva característica del suelo y la función de conductividad no saturada. Al objeto de simplificar el proceso simulado, la variabilidad espacial de las propiedades hidráulicas del suelo queda expresada por medio de factores de escala unitarios ($\alpha_\psi = \alpha_\theta = \alpha_K = 1$) en todos los puntos del dominio. Los requisitos de la simulación se completan adoptando valores de tolerancia respectivos de $\delta_\psi = 0.01$ m y $\delta_\theta = 0.0001$.

Para representar gráficamente el proceso de lixiviación y bombeo en términos de las variables de estado de la ecuación de Richards, se han efectuado dos series en las que se ha llevado a cabo un seguimiento de la evolución temporal de ψ y θ , en ubicaciones significativas dentro del dominio de flujo. Así, las Figs. 3, 4 y 5 presentan las variaciones de potencial matricial a las que se ven sometidos los puntos pertenecientes a un plano en el que se verifica la igualdad $x_3 = 20$ m, mientras que las Figs. 6, 7 y 8 comprenden las fluctuaciones en el contenido de humedad de los puntos del plano $x_2 = 0$.

Como puede apreciarse, la evolución de ψ refleja fielmente la formación del cono de depresión en torno al pozo de bombeo, permitiendo realizar un seguimiento progresivo del valor de la variable hasta que ésta alcanza el estado estacionario. Por su parte, la representación espacial de θ describe el inicio del proceso de lixiviación desde el depósito y el avance del frente de humedad hacia la depresión del pozo (obsérvense las isolíneas representadas en la base de las Figs. 6, 7 y 8).

Según los resultados de la simulación, el flujo de agua alcanza el estado estacionario unos 40 días después del inicio de la misma.

Tabla 1. Parámetros hidráulicos del dominio de flujo.

Parámetro	Unidades	Valor
$\theta_a = \theta_a = \theta_k$	$[m^3 m^{-3}]$	0.450
$\theta_r = \theta_b$	$[m^3 m^{-3}]$	0.050
$K_s = K_t$	$[m/día]$	5.000
α	$[m^{-1}]$	4.100
n	$[-]$	2.000

Adicionalmente, la longitud de la línea de filtración a lo largo del pozo puede estimarse de forma aproximada en 5 m, siendo el caudal de bombeo final de 30.80 m³/día.

5. Conclusiones

Se ha presentado el programa HYDROFEM, diseñado para la simulación de procesos en el ámbito de la ZNS del suelo, mostrando especial relevancia en su versatilidad de uso para condiciones de trabajo diversas, así como en la capacidad interactiva de su interfaz gráfica orientada al usuario.

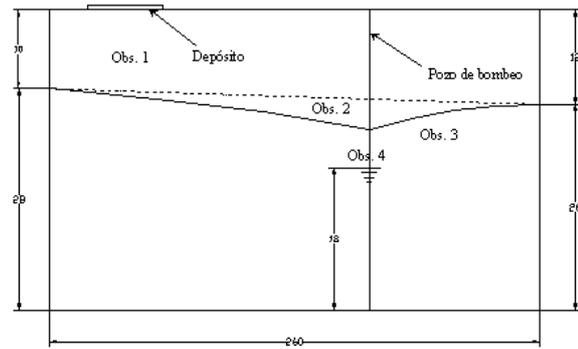
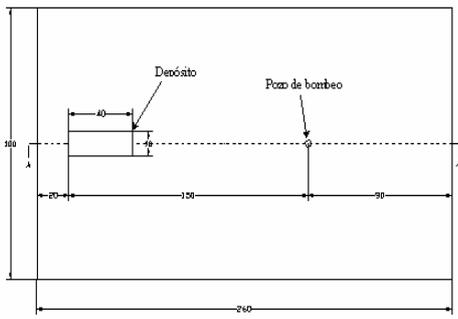


Fig. 1. Vista en planta del dominio de flujo (izda.) y sección transversal del perfil de suelo en la que se describen las condiciones de contorno del problema (dcha).

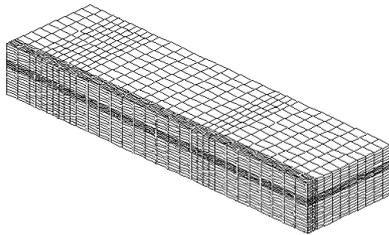


Fig. 2. Malla tridimensional de elementos finitos.

Distribución bidimensional de la presión capilar en el plano XY nº 13

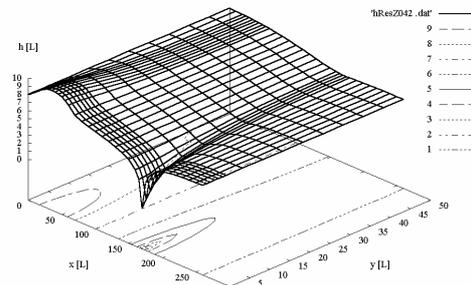


Fig. 5. Distribución del potencial matricial en $t = 1.50$.

Distribución bidimensional de la presión capilar en el plano XY nº 13

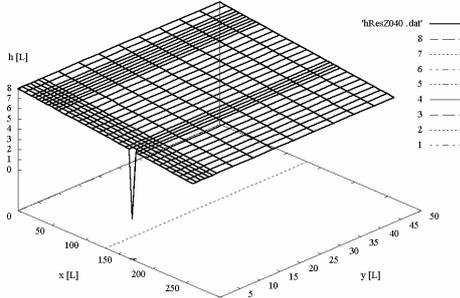


Fig. 3. Distribución inicial del potencial matricial.

Distribución bidimensional del contenido de humedad en el plano XZ nº 1

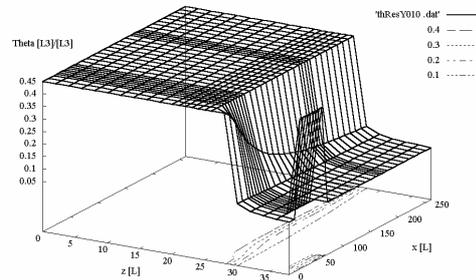


Fig. 6. Distribución inicial del contenido de humedad.

Distribución bidimensional de la presión capilar en el plano XY nº 13

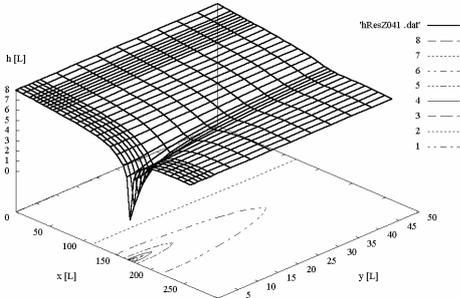


Fig. 4. Distribución del potencial matricial en $t = 0.25$ días.

Distribución bidimensional del contenido de humedad en el plano XZ nº 1

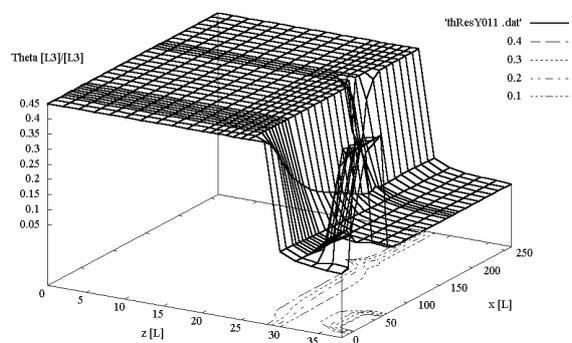


Fig. 7. Distribución del contenido de humedad $t = 0.25$ días.

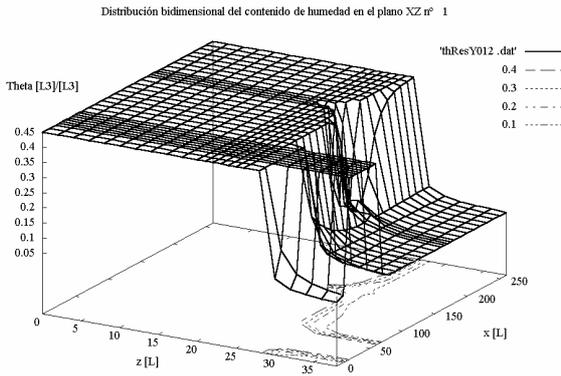


Fig. 8. Distribución del contenido de humedad en $t = 1.50$ días.

Desde una sólida fundamentación teórica basada en la formulación variacional del problema en estudio, se han discutido los métodos numéricos adoptados en su resolución, junto con los modelos considerados para las propiedades hidráulicas del suelo y las funciones de absorción radicular. Finalmente, se ha puesto de manifiesto el potencial de cálculo de la aplicación, a través de un ejemplo práctico sobre un dominio tridimensional de simulación.

Agradecimientos. El autor quisiera agradecer el interés mostrado en el presente proyecto por los profesores Javier Casali y José Javier López, del Dpto. de Proyectos e Ingeniería Rural de la Universidad Pública de Navarra, así como el apoyo constante de Juan Carlos Jorge, del Dpto. de Matemática e Informática de dicho centro. De un modo especial, agradece también a Uxua Urmeneta la ayuda prestada durante la elaboración del mismo.

Referencias

Carrera, J., G. Galarza y A. Medina, 1989. TRACONF, Programa de elementos finitos para la solución de las ecuaciones de flujo y transporte en acuíferos confinados, E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos, Universitat Politècnica de Catalunya.

Celia, M. A., E. T. Bouloutas y R. L. Zarba, 1990. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation, *Water Resour. Res.*, 26 (7), 1483-1496.

Feddes, R. A., S. P. Neuman y E. Bresler, 1975. Finite element analysis of two-dimensional flow in soils considering water uptake by roots: I. Theory, *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 39 (2), 224-230.

Feddes, R. A., P. Kabat, P. J. T. Van Bakel, J. J. B. Bronswijk y J. Halbertsma, 1988. Modelling soil water dynamics in the unsaturated zone - State of the art, *J. Hydrol.*, 100, 69-111.

Fipps, G. y R. W. Skaggs, 1986. Drains as a boundary condition in finite elements, *Water Resour. Res.*, 22 (11), 1613-1621.

Hopmans, J. W. y J. N. M. Stricker, 1989. Stochastic analysis of soil water regime in a watershed, *J. Hydrol.*, 105, 57-84.

Huang, K., B. P. Mohanty y M. Th. van Genuchten, 1996. A new convergence criterion for the modified Picard iteration method to solve the variably saturated flow equation, *J. Hydrol.*, 178, 69-91.

Kelley, C. T., C. T. Miller y M. D. Tocci, 1996. Method of lines solution of Richards' equation, North Carolina State University, Center for Research in Scientific Computing.

Kutilek, M. y D. R. Nielsen, 1994. Soil Hydrology, Catena Verlag.

Li, C. W., 1993. A simplified Newton iteration method with linear finite elements for transient unsaturated flow, *Water Resour. Res.*, 29 (4), 965-971.

McCord, J. T., 1991. Application of second-type boundaries in unsaturated flow modeling, *Water Resour. Res.*, 27(12), 3257-3260.

Miller, C. T., G. A. Williams, C. T., Kelley y M. D. Tocci, 1998. Robust solution of Richards' equation for nonuniform porous media, *Water Resour. Res.*, 34 (10), 2599-2610.

Milly, P. C. D., 1985. A mass-conservative procedure for time-stepping in models of unsaturated flow, *Adv. Water Resour.*, 8 (3), 32-36.

Neuman, S. P., 1975. Galerkin approach to saturated-unsaturated flow in porous media, *Finite elements in fluids*, Vol. I, Viscous flow and hydrodynamics, 201-217, Wiley-Interscience.

Paniconi, C., A. A. Aldama y E. F. Wood, 1991. Numerical evaluation of iterative and noniterative methods for the solution of the nonlinear Richards' equation, *Water Resour. Res.*, 27 (6), 1147-1163.

Šimůnek, J., J. W. Hopmans, J. A. Vrugt y M. T. van Wijk, 2001. One-, two- and three-dimensional root water uptake functions for transient modeling, *Water Resour. Res.*, 37 (10), 2457-2470.

Tocci, M. D., C. T. Kelley y C. T. Miller, 1997. Accurate and economical solution of the pressure head form of Richards' equation by the method of lines, *Adv. Water Resour.*, 20 (1), 1-14.

Tocci, M. D., C. T. Kelley, C. T. Miller y C. E. Kees, 1998. Inexact Newton methods and the method of lines for solving Richards' equation in two space dimensions, *Computational Geosciences*, 2 (4), 291-310.

Vogel, T., M. Císlarová y J. W. Hopmans, 1991. Porous media with linearly variable hydraulic properties, *Water Resour. Res.*, 27 (10), 2735-2741.