

## APROXIMACIÓN EN DIFERENCIAS FINITAS A LA ECUACIÓN DE RICHARDS PARA TRANSPORTE DE AGUA EN SUELOS NO SATURADOS

**José L. Martínez, Carlos E. Schvezov y Mario R. Rosenberger**

*Instituto de Materiales de Misiones (IMAM), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales (FCEQyN), Universidad Nacional de Misiones (UNaM), Félix de Azara 1552, 3300 Posadas, Misiones, Argentina, martinez.otros@gmail.com, <http://www.fceqyn.unam.edu.ar>*

**Palabras Clave:** Transporte de agua, Suelo, Medios porosos, Ecuación de Richards, Diferencias finitas.

**Resumen.** Se desarrolló y validó un modelo matemático unidimensional para simular el flujo vertical del agua en suelo no saturado. El modelo utiliza la ecuación diferencial parcial de Richards que gobierna el movimiento del agua en suelo, expresada en términos del potencial matricial (capacidad de absorción de agua) como función de la profundidad y el tiempo. Debido a la dificultad de obtener solución analítica de esta ecuación, los métodos numéricos aparecen como la herramienta más eficiente. En la aproximación de la ecuación de Richards se utilizó el método de diferencias finitas, imponiendo condiciones de contorno de Dirichlet en suelo isotrópico y sin pendiente. El dominio fue dividido uniformemente y se emplearon cinco mallas diferentes con la siguiente cantidad de nodos: 31, 61, 121, 181 y 241. Los pasos de tiempo utilizados fueron de 1, 5, 10, 20, 30, 50 y 100 s. La aproximación se basó en un esquema modificado del método Crank-Nicolson; además, dentro de cada paso de tiempo se incorporó un proceso iterativo de refinamiento del potencial matricial, que finaliza cuando se cumple la condición de tolerancia impuesta de  $10^{-9}$ . Se analizaron los resultados a dos tiempos de simulación: 3 y 24 h para obtener el perfil de potencial matricial. El primero se usó para verificar convergencia y estabilidad; el segundo para comparar con resultados de la literatura. Se encontró que la aproximación realizada es convergente, estable y muestra equivalencia con los resultados de la literatura prediciendo la posición del frente húmedo con una exactitud mayor al 1 % y prediciendo los valores de la humedad en la posición del frente húmedo con un error menor al 40% y menor al 0,1 % en las demás posiciones calculadas. Estos valores de error en la posición y humedad del frente húmedo son significativamente menores que los calculados a partir de los valores encontrados en la literatura.

## 1 INTRODUCCIÓN

El estudio de la contaminación del suelo es relativamente reciente, el mayor esfuerzo estaba concentrado en el estudio de la contaminación del agua y aire, debido a que la contaminación es más evidente que en el suelo. Lamentablemente, esta nueva orientación en la investigación científica surge luego de comprobar que el uso indiscriminado de agroquímicos estaba afectando el suelo y consecuentemente la producción alimenticia (Fontúrbel et al. 2004). Los investigadores observan que los agroquímicos ingresan al suelo bajo dos formas principales: solución acuosa y de granulados aplicados directamente al suelo. Algunos estudios realizados demuestran que entre el 40% y 90% de la contaminación del agua superficial en campos agrícolas es debido a la manipulación de agroquímico, por ejemplo, derrames en las operaciones de llenado y enjuague de limpieza de equipos de pulverización, creando un alto riesgo de contaminación del suelo (De Wilde et al. 2009). También, se ha visto que los agroquímicos aplicados de forma intensiva en el suelo pueden, a través de un proceso de lixiviación, contaminar aguas subterráneas (Keesstra et al. 2012).

Desgraciadamente, las técnicas de remediación son consideradas caras por el empresariado y, por lo tanto, poco implementadas; en algunos casos la remediación es aplicada en posiciones y tiempo incorrectos debido a la falta de conocimiento sobre la distribución espacial de agroquímico (Favero et al. 2007). Buscando mejorar la toma de decisiones al momento de la remediación ambiental, se ha incrementado el uso de modelos matemáticos del transporte de agroquímicos en el suelo (Aparicio et al. 2011). La toma de decisión también puede basarse de experimentos de laboratorio o de campo, pero las mismas se limitan al estudio de un número reducido de escenarios factibles. Además, sumado a la injustificable contaminación voluntaria del suelo que esto implica, los altos costos y gran cantidad de tiempo que insumen estos ejercicios, lo hacen inviable. En cambio, un modelo matemático permite predecir y calcular la movilidad del agroquímico en el suelo en diferentes escenarios medioambientales (Zhang et al. 2003).

El suelo puede ser dividido verticalmente en dos grandes zonas (ver Figura 1) en función de la proporción en que el espacio vacío del suelo (poros) se encuentra lleno de agua, siendo zona saturada cuando todo el espacio vacío está lleno de agua y zona no saturada (también llamado, zona parcialmente saturada, zona de aireación o zona vadoza) cuando una parte del espacio vacío tiene agua y el resto está ocupado por aire (sistema trifásico compuesto por sólidos, líquidos y gases) (Bear et al. 2010).

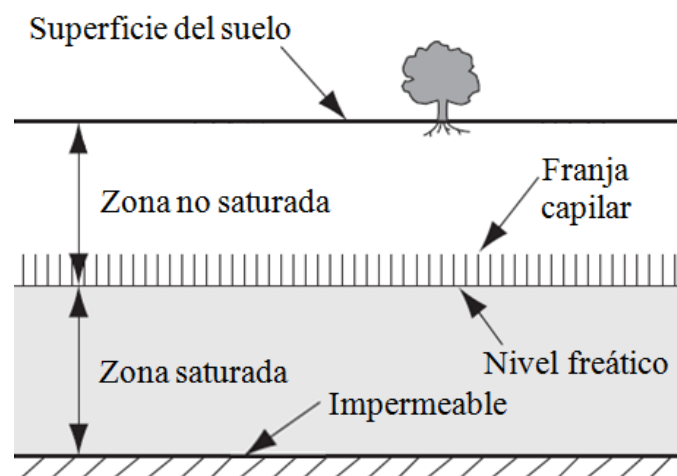


Figura 1: Representación esquemática de las zonas del suelo

Por mucho tiempo, los suelos saturados fueron estudiados ampliamente, debido a su implicancia crítica en ciertas obras de infraestructura y a la forma simple que toman los modelos para explicar su comportamiento, quedando relegado el estudio de suelos no saturados por la falta de interés y a lo complejo de los modelos necesarios para su estudio (Celia et al. 1990). Actualmente, considerando que gran parte de la actividad industrial se encuentra ubicada donde predominan suelos no saturados, es necesario avanzar en nuevos estudios de modelación matemática para entender su comportamiento (Alfaro et al. 2008). El primer paso para predecir y calcular la movilidad del agroquímico en suelo no saturado, es modelar el movimiento del agua en suelo.

En este trabajo, el modelo matemático para el movimiento del agua en suelo, se construye a partir de la ecuación general del movimiento del agua en suelo; esta ecuación diferencial parcial es conocida con el nombre de Ecuación de Richards (Harter et al. 2011). La Ecuación de Richards expresa la variación del contenido de agua en función del tiempo y de la posición. El contenido de agua puede ser expresado como humedad volumétrica  $\theta$  o como potencial matricial  $\psi$ , donde la relación entre ellos está dada por la Ec. (2). En este trabajo se utiliza potencial matricial ya que permite obtener una solución continua en la transición del régimen no saturado al saturado (Caviedes et al. 2013).

La Ecuación de Richards se resuelve numéricamente utilizando el Método de Diferencias Finitas y el modelo matemático desarrollado se valida en base a datos experimentales y otros modelos disponibles en la literatura.

## 2 MODELO MATEMÁTICO Y ECUACIONES DE GOBIERNO

La Ecuación de Richards en términos de potencial matricial con coordenada vertical que crece hacia arriba (Wendland et al. 2010), puede ser expresada unidimensionalmente como:

$$C_{(\psi)} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_{(\psi)} \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (1)$$

Donde  $C_{(\psi)} = \partial \theta / \partial \psi$  es la capacidad específica del suelo [ $L^{-1}$ ],  $\theta$  es la humedad volumétrica [ $L^3 L^{-3}$ ],  $\psi$  es el potencial matricial [ $L$ ],  $K_{(\psi)}$  es la conductividad hidráulica [ $LT^{-1}$ ],  $t$  es el tiempo [ $T$ ], y  $z$  es la coordenada vertical [ $L$ ].

Las condiciones iniciales y de contorno (condiciones de Dirichlet) utilizadas para la resolución de la Ec. (1) son:  $\psi(z, 0) = \psi^{inicial}(z)$ ;  $\psi(0, t) = \psi_0$  y  $\psi(-L, t) = \psi_L$ ,  $-L \leq z \leq 0$ .

Para la resolución de la Ecuación de Richards es necesario especificar las relaciones constitutivas. En este trabajo se utilizan las ecuaciones de Mualem –van Genuchten (Caviedes et al. 2013):

$$\theta_{(\psi)} = \begin{cases} \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\alpha|\psi|)^q)^m} + \theta_r & \psi \leq 0 \\ \theta_s & \psi > 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (3)$$

$$K_{(\psi)} = \begin{cases} K_s S_e^{0.5} \left[ 1 - \left( 1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^2 \right] & \psi \leq 0 \\ K_s & \psi > 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$C_{(\psi)} = \begin{cases} = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} = -mq\alpha^q \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + \alpha^q |\psi|^q)^{m+1}} |\psi|^q \psi^{-1} & \psi \leq 0 \\ 0 & \psi > 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$m = 1 - \frac{1}{q} \quad (6)$$

Donde  $\theta_{(\psi)}$  es la humedad volumétrica [ $L^3L^{-3}$ ],  $\theta_r$  es el contenido de humedad residual [ $L^3L^{-3}$ ],  $\theta_s$  es el contenido de humedad saturada [ $L^3L^{-3}$ ],  $K_s$  es la conductividad hidráulica saturada [ $LT^{-1}$ ],  $\alpha$  [ $L^{-1}$ ],  $m$  y  $q$  son parámetros de ajuste característicos de cada tipo de suelo.

### 3 MODELO NUMÉRICO

Para resolver numéricamente la Ec. (1) se utilizó un esquema de diferencias finitas implícito basado en un método de Crank-Nicolson modificado (Romano et al. 1998).

El perfil del suelo fue discretizado en partes iguales de espesor  $\Delta z$  identificados por los nodos  $i$ , y un paso de tiempo variable  $\Delta t$  identificados por los superíndices  $l$  (ver Figura 2).

$$C_{(\psi_i^l)} \frac{\psi_i^{l+1} - \psi_i^l}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[ \begin{array}{l} K_{(\psi_{i+\frac{1}{2}}^l)} \left( \frac{\psi_{i+1}^{l+1} - \psi_i^{l+1}}{2\Delta z} + \frac{\psi_{i+1}^l - \psi_i^l}{2\Delta z} + 1 \right) + \\ -K_{(\psi_{i-\frac{1}{2}}^l)} \left( \frac{\psi_i^{l+1} - \psi_{i-1}^{l+1}}{2\Delta z} + \frac{\psi_i^l - \psi_{i-1}^l}{2\Delta z} + 1 \right) \end{array} \right] \quad (7)$$

Donde los subíndices  $i \pm 1$ ,  $i$ , y  $i \pm 1/2$  se refieren a la profundidad del suelo  $z \pm \Delta z$ ,  $z$ ,  $z \pm \Delta z/2$ , respectivamente.

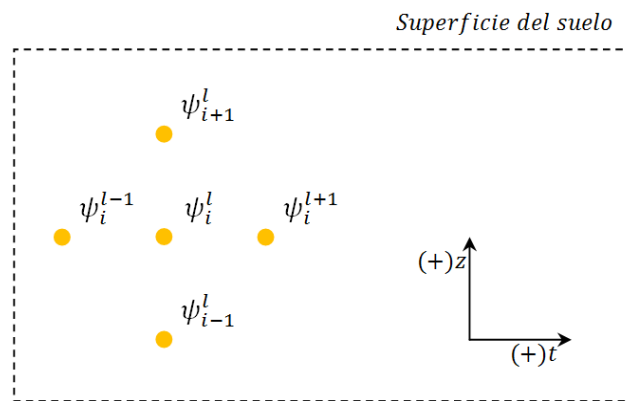


Figura 2: Discretización del dominio

Reordenando la Ec. (7) se tiene la siguiente relación general para nodo interior:

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} K_{(\psi_{i-1/2}^l)} \psi_{i-1}^{l+1} + \left[ \frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} \left( K_{(\psi_{i+1/2}^l)} + K_{(\psi_{i-1/2}^l)} \right) + 1 \right] \psi_i^{l+1} + \\ & -\frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} K_{(\psi_{i+1/2}^l)} \psi_{i+1}^{l+1} = +\frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} 2\Delta z \left( K_{(\psi_{i+1/2}^l)} - K_{(\psi_{i-1/2}^l)} \right) + \frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} K_{(\psi_{i-1/2}^l)} \psi_{i-1}^l + (8) \\ & - \left[ \frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} \left( K_{(\psi_{i+1/2}^l)} + K_{(\psi_{i-1/2}^l)} \right) - 1 \right] \psi_i^l + \frac{\Delta t}{c_{(\psi_i^l)} 2\Delta z^2} K_{(\psi_{i+1/2}^l)} \psi_{i+1}^l \end{aligned}$$

Las ecuaciones para cada nodo de contorno (Dirichlet) son:

$$\psi_n^{l+1} = \text{Valor fijo del contorno superior (ccs)} \quad (9)$$

$$\psi_1^{l+1} = \text{Valor fijo del contorno inferior (cci)} \quad (10)$$

Con las ecuaciones (8), (9) y (10) se obtiene un sistema tridiagonal de ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -a_{n-1}c_{n-1} & a_{n-1}d_{n-1} + 1 & -a_{n-1}b_{n-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & -a_i c_i & a_i d_i + 1 & -a_i b_i & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & -a_2 c_2 & a_2 d_2 + 1 & -a_2 b_2 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \psi_n^{l+1} \\ \psi_{n-1}^{l+1} \\ \vdots \\ \psi_i^{l+1} \\ \vdots \\ \psi_2^{l+1} \\ \psi_1^{l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{ccs} \\ +a_{n-1}2\Delta z e_{n-1} + a_{n-1}c_{n-1}\psi_{n-2}^l - (a_{n-1}d_{n-1} - 1)\psi_{n-1}^l + a_{n-1}b_{n-1}\psi_n^l \\ \vdots \\ +a_i2\Delta z e_i + a_i c_i \psi_{n-3}^l - (a_i d_i - 1)\psi_{n-2}^l + a_i b_i \psi_{n-1}^l \\ \vdots \\ +a_22\Delta z e_2 + a_2 c_2 \psi_1^l - (a_2 d_2 - 1)\psi_2^l + a_2 b_2 \psi_3^l \\ \text{cci} \end{bmatrix}$$

Donde:

$$a = \frac{\Delta t}{c(\psi_i^l)2\Delta z^2} \tag{11}$$

$$b = K(\psi_{i+1/2}^l) \tag{12}$$

$$c = K(\psi_{i-1/2}^l) \tag{13}$$

$$d = K(\psi_{i+1/2}^l) + K(\psi_{i-1/2}^l) \tag{14}$$

$$e = K(\psi_{i+1/2}^l) - K(\psi_{i-1/2}^l) \tag{15}$$

Sobre el sistema de ecuaciones mencionado anteriormente se aplica el siguiente esquema de predictor/corrector:

$$[A_i^l] * [\psi_i^{l+1}] = [B_i^l] \tag{16}$$

$$[A_i^{l+1}] * [\psi_i^{(l+1)}] = [B_i^{l+1}] \tag{17}$$

⋮

$$[A_i^{(l+1)^{r-1}}] * [\psi_i^{(l+1)^r}] = [B_i^{(l+1)^{r-1}}] \tag{18}$$

En la etapa de predicción (Ec. (16)), las matrices  $[A_i^l]$  y  $[B_i^l]$  se resuelven con valores de potencial matricial en tiempo presente,  $\psi_i^l$ , obteniendo una solución en tiempo inmediato superior  $[\psi_i^{l+1}]$ . Esta solución ingresa nuevamente al sistema de ecuaciones para dar comienzo a la etapa de corrección (Ec. (17)), donde las matrices  $[A_i^{l+1}]$  y  $[B_i^{l+1}]$  se resuelven utilizando valores de potencial matricial en el tiempo inmediato superior  $\psi_i^{l+1}$ . Este proceso de corrección se realiza  $r$  veces (Ec. (18)) hasta cumplir con el criterio de tolerancia impuesto:

$$\frac{\psi_i^{(l+1)^r} - \psi_i^{(l+1)^{r-1}}}{\psi_i^{(l+1)^r}} < 10^{-9} \tag{19}$$

#### 4 IMPLEMENTACIÓN Y APLICACIONES

Para la implementación del modelo desarrollado, se creó un código computacional propio utilizando el software Wolfram Mathematica 8.0. Las simulaciones fueron calculadas en una computadora con procesador Intel® Core™ i3-2310 CPU@2.10GHz y 4 GB de memoria RAM.

El modelo fue aplicado para simular dos tipos de suelo extraídos de la literatura y que se describen a continuación.

La primera aplicación (Wendland et al. 2010; Celia et al. 1990) considera los siguientes parámetros del suelo para las ecuaciones de Mualem–van Genuchten:  $\alpha = 3,35 \text{ m}^{-1}$ ;  $q = 2$ ;  $K_s = 9,22 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ ;  $\theta_s = 0,368 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ ; y  $\theta_r = 0,102 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ . La profundidad de la muestra de suelo es de 1 m y las condiciones iniciales y de contorno son:  $\psi(z, t = 0) = -10 \text{ m}$ ,  $-1 \leq z \leq 0$ ;  $\psi(z = 0, t) = -0,75 \text{ m}$ ;  $t > 0$  y  $\psi(z = -1, t) = -10 \text{ m}$ ;  $t > 0$ . Representa un caso de infiltración de agua en una columna de suelo homogéneo, inicialmente seco.

Una segunda aplicación de la literatura (Wendland et al. 2010) tiene los siguientes parámetros del suelo:  $\alpha = 4,49 \text{ m}^{-1}$ ;  $q = 3,6732$ ;  $K_s = 1,515 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ ;  $\theta_s = 0,443 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ ; y  $\theta_r = 0 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ . La profundidad del experimento es de 0,70 m y las condiciones iniciales y de contorno son:  $\psi(z, t = 0) = -0,686524 \text{ m}$ ;  $-0,70 \leq z \leq 0$ ;  $\psi(z = 0, t) = -0,062476 \text{ m}$ ;  $t > 0$  y  $\psi(z = -1, t) = -0,686524 \text{ m}$ ;  $t > 0$ . Además, esta aplicación posee valores experimentales recogidos por Miranda et al. (2005) para las mismas condiciones de contorno y dimensiones del dominio.

#### 5 CONVERGENCIA DEL MODELO

Se simuló la posición del frente húmedo para tres horas con datos de la primera aplicación. Se obtuvieron dos familias de curvas fijando  $\Delta t$  y  $\Delta z$  alternativamente. Primero, se fijó  $\Delta t = 20 \text{ s}$  para distintos valores de  $\Delta z$ : 3,33 cm; 1,66 cm; 0,83 cm; 0,55 cm y 0,42 cm (ver Figura 3a). Luego, se fijó  $\Delta z = 1,66 \text{ cm}$  para distintos valores de  $\Delta t$ : 30 s, 20 s, 10 s, 5 s y 1 s (ver Figura 3b).

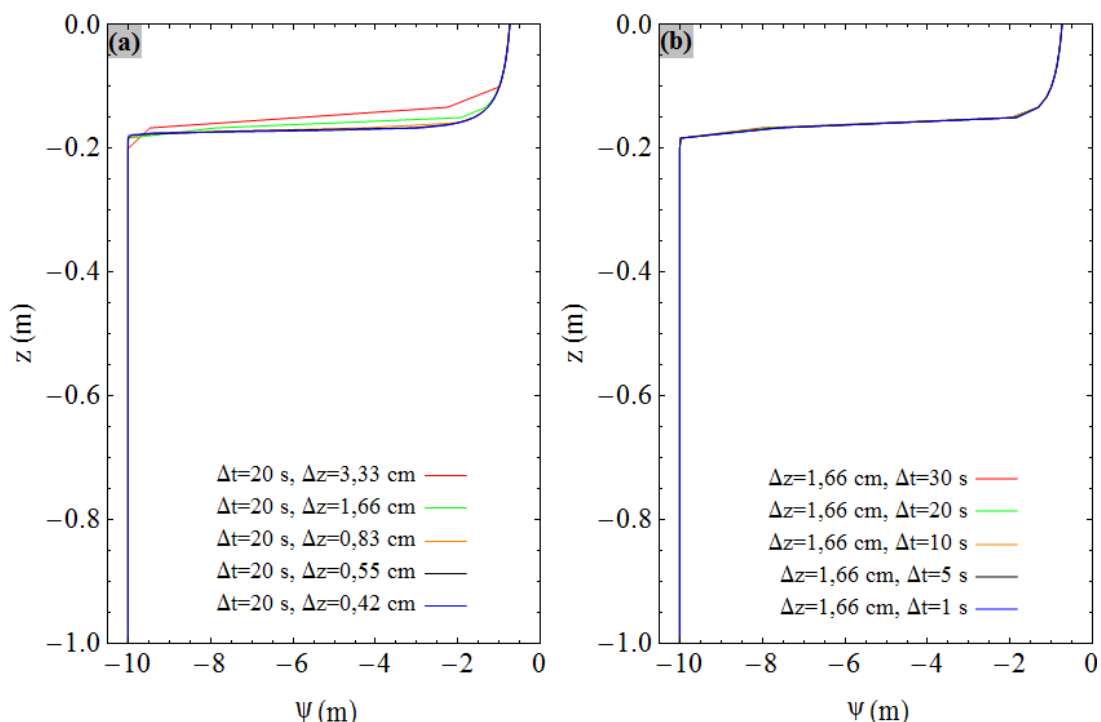


Figura 3: Posición del frente húmedo para tres horas con datos de la primera aplicación. (a)  $\Delta t = 20 \text{ s}$ . (b)  $\Delta z = 1,66 \text{ cm}$

Se observa que la forma del perfil de cantidad de agua es muy similar para los distintos valores de  $\Delta t$  y  $\Delta z$  utilizados, la mayor diferencia está en la zona de transición de potencial matricial alto a bajo, esta zona es conocida como zona de frente húmedo (ver Figura 3). La determinación precisa de la zona del frente húmedo y la cantidad de agua son relevantes para predecir el avance de los posibles contaminantes, por este motivo es la zona donde mayor énfasis se pone al momento de analizar la calidad del modelo.

Para  $\Delta t = 20$  s, se comparó el error relativo entre:  $\Delta z = 3,33$  cm y  $\Delta z = 1,66$  cm,  $\Delta z = 1,66$  cm y  $\Delta z = 0,83$  cm,  $\Delta z = 0,83$  cm y  $\Delta z = 0,55$  cm;  $\Delta z = 0,55$  cm y  $\Delta z = 0,42$  cm. Se observó que el error relativo es máximo en la zona de frente húmedo  $-0,20 \leq z \leq -0,10$  (ver Figura 4a). Aunque en la primera comparación el error relativo máximo aumenta, en las siguientes comparaciones tiene tendencia a disminuir (ver Figura 4b).

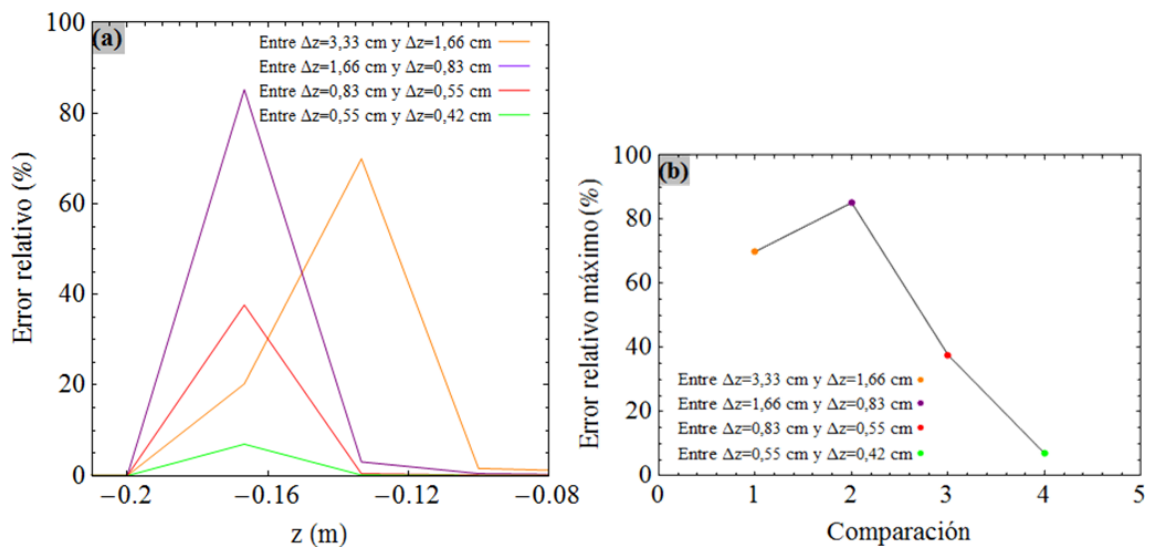


Figura 4: Comparación de error relativo para  $\Delta t = 20$  s. (a) Error relativo en la zona de frente húmedo. (b) Comparación del error relativo máximo

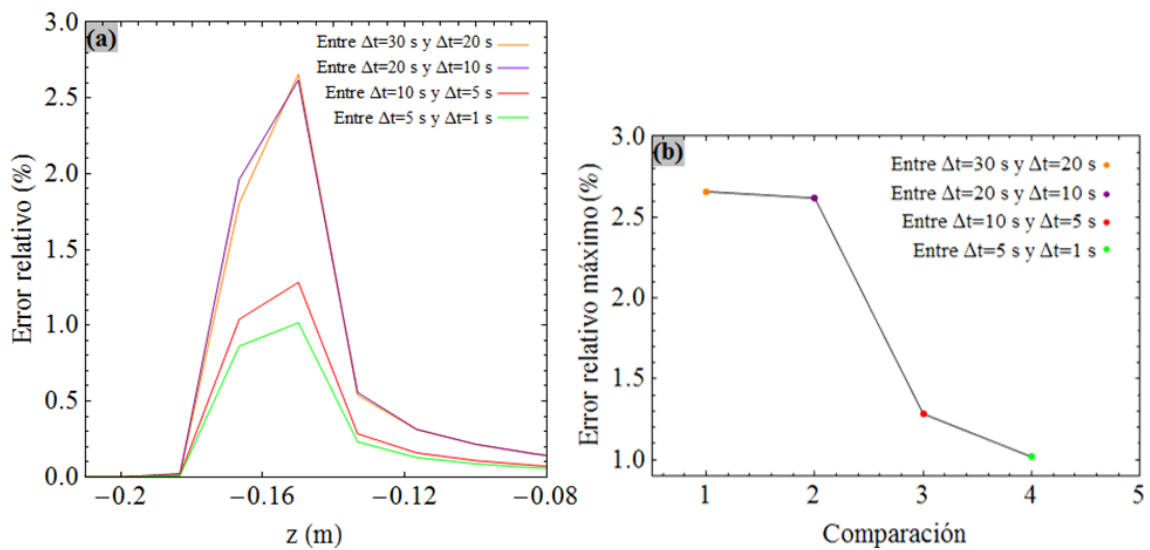


Figura 5: Comparación de error relativo para  $\Delta z = 1,66$  cm. (a) Error relativo en la zona de frente húmedo. (b) Comparación del error relativo máximo



Para  $\Delta z = 1,66$  cm, se comparó el error relativo entre:  $\Delta t = 30$  s y  $\Delta t = 20$  s,  $\Delta t = 20$  s y  $\Delta t = 10$  s,  $\Delta t = 10$  s y  $\Delta t = 5$  s;  $\Delta t = 5$  s y  $\Delta t = 1$  s. También, se observó que el error relativo es máximo en la zona de frente húmedo  $-0,20 \leq z \leq -0,10$  (ver Figura 5a). En este caso, se observó, que el error relativo siempre tiene tendencia a disminuir (ver Figura 5b).

Los resultados obtenidos permiten decir que el modelo matemático desarrollado es convergente, dado que el error relativo disminuye en sucesivas aproximaciones hacia los valores esperados. Los errores de las mallas más gruesas se pueden explicar debido a la poca precisión espacial que se tiene en esos casos, de ahí los mayores errores encontrados en las comparaciones, esto no ocurrió en el caso del análisis de la influencia de  $\Delta t$ .

## 6 VALIDACIÓN DEL MODELO

Se simuló el perfil de cantidad de agua y se encontró la posición del frente húmedo para 24 horas usando los parámetros de la primera aplicación.

Se obtuvieron las curvas para tres casos: i)  $\Delta t = 50$  s y  $\Delta z = 1,66$  cm; ii)  $\Delta t = 50$  s y  $\Delta z = 0,83$  cm; iii)  $\Delta t = 5$  s y  $\Delta z = 0,42$  cm y se comparó con los resultados de los modelos obtenidos por Celia et al. (1990) (ver Figura 6a). Se observó el menor error relativo para el caso iii, siendo elegido para el modelo propuesto (ver Figura 6b).

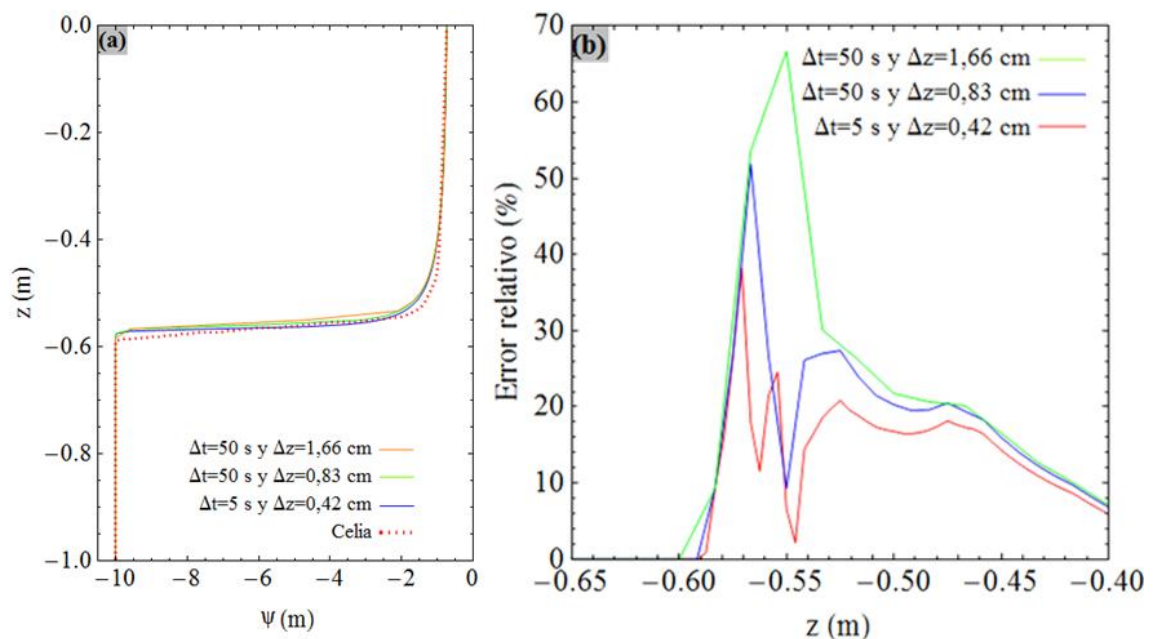


Figura 6: Perfil de cantidad de agua para 24 horas con datos de la primera aplicación. (a) Curvas para tres casos de comparación y resultados obtenidos por Celia et al. (1990). (b) Comparación del error relativo

El perfil de cantidad de agua para  $\Delta t = 5$  s y  $\Delta z = 0,42$  cm se comparó con resultados obtenidos por Celia et al. (1990) (ver Figura 7a) y con resultados obtenidos por Wendland et al. (2010) (ver Figura 7b).

Se observó que el error relativo en la comparación del modelo propuesto con el modelo de Celia et al. (1990) es menor que el error relativo obtenido al comparar con el modelo de Wendland et al. (2010). En ambos casos, el error relativo máximo se presentó en la zona del frente húmedo  $-0,60 \text{ m} \leq z \leq -0,50$  m (ver Figura 7c).



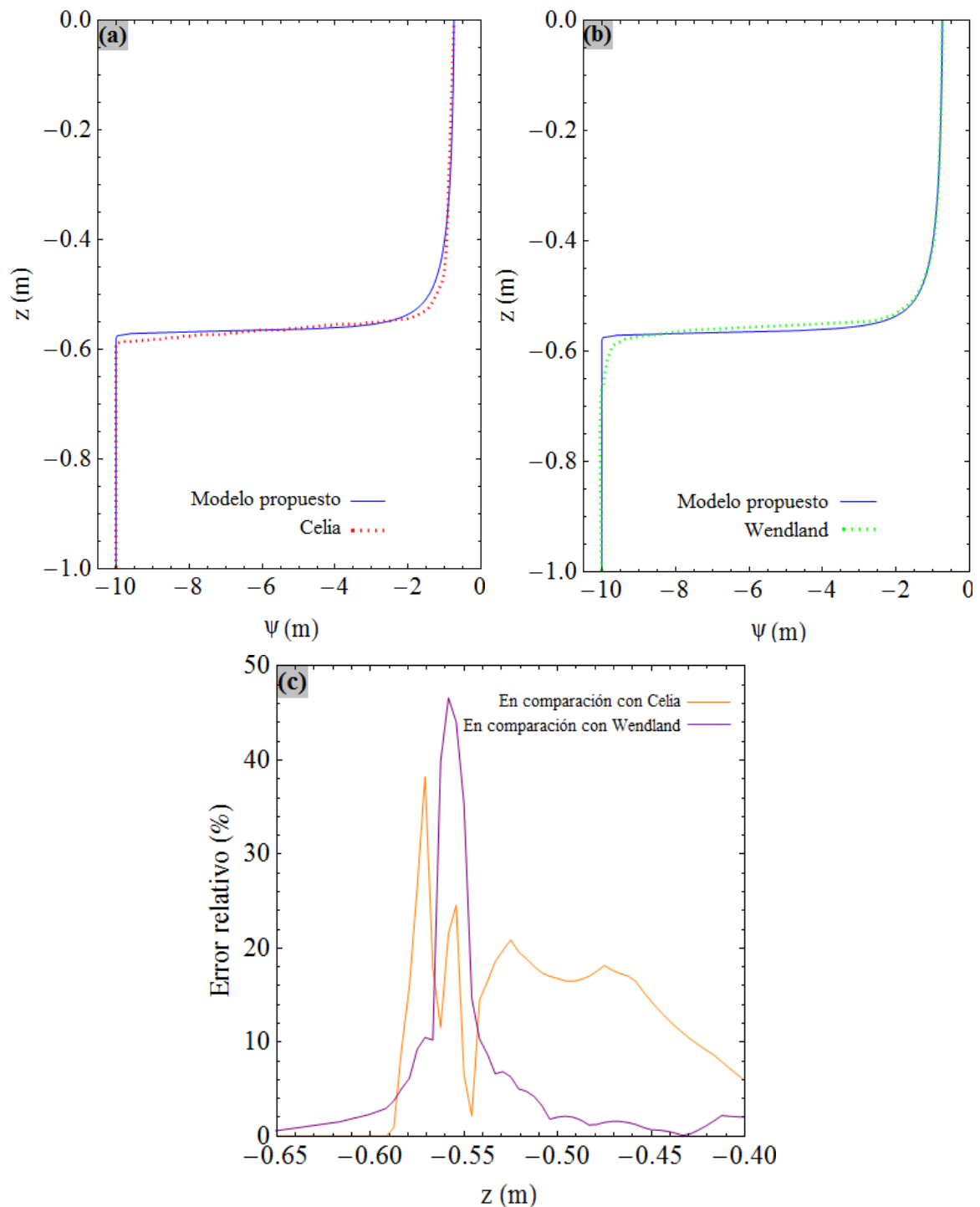


Figura 7: Perfil de cantidad de agua para 24 horas con datos de la primera aplicación ( $\Delta t = 5$  s y  $\Delta z = 0,42$  cm). Comparación con (a) Celia et al. (1990) y (b) Wendland et al. (2010). (c) Error relativo en la comparación con Celia et al. (1990) y Wendland et al. (2010).

También, se simuló utilizando los parámetros del suelo de la segunda aplicación, en este caso se obtuvo el perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación. Se obtuvo la familia de curvas fijando  $\Delta t = 1$  s para distintos valores de  $\Delta z$ : 0,58 cm, 0,38 cm, 0,29 cm, 0,23 cm, 0,19 cm y 0,17 cm. Se muestra en primer lugar la comparación con los resultados del modelo obtenido por Wendland et al. 2010 (ver Figura 8a), y luego con los valores experimentales obtenidos por Miranda et al. (2005)

(ver Figura 9). Se verificó que el error relativo máximo se produce en la zona de frente húmedo  $-0,345 \text{ m} \leq z \leq -0,335 \text{ m}$  (ver Figura 8b). También, se comprobó que el error relativo máximo disminuye conforme  $\Delta z$  es menor. Contrariamente, el tiempo de CPU en simulación decrece conforme  $\Delta z$  es mayor (ver Figura 8c).

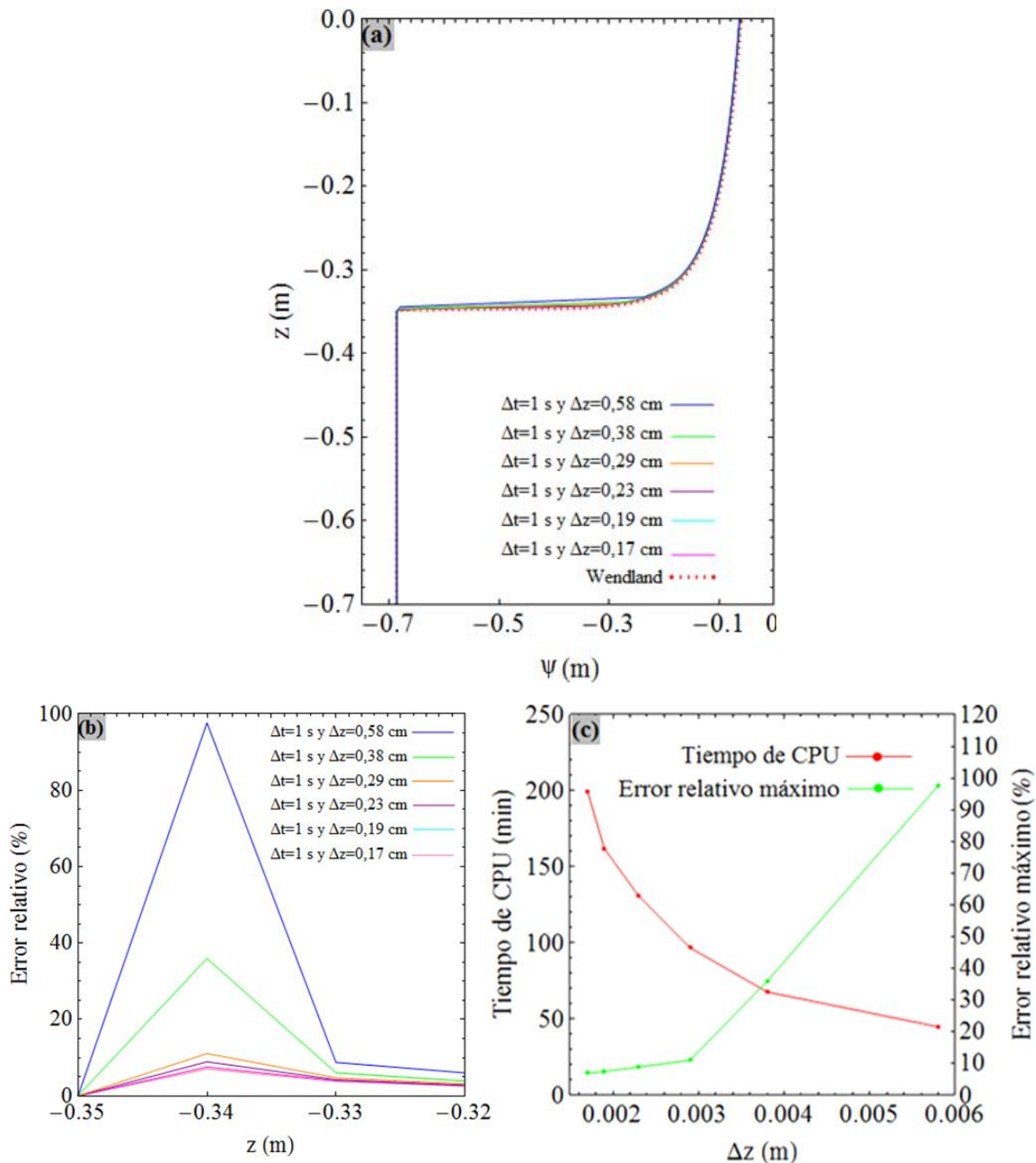


Figura 8: (a) Perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación ( $\Delta t = 1$  s para distintos valores de  $\Delta z$ ) (b) Error relativo máximo para distintos valores de  $\Delta z$ . (c) Tiempo de CPU y error relativo máximo para diferentes valores de  $\Delta z$

Se simuló el perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación. Utilizando  $\Delta t = 1$  s y  $\Delta z = 0,17$  cm se expresó la cantidad de agua de dos formas, una relaciona profundidad y potencial matricial (ver Figura 9a); y la otra, profundidad y humedad volumétrica (ver Figura 9b). Ambas se compararon con resultados experimentales de Miranda et al. (2005).

Al comparar los experimentos de Miranda et al. (2005) con la curva que relaciona profundidad y potencial matricial, se verificó que el error relativo tiene valores diferentes para cada experimento (ver Figura 10a). Al comparar con la curva que relaciona profundidad y humedad volumétrica, se observó valores similares entre los experimentos y mayores que los calculados con potencial matricial (ver Figura 10b). Ambos muestran el error relativo máximo en la región del frente húmedo  $-0,40 \text{ m} \leq z \leq -0,30 \text{ m}$ .

En la comparación anterior, se comprueba que los valores de error relativo pueden ser diferentes dependiendo si son calculados en términos de potencial matricial o humedad volumétrica. Por tanto, es necesario considerar este aspecto al momento de analizar errores y comparar modelos entre sí.

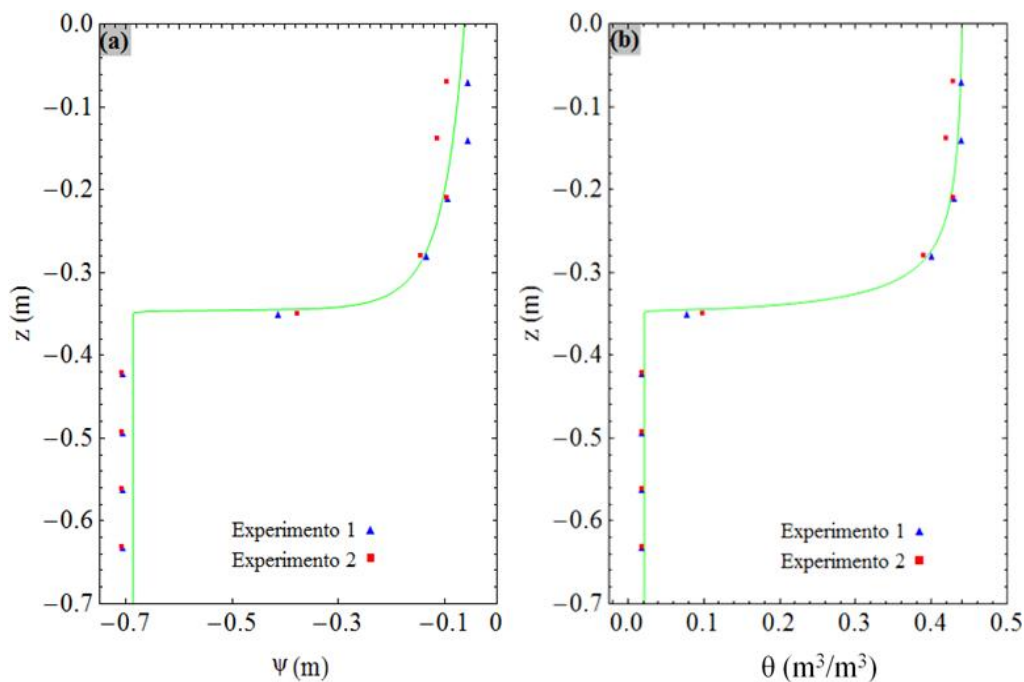


Figura 9: Perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación. (a) Curva que relaciona profundidad y potencial matricial. (b) Curva que relaciona profundidad y humedad volumétrica.

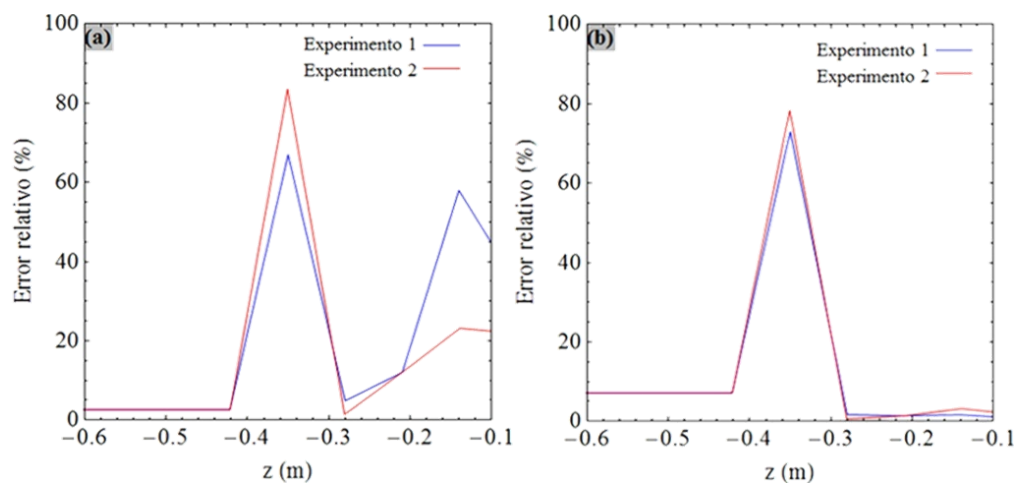


Figura 10: Comparación con resultados experimentales de Miranda et al. (2005). (a) Comparación con la curva que relaciona profundidad y potencial matricial. (b) Comparación con la curva que relaciona profundidad y humedad volumétrica.

A partir del perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación, utilizando  $\Delta t = 1$  s,  $\Delta z = 0,17$  cm, se implementó un procedimiento para promediar los resultados de la siguiente manera:

$$\psi_{i,n} = \frac{1}{(1+n)^2} \sum_{z=-n}^n (n+1-|z|) \psi_{i+z} \quad (20)$$

para  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  y para  $n \leq i \leq i_{max} - n$ , donde  $i = 0, 1, 2, 3, \dots, i_{max}$

En este promedio pesado del potencial matricial se dan mayor peso a los valores del potencial centrados en la posición  $i$ -ésima considerada, en cambio, para los valores de  $i$  cercanos a los contornos se conservan los valores sin promediar.

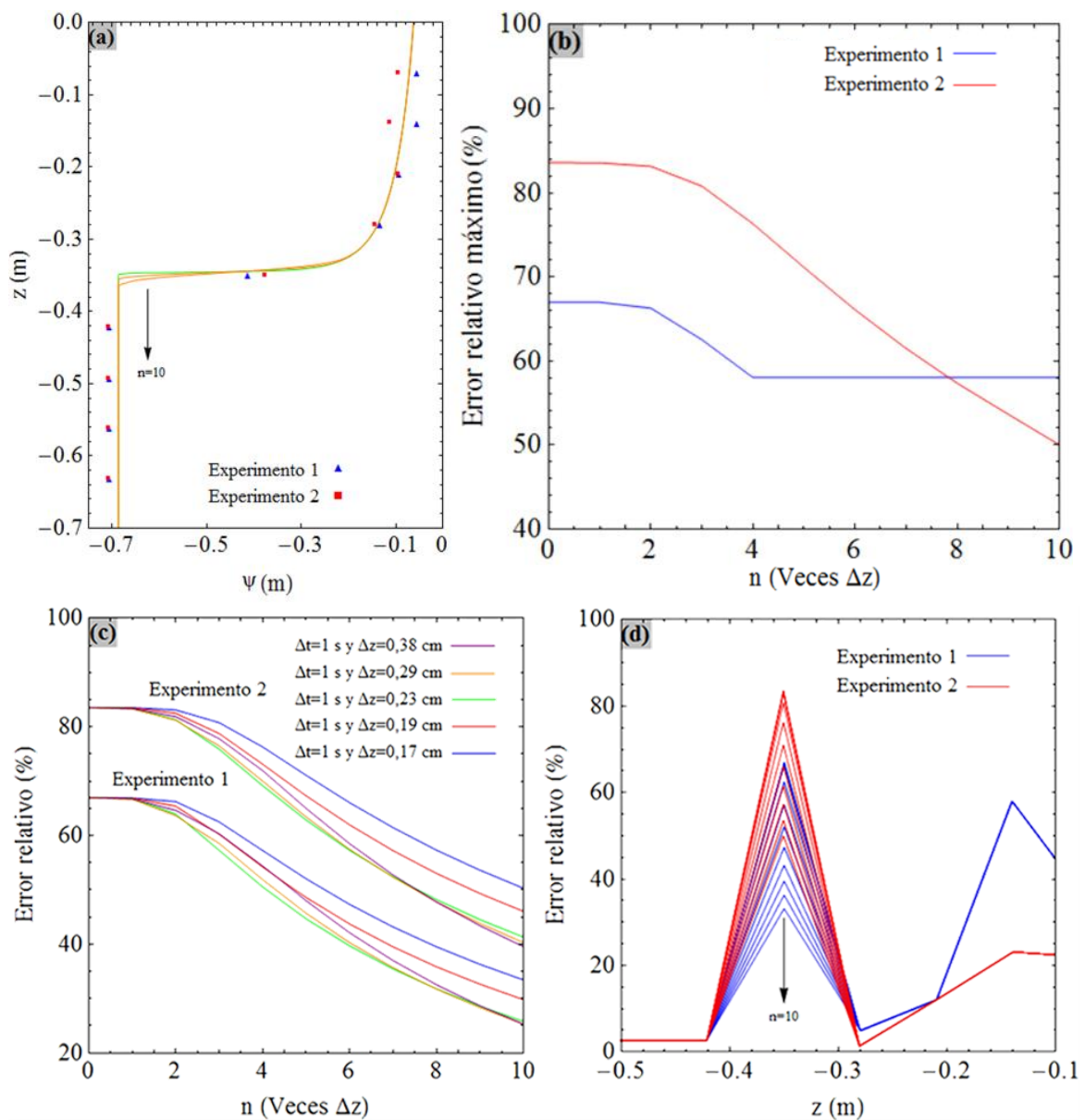


Figura 11: (a) Perfil de cantidad de agua para 1,75 horas con datos de la segunda aplicación, utilizando promedio pesado del potencial matricial. Comparación con dos de los resultados experimentales de Miranda et al. (2005): (b) toda la curva, (c) y (d) en zona de frente húmedo.

Se grafican los resultados del modelo promediado para tres valores de  $n$ : 0, 5 y 10, estos se comparan con los resultados experimentales de [Miranda et al. \(2005\)](#) (ver [Figura 11a](#)), se observó que el error relativo máximo contra uno de los experimentos siempre disminuye conforme aumenta  $n$ , en cambio, comparado con el otro, el error relativo máximo toma un valor mínimo a un cierto valor de  $n$  (ver [Figura 11b](#)).

Se observó que aislando la zona de frente húmedo  $-0,40 \text{ m} \leq z \leq -0,30 \text{ m}$ , para ambos experimentos, el error relativo máximo siempre disminuye al aumentar  $n$ . Se comprobó obteniendo las familias de curvas para ambos experimentos, fijando  $\Delta t = 1 \text{ s}$  para distintos valores de  $\Delta z$ : 0,58 cm, 0,38 cm, 0,29 cm, 0,23 cm, 0,19 cm; 0,17 cm (ver [Figura 11c y 11d](#)).

Se obtuvieron valores de productos de  $n$  por  $\Delta z$  para distintos errores relativos y distintos  $\Delta z$ . En ambos experimentos, se observó similitud en los valores de este producto para  $\Delta z$ : 0,23 cm, 0,19 cm y 0,17 cm (ver [Tabla 1](#)). Por lo tanto, puede ser considerado una forma de mejorar los modelos particularmente para la zona del frente húmedo. El valor de  $n$  por  $\Delta z$  podría estar relacionado con el tipo de suelo o con algún aspecto de tipo experimental al momento de tomar las muestras. Al respecto debe analizarse más para poder hacer una generalización más fuerte.

El mismo tipo de promedio ponderado se utilizó en la primera aplicación para una simulación de 24 horas, utilizando  $\Delta t = 5 \text{ s}$ ,  $\Delta z = 0,42 \text{ cm}$ . Al comparar con los resultados de [Celia et al. \(1990\)](#) y con [Wendland et al. \(2010\)](#), fuera (ver [Figura 12a](#)) y dentro (ver [Figura 12b](#)) de la zona de frente húmedo  $-0,58 \text{ m} \leq z \leq -0,52 \text{ m}$ , se observó el mismo comportamiento: (i) el error relativo máximo disminuye hasta cierto valor de  $n$  y luego aumenta, (ii) el error relativo máximo se presenta en distintas profundidades (ver [Figura 12c y 12d](#)). Comparando con los resultados de [Celia et al. \(1990\)](#) se verificó una situación opuesta en la zona  $-0,55 \text{ m} \leq z \leq -0,50 \text{ m}$ : el error relativo aumenta cuando aumenta valor de  $n$ .

El resultado obtenido es similar, en algunos aspectos, al obtenido con la segunda aplicación. La similitud se observa en que la diferencia con los valores de referencia (en este caso dos modelos) va disminuyendo a medida que aumenta  $n$ , hasta alcanzar un valor mínimo, y luego la diferencia (error) aumenta nuevamente.

(a)					
$\Delta z$ (cm)	Error relativo (%)				
	10	20	30	40	50
0,17	3	2,4	1,9	1,3	0,9
0,19	3,3	2,6	1,9	1,3	0,9
0,23	3,7	2,8	2	1,4	1
0,29	4,4	3,4	2,5	1,8	1,3
0,38	5,6	4,5	3,4	2,5	1,8

(b)					
$\Delta z$ (cm)	Error relativo (%)				
	10	20	30	40	50
0,17	3,7	3,2	2,7	2,2	1,7
0,19	4,1	3,5	2,9	2,3	1,7
0,23	4,6	3,9	3,1	2,4	1,8
0,29	5,5	4,6	3,8	2,9	2,2
0,38	6,9	5,9	4,9	3,8	2,9

Tabla 1: Valores de los productos de  $n$  por  $\Delta z$  (cm) para distintos errores relativos y distintos  $\Delta z$ . (a) Valores comparando con el experimento 1. (b) Valores comparando con el experimento 2.

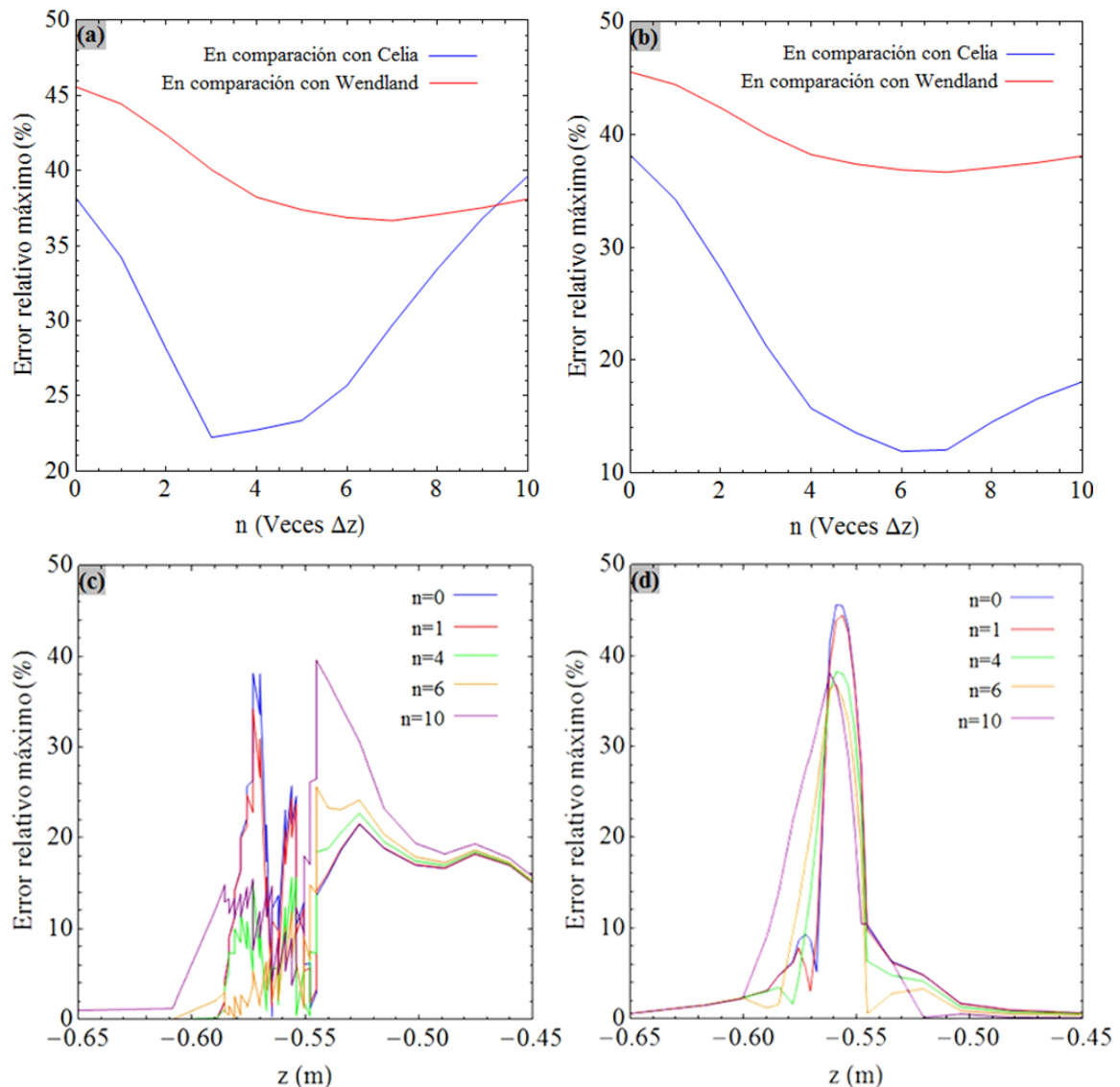


Figura 12: Comparación con los resultados de Celia et al. (1990) y con Wendland et al. (2010), fuera (a) y dentro (b) de la zona de frente húmedo. Distribución del error relativo (c) en comparación con Celia et al. (1990) y (d) en comparación con Wendland et al. (2010)

## 7 CONCLUSIONES

La resolución numérica de la Ecuación de Richards utilizando un esquema de diferencias finitas implícito basado en el método de Crank-Nicolson y aplicando un esquema de predictor/corrector, predice con buen desempeño el perfil del potencial matricial  $\psi$  (y su equivalente perfil de la humedad volumétrica  $\theta$ ) en la zona no saturada del suelo.

Los resultados obtenidos permiten decir que el modelo matemático desarrollado es convergente.

La solución obtenida con los datos de la primera y segunda aplicación presentan buena aproximación con los modelos propuesto por: Celia et al. (1990), Miranda et al. (2005) y Wendland et al. (2010). Siendo la zona de frente húmedo, el rango de profundidad con mayor error relativo. Es posible soluciones con menor el error relativo, cuando los cálculos se realizan con promedio pesado del potencial matricial empleando un determinado valor de veces  $\Delta z$ .



**REFERENCIAS**

- Alfaro M., Geotecnia en suelos no saturados. *Revista Academica Colomb. Cienc.*, 32:471-481, 2008.
- Aparicio, V., Costa, J. y Gimenez, D., Comparación de tres modelos de transporte para estimar la velocidad y dispersión de solutos con datos de Br - medidos a campo en un suelo argiudol del sudeste de la provincia de Buenos Aires, Argentina. *Actas de las X Jornadas de investigación de la zona no saturada del suelo, Salamanca (España), Estudios de la Zona no Saturada del Suelo*, 10:139-144, 2011.
- Bear, J. and Cheng, A., *Modeling groundwater flow and contaminant transport*. Springer, 2010.
- Caviedes D., García P., and Murillo J., Verification, conservation, stability and efficiency of a finite volume method for the 1D Richards equation. *Journal of Hydrology*, 480:69-84, 2013.
- Celia, M., Bouloutas, E., and Zarba R., A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water resources research*, 26:1483-1496, 1990.
- De Wilde, T., Mertens, J., Simunek, J., Sniegowksi, K., Ryckeboer, J., Jaeken, P., Springael, D. and Spanoghe, P., Characterizing pesticide sorption and degradation in microscale biopurification systems using column displacement experiments. *Environmental Pollution*, 157:463-473, 2009.
- Favero, J., Muniz, A. e Dos Santos, R., Análise teórico-experimental da dispersão de poluentes líquidos em solos. *Eng. Sanit. Ambient*, 12:410-416, 2007.
- Fontúrbel, F., Ibáñez, C., Palomeque, S., Salinas, T. y Galleguillos, F., *Descontaminación y tratamiento de contaminantes en suelos*. Publicaciones Integrales, 2004.
- Harter, T., Ginn, T., Onsoy, Y. and Botros, F., Richards equation - Based modeling to estimate flow and nitrate transport in a deep alluvial vadose zone. *Vadose Zone Journal*, 1-6, 2011.
- Keesstra, S., Geissen, V., Mosse, K., Piirainen, S., Scudiero, E., Leistra, M. and Schaik, L., Soil as a filter for groundwater quality. *Current Opinion in Environmental Sustainability*, 4:507-516, 2012.
- Miranda, J., 1, Duarte S., Libardi P., e Folegatti M., Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. *Eng. Agríc.*, 25:677-685, 2005.
- Romano, N., Brunone, B., and Santini, A., Numerical analysis of one dimensional unsaturated flow in layered soils. *Advances in Water Resources*, 21:315-324, 1998.
- Wendland, E., e Pizarro, M., Modelagem computacional do fluxo unidimensional de água em meio não saturado do solo. *Eng. Agríc.*, 30:424-434, 2010.
- Zhang, X. and Ren, L., Lattice Boltzmann model for agrochemical transport in soils. *Journal of Contaminant Hydrology*, 67:27-42, 2003.