

UN MÉTODO DE PASOS FRACCIONARIOS PARA LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUJOS EN LA ZONA NO SATURADA DEL SUELO

A. Arrarás y J.C. Jorge

Departamento de Matemática e Informática, Universidad Pública de Navarra, Edificio Las Encinas, Campus de Arrosadía s/n, 31006 Pamplona; andres.arraras@unavarra.es, jcjorge@unavarra.es

RESUMEN. El presente artículo desarrolla un algoritmo numérico eficiente para la simulación de flujos isoterms tridimensionales, gobernados por la ley de Darcy, a través de medios porosos homogéneos e isotropos. Dicho método resulta de la aplicación de dos procedimientos sucesivos. En primer lugar, se plantea una discretización temporal mediante una técnica de pasos fraccionarios modificada, que permite descomponer el problema parabólico original en una sucesión de problemas elípticos unidimensionales. A continuación, el esquema resultante es combinado con una aproximación espacial por diferencias finitas, obteniendo así el modelo totalmente discreto utilizado en la simulación. Los sistemas no lineales de ecuaciones algebraicas se resuelven con una técnica iterativa de tipo cuasi-Newton, que permite preservar la propiedad de conservatividad de masa. El algoritmo propuesto, de tipo direcciones alternadas, reduce la complejidad computacional del proceso resolutivo y permite una fácil implementación para el cálculo paralelo.

ABSTRACT. We develop an efficient numerical algorithm for simulating three-dimensional isothermal Darcian flows through isotropic and homogeneous porous media. Such method is obtained by means of two consecutive procedures. Firstly, a modified fractionary implicit Euler method is used to discretize the time variable, decomposing the original problem in three families of nonlinear one-dimensional elliptic problems. Then, this three-level scheme is combined with a finite difference spatial discretization in order to deduce the numerical algorithm. The nonlinear systems of algebraic equations are solved with a quasi-Newton iteration technique, which can be shown to possess the conservative property. The proposed alternating-direction method reduces drastically the computational cost of the resolution process, allowing a natural implementation in parallel devices with maximum speed-up.

1. Introducción

El estudio macroscópico de los medios porosos constituye una base esencial para la comprensión de los diversos fenómenos que tienen lugar en el subsuelo. Dado que éste representa una parte integral del ciclo hidrológico, destaca entre ellos el relativo al flujo de agua en su seno. Dicho fenómeno, responsable del transporte de calor y de solutos, define además 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 diversos del medio natural (Feddes et al. 1975 y 1988; Lisbona et al. 1998; Pinder y Gray, 1977).

Considerando un medio poroso de naturaleza homogénea e isotropa, la dinámica de un fluido a través del mismo, en condiciones variables de saturación, se halla modelizada por la ecuación de Richards (Arrarás, 2003; Celia et al. 1990). Sea Ω un dominio de flujo tridimensional limitado por la frontera $\partial\Omega \equiv \Gamma$ y denotemos por $J = [0, T]$ al intervalo temporal. La ecuación de Richards, en ese caso, puede escribirse como

$$\frac{\partial\theta(\psi)}{\partial t} = \nabla \cdot [K(\psi) \nabla\psi(\mathbf{x}, t)] + \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} - S(\psi), \quad (1)$$

bajo la condición inicial

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_0(\mathbf{x}) \quad (2)$$

y con las condiciones de contorno

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_D(\mathbf{x}, t), \quad (3)$$

$$- [K(\psi) (\nabla\psi(\mathbf{x}, t) + \nabla z)] \mathbf{n}_{\Gamma_N} = \sigma(\mathbf{x}, t), \quad (4)$$

donde la incógnita $\psi \equiv \psi(\mathbf{x}, t)$ [L] es el potencial matricial ($\mathbf{x} \equiv (x, y, z) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, $t \in J$), $\theta(\psi)$ [$L^3 L^{-3}$] representa el contenido de humedad volumétrico, $K(\psi)$ [LT^{-1}] (con $K(\psi) \geq K_0 > 0$) denota la conductividad hidráulica no saturada y $S(\psi)$ [T^{-1}] es un término fuente/sumidero (por

ejemplo, la función de absorción radicular en perfiles de suelos, véase Šimůnek et al. 2001). En las ecuaciones (3) y (4), $\mathbf{x} \in \Gamma_D$ y Γ_N , respectivamente (superficies de contorno de tipo Dirichlet y Neumann, que verifican $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$), y \mathbf{n}_{Γ_N} es el vector unitario normal a Γ_N . Las relaciones constitutivas $\theta(\psi)$, $K(\psi)$ y $S(\psi)$ están definidas por un conjunto de funciones no lineales obtenidas heurísticamente, que determinan la naturaleza fuertemente no lineal de la ecuación de Richards (véase Feddes et al. 1988; Paniconi et al. 1991, para una descripción detallada de las mismas).

En el presente trabajo se desarrolla un método numérico eficiente que resuelve la ecuación (1). En particular, la sección siguiente describe el esquema de pasos fraccionarios utilizado en la semidiscretización temporal, que se combina en el epígrafe 3 con una aproximación espacial por diferencias finitas para deducir el método. Por último, en la sección 4 se presentan los resultados numéricos correspondientes a la simulación de un proceso de lixiviación hacia un acuífero libre con un pozo de bombeo.

2. Descripción del esquema de pasos fraccionarios

Supongamos que se desea obtener una aproximación a la solución de la ecuación de Richards (1) en los instantes de tiempo $0 = t_1 < \dots < t_S = T$ y sea $\Delta t^j = t^{j+1} - t^j$ el tamaño de paso correspondiente al nivel j -ésimo (donde el índice $j = 1, \dots, S-1$).

Inicialmente, reescribimos la ecuación de Richards de la forma siguiente:

$$\frac{\partial \theta(\psi)}{\partial t} = \mathcal{A}_1(\psi) + \mathcal{A}_2(\psi) + \mathcal{A}_3(\psi) - S(\psi), \quad (5)$$

donde, omitiendo ciertas relaciones funcionales por conveniencia,

$$\mathcal{A}_1(\psi) = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z} \quad (6)$$

es la parte del operador diferencial que describe el proceso de infiltración vertical (efecto del potencial matricial en la dirección z y fenómeno de transporte debido al campo gravitatorio) y

$$\mathcal{A}_2(\psi) = \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial y} \right), \quad \mathcal{A}_3(\psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (7)$$

pueden considerarse como los términos que definen el proceso de infiltración que tiene lugar en las respectivas dimensiones del plano horizontal (efecto del potencial matricial en las direcciones y y x , respectivamente).

A partir de un valor inicial $\psi_0(\mathbf{x})$ dado por la ecuación (2), consideramos en primer lugar un método de pasos fraccionarios para discretizar la variable temporal y obtener una aproximación $\psi^{j+1}(\mathbf{x})$ a la variable de estado $\psi(\mathbf{x})$,

en el instante de tiempo $(j+1)$ -ésimo. Dicha técnica descompone el problema parabólico original en tres familias de problemas elípticos unidimensionales no lineales, generalizando la semidiscretización en tiempo utilizada por Lisbona et al. (1998) para resolver problemas bidimensionales de esta naturaleza. Sea un dominio de flujo $\Omega = [0, a] \times [0, b] \times [0, c]$, sobre el que se aplica el siguiente procedimiento en tres etapas:

1. Dado $\psi^j(\mathbf{x})$, definimos $\tilde{\psi}^{j+1}(\mathbf{x})$ como la solución de la ecuación biparamétrica (con parámetros x, y)

$$\tilde{\theta}^{j+1} - \theta^j = \Delta t^j \{ \mathcal{A}_1[\tilde{\psi}^{j+1}(\bar{x}, \bar{y}, z)] - S(\psi^j) \}, \quad (8)$$

$\forall (\bar{x}, \bar{y}) \in [0, a] \times [0, b], z \in (0, c)$, que además satisface las correspondientes condiciones de contorno (3) ó (4) en los extremos $(\bar{x}, \bar{y}, 0)$ y (\bar{x}, \bar{y}, c) , respectivamente, para un valor $t = t^{j+1}$.

2. A continuación, a partir del nuevo estado ficticio $\tilde{\psi}^{j+1}(\mathbf{x})$ obtenido en la etapa previa como predicción del potencial matricial en el instante t^{j+1} , calculamos $\hat{\psi}^{j+1}(\mathbf{x})$ como la solución de

$$\hat{\theta}^{j+1} - \tilde{\theta}^{j+1} = \Delta t^j \mathcal{A}_2[\hat{\psi}^{j+1}(\bar{x}, y, \bar{z})], \quad (9)$$

$\forall (\bar{x}, \bar{z}) \in [0, a] \times [0, c], y \in (0, b)$, con las condiciones de contorno específicas en $(\bar{x}, 0, \bar{z})$ y (\bar{x}, b, \bar{z}) , evaluadas en $t = t^{j+1}$.

3. Finalmente, partiendo del valor $\hat{\psi}^{j+1}(\mathbf{x})$, obtenemos la aproximación $\psi^{j+1}(\mathbf{x})$ como solución de

$$\theta^{j+1} - \hat{\theta}^{j+1} = \Delta t^j \mathcal{A}_3[\psi^{j+1}(x, \bar{y}, \bar{z})], \quad (10)$$

$\forall (\bar{y}, \bar{z}) \in [0, b] \times [0, c], x \in (0, a)$, teniendo en cuenta de nuevo las condiciones de contorno adecuadas en los puntos $(0, \bar{y}, \bar{z})$ y (a, \bar{y}, \bar{z}) , con $t = t^{j+1}$.

Nótese que el término fuente/sumidero S de la ecuación (8) se encuentra evaluado en el instante de tiempo anterior, con el fin de incrementar la velocidad de convergencia del proceso iterativo indicado en la sección siguiente (Arraras, 2003). Por este motivo, el procedimiento de discretización temporal descrito puede considerarse como una modificación del método de pasos fraccionarios clásico (también llamado por algunos autores Euler implícito fraccionario).

3. Obtención del algoritmo numérico

Para la construcción del modelo totalmente discreto, utilizamos el método de diferencias finitas como aproximación de las derivadas con respecto a las variables espaciales. Según describen Arraras y Jorge (2005), denotando los valores de la solución discreta ψ_h en la forma $\psi_{i,m,n} = \psi_h(x_i, y_m, z_n) \simeq \psi(x_i, y_m, z_n)$ y aplicando la discretización por diferencias centrales a la ecuación (8), obtenemos un conjunto de sistemas no lineales de la forma:

$$\frac{\tilde{\theta}_n^{j+1} - \theta_n^j}{\Delta t^j} = \frac{1}{\overline{\Delta z_n}} \left(\tilde{K}_{n+1/2}^{j+1} \frac{\tilde{\psi}_{n+1}^{j+1} - \tilde{\psi}_n^{j+1}}{\Delta z_n} - \tilde{K}_{n-1/2}^{j+1} \frac{\tilde{\psi}_n^{j+1} - \tilde{\psi}_{n-1}^{j+1}}{\Delta z_{n-1}} \right) + \frac{\tilde{K}_{n+1/2}^{j+1} - \tilde{K}_{n-1/2}^{j+1}}{\overline{\Delta z_n}} - S_n^j, \quad (11)$$

para $n = 2, \dots, N_z - 1$, donde se han omitido los subíndices l y m por claridad, con

$$\overline{\Delta z_n} = \frac{z_{n+1} - z_{n-1}}{2}, \quad \Delta z_n = z_{n+1} - z_n, \quad \tilde{K}_{n+1/2}^{j+1} = \frac{\tilde{K}_{n+1}^{j+1} + \tilde{K}_n^{j+1}}{2}.$$

El conjunto de ecuaciones (11) debe completarse con las expresiones para los valores extremos $n = 1, N_z$, que dependen de las correspondientes condiciones de contorno en $z = 0$ y $z = c$.

Análogamente, de la discretización de (9) y (10) resultan los sistemas

$$\frac{\tilde{\theta}_m^{j+1} - \tilde{\theta}_m^{j+1}}{\Delta t^j} = \frac{1}{\overline{\Delta y_m}} \left(\tilde{K}_{m+1/2}^{j+1} \frac{\tilde{\psi}_{m+1}^{j+1} - \tilde{\psi}_m^{j+1}}{\Delta y_m} - \tilde{K}_{m-1/2}^{j+1} \frac{\tilde{\psi}_m^{j+1} - \tilde{\psi}_{m-1}^{j+1}}{\Delta y_{m-1}} \right) \quad (12)$$

$$\frac{\theta_l^{j+1} - \tilde{\theta}_l^{j+1}}{\Delta t^j} = \frac{1}{\overline{\Delta x_l}} \left(K_{l+1/2}^{j+1} \frac{\psi_{l+1}^{j+1} - \psi_l^{j+1}}{\Delta x_l} - K_{l-1/2}^{j+1} \frac{\psi_l^{j+1} - \psi_{l-1}^{j+1}}{\Delta x_{l-1}} \right), \quad (13)$$

$$\mathbf{A}_z^{j+1,k} \tilde{\psi}^{j+1,k+1} = \mathbf{b}_z^{j+1,k}, \quad (14)$$

con $m = 2, \dots, N_y - 1$ y $l = 2, \dots, N_x - 1$, respectivamente, junto con las ecuaciones relativas a los valores en que $m = 1, N_y$ y $l = 1, N_x$, que provienen de la discretización de las condiciones de contorno respectivas en $y = 0$, $y = b$ y $x = 0$, $x = a$.

Dada la naturaleza no lineal de las expresiones (11), (12) y (13), es necesario aplicar un proceso iterativo que permita obtener las aproximaciones numéricas en cada etapa. Tal como se detalla en Arraras y Jorge (2005), el método hace uso de una técnica resolutoria de tipo cuasi-Newton (denominada por los autores iteración de Picard modificada) que consigue disminuir el coste computacional por iteración, además de preservar la propiedad de conservatividad de masa del sistema (Celia et al. 1990; Li, 1993; Paniconi et al. 1991).

Linealizando los sistemas indicados en (11), obtenemos una ecuación de iteración matricial que puede expresarse en la forma:

$$\begin{aligned} -\frac{\tilde{K}_{n-1/2}^{j+1,k}}{\Delta z_{n-1}} \tilde{\psi}_{n-1}^{j+1,k+1} + \left(\frac{\overline{\Delta z_n}}{\Delta t^j} \tilde{C}_n^{j+1,k} + \frac{\tilde{K}_{n+1/2}^{j+1,k}}{\Delta z_n} + \frac{\tilde{K}_{n-1/2}^{j+1,k}}{\Delta z_{n-1}} \right) \tilde{\psi}_n^{j+1,k+1} - \frac{\tilde{K}_{n+1/2}^{j+1,k}}{\Delta z_n} \tilde{\psi}_{n+1}^{j+1,k+1} = \\ = \frac{\overline{\Delta z_n}}{\Delta t^j} \tilde{C}_n^{j+1,k} \tilde{\psi}_n^{j+1,k} - \frac{\overline{\Delta z_n}}{\Delta t^j} (\tilde{\theta}_n^{j+1,k} - \theta_n^j) + \left(\tilde{K}_{n+1/2}^{j+1,k} - \tilde{K}_{n-1/2}^{j+1,k} \right) - \overline{\Delta z_n} S_n^j, \end{aligned} \quad (15)$$

con $n = 2, \dots, N_z - 1$, junto con las dos ecuaciones para $n = 1, N_z$, que representan las condiciones de contorno discretizadas.

4. Simulación de un proceso de lixiviación

El ensayo numérico descrito a continuación estudia el proceso de lixiviación que tiene lugar desde una fuente de contaminante hacia un acuífero libre en el que existe un

pozo de bombeo. La geometría del sistema puede observarse en las vistas en planta y sección de la Fig. 1, que definen un dominio $\Omega = [0, 260] \times [-50, 50] \times [0, 38]$ (con las dimensiones expresadas en metros).

donde \mathbf{A} es una matriz tridiagonal simétrica, $\tilde{\psi}$ constituye el vector de incógnitas y \mathbf{b} representa el término independiente. En cada paso k del bucle iterativo, los sistemas de ecuaciones algebraicas linealizadas son resueltos por eliminación gaussiana. De forma análoga, se obtienen sistemas similares en las direcciones y y x , que incluyen los respectivos vectores de incógnitas $\tilde{\psi}$ y ψ .

Finalmente, definiendo la capacidad específica del agua como $C = d\theta/d\psi [L^{-1}]$, es posible reescribir los sistemas de la ecuación (14) en forma expandida como un conjunto de subsistemas lineales desacoplados (uno para cada valor de los índices de posición l y m):

La Fig. 2, por su parte, muestra las relaciones funcionales $\theta(\psi)$ y $K(\psi)$ utilizadas en la simulación, cuyos parámetros hidráulicos corresponden a un medio poroso de textura gruesa.

Inicialmente, el nivel freático desciende desde una altura de 28 m sobre la base del acuífero en su margen izquierda, hasta los 26 m en la margen derecha del mismo (véase Fig. 1). En estas condiciones, se asumen valores de $\psi+z = 28$ y $\psi+z = 26$, como restricciones de frontera para los laterales $x = 0$ y $x = 260$, respectivamente ($y \in [-50, 50]$). El proceso de lixiviación comienza en el instante en que la superficie del acuífero desciende hasta una altura de 20 m,

en el punto en que se encuentra ubicado el pozo de bombeo ($x = 170, y = 0$). En consecuencia, dicho punto queda caracterizado por un valor de $\psi+z = 20$ a lo largo de la vertical bajo el nivel freático ($z \leq 20$), suponiendo la existencia de una línea de filtración por encima del mismo ($z > 20$). Por último, se considera una condición de saturación constante ($\psi = 0$) en el depósito de contaminante, asumiendo condiciones de flujo nulo para el resto de superficies de contorno.

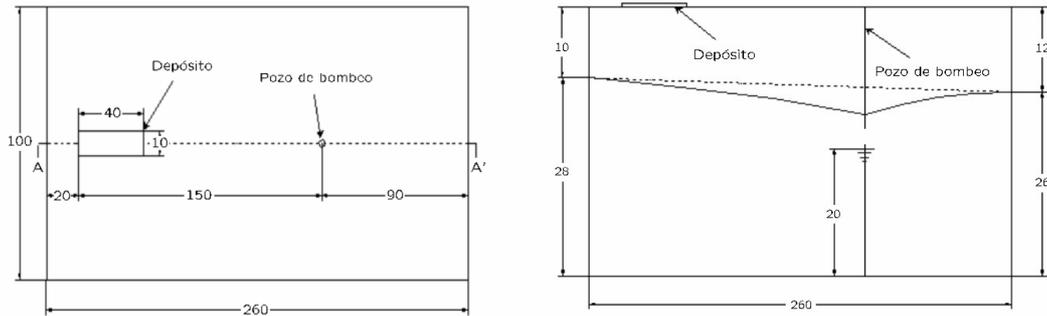


Fig. 1. Vistas en planta y sección del dominio de flujo (las dimensiones vienen expresadas en metros).

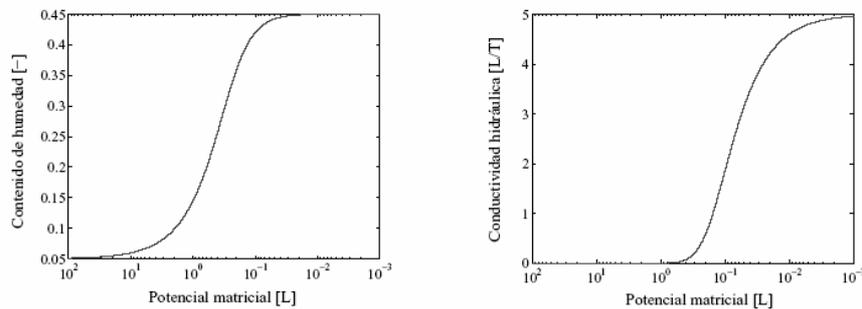


Fig. 2. Relaciones constitutivas del contenido de humedad (izda.) y de la conductividad hidráulica (dcha.) con respecto al potencial matricial.

Los resultados del modelo numérico aparecen representados en las Figs. 3, 4 y 5. Nótese que, dada la simetría del sistema en torno al eje y , sólo se ha considerado una mitad del dominio de flujo al realizar la simulación. En primer lugar, la Fig. 3 describe la evolución de la variable ψ en el plano horizontal $\zeta=20$. Partiendo de una distribución inicial constante, el potencial matricial experimenta un crecimiento progresivo a la altura del depósito, que degenera longitudinalmente en la formación de un cono de depresión en torno al pozo de bombeo. Este proceso revela el establecimiento de un flujo variable entre ambos dispositivos hasta que se alcanza el estado

estacionario. Por su parte, en la Fig. 4 se detalla la evolución de la variable θ en el plano del depósito, donde $\psi = 0$. En este caso, la representación por isolíneas de humedad muestra en fases sucesivas el fenómeno de avance del frente hacia la posición del nivel freático. Finalmente, la configuración del campo de velocidades que se puede observar en la Fig. 5 refleja el movimiento que, siguiendo las líneas de corriente, describe el fluido en dirección al pozo. Según los resultados de la simulación, el flujo alcanza el estado estacionario unos 40 días después del inicio de la misma.

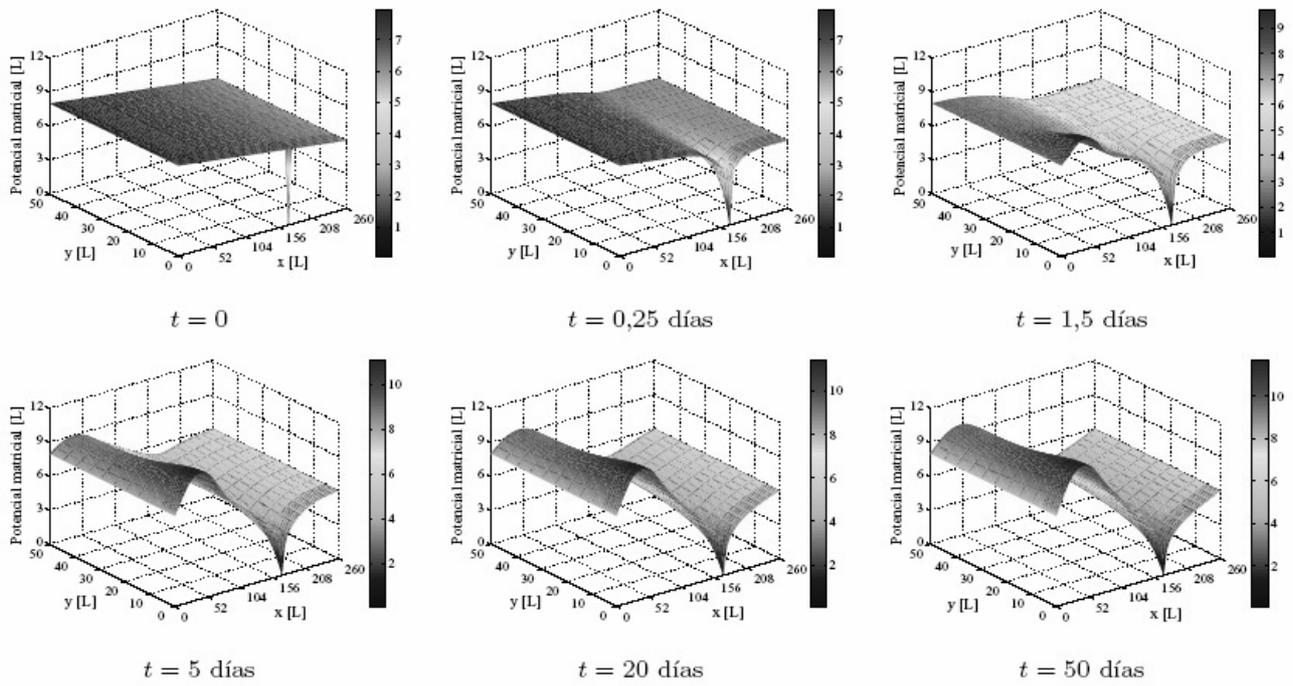


Fig. 3. Evolución del potencial matricial en el plano $\zeta=20$.

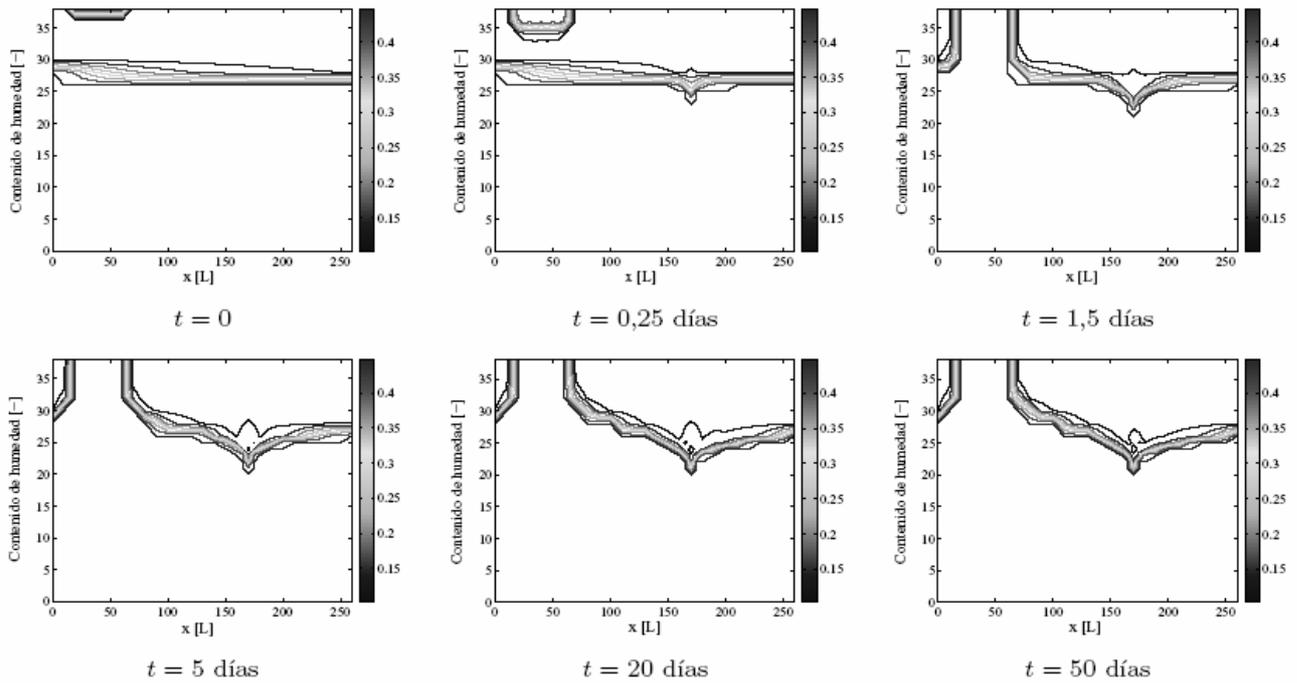


Fig. 4. Evolución del contenido de humedad en el plano $\psi = 0$.

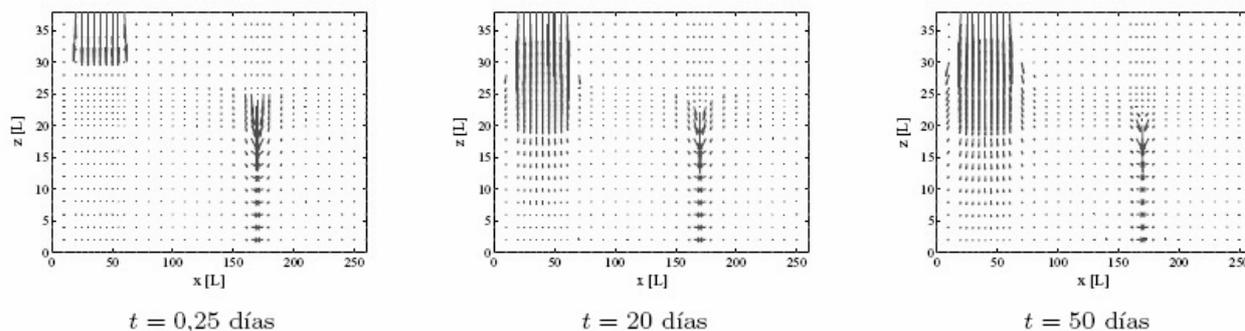


Fig. 5. Evolución del campo vectorial de velocidades en el plano $\psi = 0$.

5. Conclusiones

Se ha realizado la exposición formal de un algoritmo numérico para la simulación de flujos tridimensionales en medios porosos de saturación variable. Por razones de eficiencia computacional, el método plantea una discretización del modelo con una técnica de descomposición del operador de tipo pasos fraccionarios. Dicho esquema permite reducir la integración del problema tridimensional de partida a tres familias de problemas de flujo estacionario unidimensionales en las direcciones x , y y z , alternativamente. La posterior aproximación espacial de cada una de estas familias resulta en un modelo totalmente discreto, que ya puede ser utilizado como herramienta de simulación.

En el desarrollo matemático presentado, se deduce que la combinación del esquema de discretización con la técnica de resolución iterativa da lugar a un conjunto de sistemas lineales tridiagonales, que han de ser resueltos para obtener la solución numérica final. Esta propiedad específica del método contrasta con la estructura típica de banda de los sistemas que aparecen en los métodos implícitos clásicos, lo cual supone una drástica reducción del coste computacional asociado al proceso resolutivo y permite su implementación natural en dispositivos de cálculo paralelo.

Agradecimientos. Este trabajo se ha llevado a cabo en el marco del Programa de Formación de Profesorado Universitario del Ministerio de Educación y Ciencia, Ref. AP2003-2621.

Referencias

- Arrarás, A. 2003. Hydrofem: un modelo tridimensional para la simulación del flujo de agua en medios porosos de saturación variable. Actas de las VI Jornadas sobre Investigación de la Zona No Saturada del Suelo ZNS-03, J. Álvarez-Benedí y P. Marinero (Eds.), Valladolid, España, 271-278 pp.
- Arrarás, A. y J.C. Jorge. 2005. An alternating-direction finite difference method for three-dimensional flow in unsaturated porous media, Proc. of the 10th International Conference on Mathematical Modelling and Analysis and the 2nd International Conference on Computational Methods in Applied Mathematics, R. Čiegis y A. Štikonas (Eds.), Trakai, Lituania (en revisión).
- 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 pp.
- 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 pp.
- 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 pp.
- Li, C.W. 1993. A simplified Newton iteration method with linear finite elements for transient unsaturated flow, *Water Resour. Res.*, 29 (4), 965-971 pp.
- Lisbona, F., G. Aguilar, C. Clavero y J.L. Gracia. 1998. Modelización y simulación de barreras capilares, Publ. Téc. ENRESA 08/98.
- 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 pp.
- Pinder, G.F. y W.G. Gray. 1977. Finite element simulation in surface and subsurface hydrology, Academic Press, Inc.
- 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 pp.