

# ESTIMACIÓ DE LA PERMEABILITAT INTERNODAL PER A LA SIMULACIÓ NUMÈRICA DEL FLUX D'AIGUA EN UN SÒL NO SATURAT

## 2.1 INTRODUCCIÓ

Normalment la simulació del flux d'aigua en un sòl homogeni no saturat s'obté a partir de la solució de l'equació pel flux no saturat, equació de Richards [Richards, 1931]. Per poder solucionar aquesta equació, és necessari disposar de les funcions hidràuliques que descriuen la relació entre la pressió capil·lar del fluid, el contingut en aigua i la permeabilitat o conductivitat relativa. Dues de les expressions més populars escollides per descriure aquestes relacions hidràuliques són les proposades per *van Genuchten* [1980] i *Brooks i Corey* [1964], en endavant referenciades com VG i BC, respectivament.

Quan la resolució numèrica de l'equació de Richards es basa en la discretització del flux en tot el domini del sòl, es fa necessària l'estimació de la permeabilitat relativa entre volums de control adjacents. En molts casos l'estimació d'aquesta permeabilitat s'obté a partir de la mitjana aritmètica (AM) dels valors de

dues cel·les contigües [Haverkamp i Vauclin, 1979; Celia et al., 1990; Warrick, 1991; Zaidel i Russo, 1992]. L'ús de l'AM implica, però, una sobreestimació del valor de la permeabilitat internodal [Zaidel i Russo, 1992]. Una altra alternativa de càlcul usada freqüentment és la mitjana geomètrica (GM), mitjana que en determinades condicions condueix a resultats millors que no pas l'esquema de càlcul basat en l'AM [Schnabel i Richie, 1984].

Tot i que la literatura evidencia l'aparició d'altres esquemes de càlcul alternatius, en tots els casos els resultats obtinguts han tingut un èxit menor en comparació amb els esquemes basats en l'AM i GM. Aquests nous esquemes inclouen la mitjana harmònica del valor de la conductivitat, conductivitat corresponent a la mitjana aritmètica o harmònica de la càrrega matricial, conductivitat de la cel·la superior o la integració numèrica de la conductivitat [Haverkamp i Vauclin, 1979; Srivastava i Guzman-Guzman, 1995]. S'ha suggerit igualment el fet que, per un terra fixat, s'haurien d'usar diferents esquemes d'avitjanament per a les diferents contribucions gravitacionals i capil·lars al flux, depenent cadascuna d'aquestes contribucions de la distància entre els nodes [Baker, 1995]. Aquesta darrera observació permet explicar per què diferents autors, en avaluar el flux internodal en diferents tipus de sòl i per diferents espais entre nodes, han arribat a conclusions diverses respecte a quin és el millor esquema d'avitjanament possible.

El concepte d'aproximació a la mitjana darciana de Brooks i Corey fou introduït per Baker et al. [1999] com un algorisme per avaluar conductivitats efectives. Aquest tipus d'aproximació va demostrar ser útil per a la simulació del procés d'infiltració en un sòl descrit per les relacions hidràuliques de Haverkamp [1977]; tot i això, l'implementació d'aquest mètode resulta complexa i el seu comportament en altres sòls no ha estat encara avaluat. En un estudi anterior, Warrick [1991] va proposar un mètode senzill i efectiu per calcular conductivitats internodals. Agafant el cas d'un parell de pressions capil·lars corresponents a dos nodes adjacents, la conductivitat efectiva va ser calculada com la mitjana ponderada dels valors

corresponents a cadascun dels nodes adjacents, utilitzant valors dels pesos obtinguts prèviament a partir de la solució exacta del flux. La implementació numèrica d'aquest mètode implicava l'emmagatzematge en taules dels diferents pesos prèviament calculats, així com la seva interpolació quan fos necessari. Aquest procediment proporcionava una concordança excel·lent amb els valors obtinguts a partir de la solució exacta de l'equació de Richards. Per contra, els pesos emprats en aquest mètode depenien del tipus de sòl i de la distància entre nodes escollida. Cal igualment assenyalar que l'obtenció d'aquestes taules és difícil des d'un punt de vista computacional i, en el cas d'una simulació amb una malla de càlcul no homogènia, es fa necessari disposar de diferents taules per a cadascun dels diferents espais internodals.

La integració de la conductivitat respecte a la càrrega matricial entre dos punts adjacents permet avaluar la conductivitat efectiva i es coneix com el mètode de l'integral de Kirchoff, mètode que és objecte d'una especial atenció. El mètode de l'integral de Kirchoff permet calcular el valor exacte de la conductivitat internodal per fluxos horitzontals [Schanbel i Richie, 1984; Warrick, 1991]. En el cas d'un flux vertical, però, aquest mètode no té en compte la contribució gravitacional al valor de l'integral. Tot i això, el mètode integral de Kirchoff, bé en la seva forma original [Srivastava i Guzman-Guzman, 1995; Miller et al., 1998], bé modificada [Zaidel i Russo, 1992; Williams et al., 2000], ha estat aplicat amb bons resultats en el càlcul dels fluxos verticals. Cal remarcar el fet que l'ús de l'integral de Kirchoff implica dos desavantatges principals. En primer lloc, es fa difícil avaluar l'error que la no consideració del terme gravitacional implica en el càlcul de l'integral, i, en segon lloc, no és possible obtenir expressions en forma analítica, excepte en aquells casos en què s'utilitzen funcions hidràuliques senzilles. Aquesta darrera dificultat pot ser evitada si s'utilitzen taules amb valors específics i interpolacions [Ross, 1992; Grifoll i Cohen, 1999]. Cal ressaltar que el mètode integral de Kirchoff no ha estat usat de manera general per a la solució de l'equació de Richards a causa de la seva complexitat i de la

seva despesa computacional.

En aquest capítol presentem un mètode simple per calcular el valor dels pesos, definits segons *Warrick* [1991], que permeten estimar el valor de la conductivitat internodal. El mètode que proposem evita haver d'utilitzar una taula de valors per als pesos en cada tipus de sòl i pas de malla emprada. Es provarà el mètode en diferents casos i utilitzant les funcions hidràuliques de VG i BC. L'objectiu serà desenvolupar un mètode que permeti calcular de manera precisa el valor de la conductivitat internodal, fins i tot en el cas de distàncies grans entre nodes de malla, i que sigui de fàcil implementació en algorismes numèrics.

## 2.2 TEORIA

### 2.2.1 EQUACIONS FONAMENTALS

A baixos números de Reynolds el flux d'aigua en fase líquida en un medi porós no saturat,  $q$ , (m/s), segueix la llei de Darcy [*Hillel*, 1980]. L'expressió d'aquesta llei en una dimensió (vertical) s'expressa com:

$$q = -K_s k \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \quad 2.1$$

on  $K_s$  és la conductivitat hidràulica a saturació (m/s),  $k$  és la permeabilitat relativa,  $\psi$  és la càrrega matricial de la fase líquida (m) i  $z$  és la distància vertical (de valor positiu amb la profunditat). La discretització de l'equació 2.1 entre dos nodes verticals adjacents normalment s'escriu com:

$$q_{eff} = -K_s k_{eff} \left( \frac{\Delta \psi}{\Delta z} - 1 \right) \quad 2.2$$

on  $\Delta \psi = \psi_L - \psi_U$  és la diferència de càrrega matricial entre dos nodes adjacents, un superior ( $U$ , "upper") i l'altre inferior ( $L$ , "lower"),  $\Delta z = z_L - z_U$  és la distància internodal i  $q_{eff}$  i  $k_{eff}$  són el flux efectiu i la permeabilitat efectiva relativa,

respectivament. És necessari remarcar que l'expressió per al flux, equació 2.2, és aplicable tant en condicions estacionàries com no estacionàries i per volums de control uniformes i no uniformes (veure figura 2.1). Un requeriment important en l'ús d'aquesta metodologia de discretització és el fet que  $q_{eff}$ , calculat a partir de l'equació 2.2, ha de ser un valor representatiu del flux entre les cel·les  $U$  i  $L$ .

Si considerem que, segons l'equació de Richards, el flux s'expressa mitjançant l'equació 2.1, és obvi que en condicions no estacionàries  $q$  variarà al llarg de  $z$ , i que aquesta variació pot ser més gran a mesura que  $\Delta\psi$  i  $\Delta z$  augmenten per separat o juntament. Aquestes variacions, però, no poden ser tractades a partir de la forma discretitzada de l'equació 2.1. Assignem, per tant, un únic valor per al flux entre les cel·les  $U$  i  $L$  tant en condicions estacionàries com no estacionàries.

Si fixem un tipus de sòl amb unes funcions hidràuliques determinades i uns valors específics per a  $\Delta z$ ,  $\psi_U$  i  $\psi_L$ ,  $q_{eff}$  pot ser definit d'una manera implícita i coherent a partir de l'equació 2.1, tal i com *Warrick* [1991] proposà:

$$\Delta z = \int_{\psi_U}^{\psi_L} \frac{d\psi}{1 - \frac{q(z)}{K_s k(\psi)}} = \int_{\psi_U}^{\psi_L} \frac{d\psi}{1 - \frac{q_{eff}}{K_s k(\psi)}} \quad 2.3$$

A partir d'aquesta expressió implícita per a  $q_{eff}$ , podem calcular un valor consistent de  $k_{eff}$  amb l'ajuda de l'equació 2.2. Tal i com *Warrick* [1991] assenyala, el valor de  $k_{eff}$  està limitat entre  $k_U = k(\psi_U)$  i  $k_L = k(\psi_L)$ . Podem definir, per tant, en cada cas un pes,  $w$ , de valor entre 0 i 1, tal que:

$$k_{eff} = w k_U + (1 - w) k_L \quad 2.4$$

Si el valor de  $w$  és conegut, podem calcular directament el valor de  $q_{eff}$  a partir de les equacions 2.4 i 2.2. Cal tenir en compte que la definició de  $w$ , tal i com s'expressa a l'equació 2.4, difereix de la definició proposada per *Warrick* [1991].

Aquest autor va utilitzar la coordenada vertical definida positiva en direcció a la superfície del sòl amb  $w$  multiplicant  $k_L$  en lloc de  $k_U$ , a diferència de com s'expressa en aquest treball. El pes  $w$  definit en aquest treball és, per tant, el valor complementari  $(1-w)$  al definit per *Warrick* [1991].

Per tal d'integrar l'equació 2.3 és necessari establir la relació hidràulica  $k=k(\psi)$ . L'expressió d'aquesta funció segons BC es pot expressar com

$$k = (\psi^*)^{1-3n} \quad 2.5$$

on  $\psi^* = \psi/\psi_{ref}$  és un valor adimensional per la càrrega matricial de l'aigua,  $\psi_{ref}$  és la pressió de bombolla  $\psi_b$  (m), i  $n = \lambda+1$ , on  $\lambda$  és l'índex de grandària de porus definit segons BC [1964]. La funció equivalent per a les funcions hidràuliques de VG és:

$$k = \frac{\left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{1}{1 + (\psi^*)^n} \right]^m \right\}^2}{\left[ 1 + (\psi^*)^n \right]^{m/2}} \quad 2.6$$

on  $m = 1-1/n$  i  $\psi^* = \psi \alpha$  i on  $\alpha$  ( $m^{-1}$ ) és un paràmetre de l'equació de VG. És interessant ressaltar que en les equacions 2.5 i 2.6 la càrrega matricial s'ha adimensionat respecte a una càrrega de referència,  $\psi_{ref}$ , càrrega que en el cas de BC és igual a  $\psi_b$  i en el cas de VG és igual a  $1/\alpha$ .

Les diferents equacions 2.2-2.4 i 2.5 i 2.6 evidencien la dependència de  $w$  amb  $k_U$ ,  $k_L$ ,  $\Delta z$ ,  $n$  i  $\psi_{ref}$ . Podem reduir el nombre de variables independents a partir d'un procés de normalització. En primer lloc, definim les variables adimensionals  $q^*=q/K_s$  i  $z^*=z/\psi_{ref}$  i posteriorment transformem l'equació 2.1 com:

$$q^* = -k \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial z^*} - 1 \right) \quad 2.7$$

expressió que, en combinar-se amb l'equació 2.5 o 2.6, esdevé independent de  $\psi_{ref}$ . Això fa que per qualsevol tipus de funcionalitat hidràulica (2.5 o 2.6) el pes  $w$  sigui funció només de  $k_U$ ,  $k_L$ ,  $\Delta z$  i  $n$ . Aquest plantejament és aplicable tant en problemes en una sola dimensió (seccions 2.3.2 i 2.3.3) com en aquells casos en què sigui necessari avaluar el component vertical, en casos en més d'una dimensió. Aquest darrer cas s'il·lustrarà en la secció 2.3.4. Les correlacions específiques per a les funcions hidràuliques de VG i BC es presenten tot seguit.

## 2.2.2 CORRELACIÓ PER A LA RELACIÓ HIDRÀULICA

Donada una funció hidràulica (VG o BC) i un conjunt de valors per a  $\Delta z$ ,  $\psi_U$ ,  $\psi_L$  i  $n$ , l'equació 2.3 permet calcular de forma implícita  $q_{eff}^*$ . El pes  $w$  es calcula aleshores fent ús de les equacions 2.2 i 2.4. En aquest treball l'integral present en l'equació 2.3 s'ha solucionat numèricament a partir d'un esquema adaptable global basat en les regles de Gauss-Kronrod [IMSL, 1997]. El valor de  $q_{eff}^*$  s'ha buscat de manera iterativa fins a aconseguir una diferència entre el valor de l'integral definida per l'equació 2.3 i el valor de  $\Delta z$  menor que un  $10^{-4}$  %. A partir del suggeriment de *Warrick* [1991], s'ha utilitzat la transformació  $u = \ln(-\psi^*)$ , per tal de reduir els possibles problemes de precisió a l'hora d'integrar l'equació 2.3. Utilitzant aquest mètode d'integració, es van generar dues bases de dades per a cadascuna de les funcions hidràuliques previstes, VG i BC. Cada base de dades està formada per un conjunt de 13,358 valors de  $w$  generats a partir de la combinació dels següents valors de les variables independents:  $k_U$  i  $k_L = 10^{-i}$ ,  $3 \cdot 10^{-i}$  ( $i=1,2,\dots,8$ );  $n = 1.05, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, 5$  i  $\Delta z^* = 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ . Les bases de dades no inclouen els casos en què  $k_U = k_L$ , ja que en aquests casos  $w$  no pot ser calculat de manera directa a partir de l'equació 2.4. La base de dades per a VG està formada per només 13,029 punts, ja que en 299 casos (en tots ells  $k_U \geq 0.1$  i  $n = 1.05$ ) el procés iteratiu per calcular el valor de  $w$  no convergia. La no convergència en aquests casos és conseqüència de les

limitacions del mètode de quadratura per a aquest tipus de funcions,  $k(\psi)$ , amb un caràcter tan marcadament no lineal. Clarament l'ús de la funció per al pes per VG, tal i com s'ha descrit anteriorment, per  $n \sim 1.05$ ,  $k_U = 0.1$  hauria de ser considerat com una extrapolació. Cal tenir en compte, no obstant això, que el comportament monotònic de la funció assegura uns valors raonables en aquest tipus de condicions. Per a la funció hidràulica de BC només s'ha inclòs en la base de dades la regió  $\psi_b \geq \psi$ . Aquells casos en què un dels punts es troba saturat ( $\psi > \psi_b$ ) i l'altre no, es tracten de manera diferenciada a l'apèndix. Finalment, cal assenyalar que quan  $k_U = k_L$ , aleshores  $k_{eff} = 1$ . Cal igualment ressaltar que el rang de valors per  $n$  considerat en aquest estudi,  $1.05 \leq n \leq 5$ , abraça el rang de valors esperats per a un ampli ventall de sòls naturals. Per a VG, *Carsel i Parrish* [1988] informen de valors mitjans per  $n$ , en diferents tipus de sòl, amb valors que van des d'1.09 fins a 2.68. *Rawls i Brakensiek* [1989] informen també d'un rang similar de valors de  $n$  per les funcions hidràuliques de BC.

La dependència de  $w$  amb les variables  $k_U$ ,  $k_L$ ,  $\Delta z^*$  i  $n$  és altament no lineal. En primer lloc, es va examinar la dependència de  $w$  amb  $k_U$  i  $k_L$ . Després d'un procés d'assaig i error es va deduir una equació general per  $w$  amb la forma:

$$w = \frac{1}{1 + \frac{a R}{1 + \beta_0 R}} \quad 2.8.a$$

$$R = \frac{k_U^b}{k_L^c} \quad 2.8.b$$

Aquesta expressió és vàlida només si  $\Delta z^*$  i  $n$  mantenen un valor constant. Per a cada parell de valors de  $\Delta z^*$  i  $n$ , els paràmetres  $a$ ,  $b$ ,  $c$  i  $\beta_0$  van ser trobats ajustant les equacions 2.8.a i 2.8.b als valors de  $w$  emmagatzemats a les bases de dades. Aquests paràmetres ( $a$ ,  $b$ ,  $c$  i  $\beta_0$ ) descriuen una variació monotònica amb  $\Delta z^*$  i  $n$ . El paràmetre  $\beta_0$  mostra una lleugera dependència amb  $\Delta z^*$  i, en canvi, es mostra més sensible a les



variacions de  $n$ . Per a cada valor de  $n$ , la variació d' $a$ ,  $b$  i  $c$  ha estat estudiada i s'han provat diferents funcionalitats empíriques per comprovar la seva habilitat a l'hora de reproduir la funcionalitat dels paràmetres respecte a  $\Delta z^*$ . El conjunt final d'equacions seleccionats per descriure els paràmetres presents en les equacions 2.8.a i 2.8.b es presenten tot seguit.

El paràmetre  $a$  s'expressa com:

$$a = \frac{1 - a_1 \Delta z^*}{1 + a_2 n^2 \Delta z^*} \quad 2.9$$

on  $a_1$  depèn de forma lineal del logaritme decimal de  $n$  segons l'expressió:

$$a_1 = a_{10} + a_{11} \log(n) \quad 2.10$$

Els coeficients  $b$  i  $c$  presents a l'equació 2.8.b tenen una dependència lineal amb  $\Delta z^*$  de forma:

$$b = b_0 - b_1 \Delta z^* \quad 2.11$$

$$c = b_0 + c_0 (n-1) \Delta z^* \quad 2.12$$

El terme independent  $b_0$ , present en les equacions 2.11 i 2.12, mostra una dependència amb el paràmetre  $n$  de forma:

$$b_0 = \frac{b_{01} n}{b_{02} n - 1} \quad 2.13$$

Finalment,  $\beta_0$  és directament proporcional a  $n$  a través de la relació:

$$\beta_0 = \beta n \quad 2.14$$

Les equacions 2.8-2.14 impliquen l'ús de vuit constants ( $a_{10}$ ,  $a_{11}$ ,  $a_2$ ,  $\beta$ ,  $b_{01}$ ,  $b_{02}$ ,

$b_l, c_0$ ) que permeten, un cop escollides correctament, aproximar el valor de  $w$  emmagatzemat a les bases de dades. El valor de les diferents constants s'ha trobat utilitzant l'algorisme d'optimització de Marquardt-Levenberg [Press et al., 1990], el qual minimitza la suma de les diferències al quadrat entre els valors predits i observats de la variable dependent, en aquest cas  $w$ .

Els valors inicials usats en el procés d'optimització dels diferents paràmetres es corresponen amb els valors trobats durant la deducció de la forma de les equacions. L'ús d'aquests valors inicials per als diferents paràmetres ha permès una convergència més ràpida cap als valors finals. La taula 2.1 presenta el valor dels diferents paràmetres optimitzats per les funcions hidràuliques de BC i VG. Els valors estadístics que asseguren la bondat de l'ajust es mostren a la taula 2.2. L'error absolut mitjà per a ambdues correlacions té un valor menor que 0.025 i una desviació estàndard menor que 0.041. L'error relatiu mitjà de l'ajust és igual a un 22%, mentre els coeficients de correlació per a ambdós casos tenen un valor superior al 0.99. Això implica que la funció ajustada descriu adequadament la dependència de  $w$  amb les variables independents ( $k_U, k_L, \Delta z^*$  i  $n$ ).

Les figures 2.2-2.4 comparen valors de  $w$  obtinguts a partir de la correlació i a partir de la base de dades. Les figures 2.2a i 2.2b mostren la variació dels pesos amb  $k_U$  per a les funcions hidràuliques de BC i VG, amb diferents valors de  $k_L$  i per uns valors fixats de  $n=2$  i  $\Delta z^*=0.20$ . En ambdues funcions, BC i VG, la variació de  $w$  amb  $k_U$  per un valor fixat de  $k_L$  segueix una típica forma sigmoïdal. En la majoria dels casos, el valor més elevat de  $w$  es correspon amb els valors de conductivitat més baixos, ja sigui  $k_U$  o  $k_L$ . Aquest comportament característic s'observa també en el cas de la GM. Aquesta coincidència permet explicar per què molts investigadors escullen la GM a l'hora de decidir-se entre les diferents opcions per calcular la mitjana. Cal ressaltar que quan  $k_U$  i  $k_L$  són molt diferents, la GM proporciona valors de  $k_{eff}$  i  $q_{eff}$  massa baixos, tal i com s'evidencia, per exemple, en els experiments numèrics realitzats per Schnabel i

*Richie* [1984].

La variació de  $w$  respecte a  $\Delta z^*$ , per diferents valors de  $n$ , es mostra a les figures 2.3a i 2.3b per a les funcions hidràuliques de BC i VG, respectivament, i per uns valors fixats de  $k_U = 0.5$  i  $k_L = 10^{-6}$ . Valors baixos de  $\Delta z^*$  es corresponen amb valors elevats de gradients de pressió. En aquestes condicions extremes, el valor de conductivitat hidràulica més petit té un pes més important en el càlcul de  $k_{eff}$ , això fa que  $w$  tingui, per tant, un valor més baix. A mesura que el valor de  $\Delta z^*$  creix, aquesta darrera condició es relaxa i s'incrementa la contribució de la conductivitat elevada per  $k_{eff}$  i, en conseqüència, el valor de  $w$ . Tot i que aquest increment és pràcticament menyspreable quan  $n = 1.5$ , quan  $n = 5$ ,  $w$  augmenta de 0.05 a 0.42 en el cas de BC i de 0.07 a 0.33 en el cas de VG. Aquest increment es produeix, tant en el cas de BC com en el cas de VG, a mesura que  $\Delta z^*$  augmenta des d'un valor inicial de 0.01 fins a un valor final de 1. La figura 2.4 mostra una comparació entre valors de  $w$  calculats per *Warrick* [1991], segons l'equació 2.4, i valors calculats utilitzant la correlació presentada en les equacions 2.8-2.14, per a un tipus de sòl específic (argilós-fi). Els paràmetres per a les funcions hidràuliques corresponents a VG en aquest sòl es mostren a la taula 2.3. Els valors de  $w$  calculats a partir de la definició implícita, equació 2.3, coincideixen amb els valors presentats a la taula 6 del treball de *Warrick* [1991]. La figura 2.4 evidencia també com la majoria dels valors de  $w$ , obtinguts a partir de la correlació són molt semblants als valors calculats per *Warrick* [1991]. Tot i això, és interessant analitzar en quins casos s'observa la màxima discrepància. Aquesta situació s'observa quan el node superior ( $U$ ) es troba en unes condicions de màxima sequedat (i.e.,  $\psi_U = -2.5$  m,  $k_U = 5.78 \cdot 10^{-8}$ ), mentre que el node inferior ( $L$ ) es troba saturat (i.e.,  $\psi_L = 0$  m,  $k_L = 1$ ). En aquesta situació el valor de  $w$  proporcionat per *Warrick* [1991], i segons el càlcul integral presentat per les equacions 2.2-2.4, és 0.9007, mentre que la correlació prediu un valor de  $w = 0.9476$ . A partir de l'equació 2.4 i fixant el valor de  $w = 0.9007$ ,  $k_{eff}$  té un valor igual a 0.0993, mentre que, per contra, el valor calculat a partir de la correlació és igual a 0.0524, valor

aproximadament un 50% inferior. És interessant comparar aquests resultats amb els valors estimats utilitzant l'AM i GM. L'AM prediu un valor de  $k_{eff} = 0.5$ , que és un 400% superior al valor obtingut a partir del càlcul integral de les equacions 2.2-2.4, mentre que la GM proporciona un valor de  $k_{eff} = 0.0002$ , més de dos ordres de magnitud inferior al valor *integral* calculat a partir de les equacions 2.2-2.4, d'ara en endavant anomenat *valor integral*. Amb correspondència, els fluxos mostraran el mateix error relatiu, ja que el terme d'error és proporcional a  $k_{eff}$ , tal i com s'evidencia a l'equació 2.2.

La taula 2.4 compara els errors que es generen en usar la correlació proposada juntament amb els errors corresponents a altres tipus d'avitjament. La taula proporciona valors adimensionals dels fluxos calculats a partir de les equacions 2.2-2.4 juntament amb la relació entre els fluxos obtinguts a partir de diferents mètodes d'avitjament i el valor integral per a un sòl tipus francoargiloarenós. Els valors computats en utilitzar l'AM són superiors al valor integral en tots els casos presentats excepte quan  $\psi_U = -0.01$  m i  $\psi_L = -0.1$  m. Per altra banda, la GM implica una subestimació dels fluxos, excepte en el cas en què  $(\psi_U, \psi_L) = (-0.1$  m,  $-0.01$  m) i  $(-1$  m,  $-0.1$  m). Finalment, l'ús de la mitjana basada en pesos (WM) implica tant sobreestimacions com subestimacions, tot i que els valors que s'obtenen tenen una major precisió comparats amb els valors que s'obtindrien si s'usessin les AM i GM, excepte en el cas  $(\psi_U, \psi_L) = (-0.1$  m,  $-0.01$  m), on la GM coincideix amb el valor integral i, en canvi, la WM genera una sobreestimació d'un 17%. És important apuntar que, en les condicions especificades en la taula 2.4, l'AM pot generar una sobreestimació del flux d'un factor de gairebé 9000, mentre que la GM pot subestimar aquest mateix valor un factor proper als 5000. Per contra, la WM implica una sobreestimació màxima d'un factor de 60 i una subestimació màxima d'un factor de 2.5 respecte al valor corresponent al flux integral.

## 2.3 RESULTATS I DISCUSSIÓ

### 2.3.1 CASOS ESTUDIATS I APROXIMACIÓ NUMÈRICA

S'han estudiat quatre casos diferents que han servit per investigar l'efectivitat de les correlacions proposades per calcular el flux en simulacions numèriques. El primer cas consisteix en una infiltració amb un valor fixat de gradient de càrrega matricial, i ha servit per comparar el nostre esquema de càlcul (WM) amb les mitjanes clàssiques, AM i GM. El segon cas ha consistit en un episodi d'infiltració amb un valor constant de contingut volumètric a la superfície. Aquest cas ha permès comprovar el comportament del nostre esquema de càlcul per a diferents valors de distàncies internodals i tipus de funcions hidràuliques. El tercer cas considera una infiltració puntual a la superfície del sòl, en dues dimensions axisimètriques. Aquesta simulació implica una elevada despesa computacional i exemplifica els avantatges del present mètode a l'hora de simular episodis que necessiten una demanda computacional intensa. Finalment, es mostraran els resultats corresponents a una infiltració en un terra estratificat, format per diferents capes de sòl. Aquests resultats il·lustren la potencial aplicabilitat del nostre mètode en sistemes no homogenis.

En totes les simulacions numèriques s'ha utilitzat un esquema iteratiu basat en l'algorisme de Newton-Raphson. El càlcul dels diferents casos ha permès comprovar com la incorporació de la dependència de  $w$  amb  $\psi$ , quan es calcula el terme del jacobià en el mètode de Newton-Raphson, no incrementa ni la velocitat de convergència ni l'estabilitat del procés. S'ha decidit, per tant, no prendre en consideració aquesta característica en el càlcul dels exemples presentats.

Les simulacions s'han realitzat utilitzant la "forma mixta" de l'equació de Richards [Celia *et al.*, 1990]. El procediment de càlcul, basat en l'ús dels pesos i descrit anteriorment, pot ser directament aplicable a totes les formes discretitzades de l'equació de Richards en les quals s'utilitzi el gradient de la pressió matricial com a variable dependent en el càlcul del flux. Això inclou tant la forma estàndard basada en

$\psi$  com la forma “mixta” de l’equació de Richards. Les permeabilitats numèriques, tal i com s’han estimat en aquest treball, proporcionen uns valors acurats per als fluxos quan s’utilitza l’equació 2.2 i en aquells casos en què l’aproximació numèrica a la força motriu del flux es calcula en termes de  $\Delta\psi/\Delta z$ . Per tant, quan s’utilitzin esquemes de càlcul basats en  $\theta$  [Celia et al., 1990] o bé altres possibles transformacions del gradient de pressió [Williams et al., 2000] com a força impulsora, els fluxos calculats seran menys precisos.

### 2.3.2 FLUX VERTICAL AMB GRADIENT DE CÀRREGA MATRICIAL CONSTANT EN DIFERENTS TIPUS DE SÒL

Aquest primer cas considera una infiltració vertical unidimensional caracteritzada per un valor constant de gradient de càrrega matricial. L’objectiu serà mostrar com els diferents mètodes d’amtjanament per a la conductivitat internodal afecten el valor del flux entre dos punts de càlcul adjacents. En aquest cas el flux s’estimarà entre dos punts de malla amb una distància internodal adimensional de valor  $\Delta z^* = 0.5$ , uns valors adimensionals de càrrega matricial,  $\psi_U^* = -1$  i  $\psi_L^* = -2$  i un sòl amb propietats descrites per les funcions hidràuliques de VG. L’expressió del flux adimensional entre aquests dos punts té la forma:

$$q^* = -k_{eff} \left( \frac{\psi_L^* - \psi_U^*}{\Delta z^*} - 1 \right) \quad 2.15$$

on  $k_{eff}$  s’ha calculat utilitzant l’AM, la GM o la WM. La variació del flux adimensional,  $q^*$ , respecte al paràmetre  $n$  usat en les funcions de VG, es mostra a la figura 2.5 juntament amb la solució en estat estacionari del problema generada utilitzant una malla fina (1.000 punts de malla). La solució utilitzant la malla fina representa la solució independent de la malla i, per tant, també independent del tipus d’amtjanament emprat per calcular  $k_{eff}$ . Per a valors de  $n$  inferiors a 1.5, els valors de  $q^*$  predits pels diferents mètodes són molt similars; tot i això, a mesura que  $n$

augmenta, les diferències entre els resultats obtinguts utilitzant els diversos esquemes d'avitjament es tornen cada cop més importants. La figura permet comprovar com en aquest cas, la GM genera els pitjors resultats, amb valors de flux sempre inferiors al valor corresponent per a la malla fina. L'AM, en canvi, es caracteritza per proporcionar valors superiors de  $q^*$ . Els valors corresponents a la mitjana ponderada basada en la nostra proposta (WM) són indistingibles dels valors corresponents a la solució per a la malla fina per  $n < 2.5$ . Per damunt d'aquest valor, en canvi, els resultats corresponents a la mitjana ponderada són lleugerament inferiors als resultats de la malla fina. En tots els casos la màxima discrepància es produeix per  $n = 5$ . Per a aquest valor concret de  $n$ , la GM proporciona un valor de  $q^*$  un 91% inferior al valor de la malla fina, l'AM sobreestima aquest valor en un 45%, mentre que, en canvi, la mitjana ponderada proporciona un valor un 7% inferior.

### 2.3.3 INFILTRACIÓ EN CONDICIONS DE CONTINGUT VOLUMÈTRIC A LA SUPERFÍCIE CONSTANT

Com a exemple d'infiltració independent del temps, s'ha escollit una infiltració en un sòl de textura tipus argilós-fi, amb una condició de contorn a la superfície caracteritzada per un valor constant de contingut volumètric en aigua. Aquest mateix exemple fou emprat per *Warrick* [1991] per comprovar el seu mètode de càlcul. Els paràmetres per al tipus de sòl es corresponen amb els mateixos paràmetres utilitzats per *Warrick* [1991] i es mostren a la taula 2.3. Les condicions inicials i de contorn a la superfície estan fixades i són iguals a  $\theta_l = \theta_{ini} = 0.235$  i  $\theta_l = \theta_s = 0.495$ , respectivament. La condició de contorn a l'extrem inferior, a 1 m de profunditat, implica un gradient de valor unitari. La simulació s'ha realitzat utilitzant l'algorisme numèric proposat per *Grifoll i Cohen* [1999] per una malla fixa i amb un increment de temps igual a 1 s. Reduccions posteriors de l'increment de temps no van afectar els resultats. Aquest esquema de simulació assegura un error global en el balanç de massa de valor inferior a 0.05%.

La infiltració acumulada,  $CI$  (m), pot ser calculada per a qualsevol instant de temps a partir de l'expressió:

$$CI = \int_0^L (\theta - \theta_{ini}) dz \quad 2.16$$

on  $L$  (m) és la longitud total del sistema considerat. L'equació 2.16 resulta adequada quan el flux a l'extrem inferior del sòl és negligible, tal i com succeeix en totes les simulacions realitzades en aquest cas. Les figures 2.6a i 2.6b mostren els resultats corresponents a la infiltració acumulada en un cas il·lustratiu caracteritzat per uns valors  $\Delta z = 0.05$  m ( $\Delta z^* = 0.10$ ) i  $\Delta z = 0.1$  m ( $\Delta z^* = 0.20$ ). La infiltració acumulada ha estat també calculada a partir de la solució quasi analítica en tres termes de Philip [1969] amb els coeficients proporcionats per Warrick [1985]. La solució de la malla fina ( $\Delta z = 0.001$  m), solució que coincideix amb la solució semianalítica, s'ha mostrat independent del tipus de mitjana emprat. La solució del perfil del contingut volumètric en aigua utilitzant la malla fina ha estat comparada amb la solució obtinguda per a malles més gruixudes i tipus d'amitjanament diferents. La figura 2.6c i 2.6d mostra com, depenent del pas de malla emprat, 0.05 m o 0.10 m, l'ús de la GM implica uns fluxos i uns corresponents valors d'infiltració acumulada ( $CI$ ) que són, passades 100 h d'infiltració, un 7.0% i un 19.3% inferiors al valor per a la malla fina, respectivament. Això implica una menor profunditat de penetració de l'aigua dins el sòl.

Per contra, l'ús de l'AM implica valors de conductivitat relativa excessivament alts, de manera que s'observen, en conseqüència, uns valors d'infiltració acumulada superiors (un 3.8% i un 7.4% superiors per un pas de malla constant igual a 0.05 i 0.1 m després de 100 h d'infiltració). Això genera una major profunditat d'infiltració de l'aigua dins el sòl. La solució corresponent a l'ús de la mitjana ponderada genera, al cap de 100 h d'infiltració, una desviació negativa de l'1.0 % i del 3.6% respecte als valors obtinguts utilitzant un pas de malla de 0.05 m i 0.10 m.



### 2.3.4 INFILTRACIÓ PUNTUAL A LA SUPERFÍCIE

Per mostrar els avantatges de la nostra proposta d'amitjanament (WM) a l'hora de calcular els fluxos internodals en simulacions multidimensionals, es presenten dos casos d'infiltració des d'una àrea localitzada a la superfície del sòl. En un sistema de coordenades axisimètriques en dues dimensions, l'equació de conservació de la massa s'expressa com:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r q_r) + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \quad 2.17$$

on  $q_r$  (m/s) i  $q_z$  (m/s) són els components radials i verticals del flux, i  $r$  (m) és la coordenada radial. En el cas que s'usin les funcions hidràuliques de BC, el flux en la direcció radial es pot calcular de manera exacta a partir de la transformació de Kirchoff:

$$q_r = -K_s \frac{\phi_R - \phi_L}{r_R - r_L} \quad 2.18$$

on  $R$  i  $L$  fan referència als nodes dret i esquerre i  $\phi$  és la transformada de Kirchoff, —obtinguda a partir de la integració de l'equació 2.5, que, en el cas de BC, té la forma

$$\phi = \int_{-\infty}^{\psi} k d\psi = \frac{k \psi}{2 - 3n} \quad 2.19$$

La forma discretitzada de l'equació 2.17 ha estat solucionada utilitzant el mètode ADI (*alternating direction implicit*) [Ferziger, 1981]. D'acord amb Kirkland *et al.* [1992], l'ús d'aquest mètode permet solucionar l'equació de Richards en dues dimensions de manera efectiva. La comparació amb altres mètodes mostrava també com aquest mètode era el més eficient des d'un punt de vista computacional.

El domini del sòl, en el cas de les simulació en 2D, comprèn una zona que s'estén verticalment des de  $z = 0$  (just a la superfície) fins a una profunditat de  $z = Z_T$  i

radialment des de  $r = 0$  (eix de simetria angular) fins a  $r = R_T$ . La condició inicial fixada es concreta en un valor de pressió matricial constant en tot el domini de la simulació ( $\psi_{inicial}$ ). A dalt, el flux vertical que s'infiltra des d'una superfície d'àrea circular ( $0 \leq r \leq r_{bc}$ ) s'ha fixat com

$$q_z(r, 0) = q_0 \text{ per } 0 \leq r \leq r_{bc} \quad 2.20 \text{ a}$$

La condició de contorn per a la resta de la superfície i els contorns laterals del domini es concreta en un valor per al flux segons:

$$q_z(r, 0) = 0 \text{ per } r_{bc} \leq r \leq R_T \quad 2.20 \text{ b}$$

$$q_r(R_T, z) = 0 \text{ per } 0 \leq z \leq Z_T \quad 2.20 \text{ c}$$

Finalment, s'ha fixat el valor del gradient en el límit inferior del sistema

$$\frac{\partial \psi}{\partial z}(r, Z_T) = 0 \text{ per } 0 \leq r \leq R_T \quad 2.20 \text{ d}$$

La simulació axisimètrica per al primer cas va consistir en una infiltració ràpida en un sòl de textura francoarenosa (cas 2DA) amb els diferents paràmetres per al domini i la simulació del sistema mostrats a la taula 2.5 i amb els diferents paràmetres per al tipus de sòl a la taula 2.3. S'han realitzat les simulacions considerant els distints mètodes d'avitjament, AM, GM i WM i utilitzant una malla fixa amb un  $\Delta z = 8$  cm i un  $\Delta r = 1$  cm i un  $\Delta t = 2$  s. Els perfils en 2D corresponents al final d'un període de 4 dies d'infiltració contínua en el sòl es mostren a la figura 2.7. Simulacions realitzades amb valors de  $\Delta z$  cada cop més petits han mostrat que per a un valor de  $\Delta z = 0.02$  m, la solució dels tres mètodes d'avitjament emprats ha estat suficientment exacta com per poder ser considerada la solució de la malla fina (amb una desviació  $<1\%$  entre els diferents mètodes d'avitjament).

L'error en la quadratura del balanç de massa per l'aigua no ha estat en cap de

les simulacions realitzades superior a un valor d'un  $2 \times 10^{-4}\%$ . S'ha comprovat també en totes les simulacions que una reducció del pas de temps emprat (i.e.,  $\Delta t < 2$  s) no millorava els resultats mostrats a la figura 2.7. Els contorns són en tots els casos molt semblants excepte en el cas de la simulació GM i en els contorns corresponents a  $\theta_l = 0.20$  i  $0.15$ . L'excessiu error introduït en l'estimació a l'alça de la permeabilitat en el cas de la GM, fa que els contorns mostrin en aquests dos casos una lleugera oscil·lació. És interessant notar que el temps de càlcul necessari per realitzar la simulació emprant la malla més gruixuda s'ha situat entre 62 i 75 min, mentre que en el cas de la malla fina el temps de càlcul final ha estat de 5 h (ambdues simulacions es van realitzar en un PC equipat amb un procesador Pentium III Xeon a 866 MHz).

El segon cas realitzat en coordenades axisimètriques preveu una infiltració lenta en un sòl de textura argilol·limosa. Els paràmetres relatius a les dades de la simulació i al domini del sistema es mostren a la taula 2.5, mentre que els paràmetres hidràulics característics per al tipus de sòl es mostren a la taula 2.3. En aquesta simulació s'ha utilitzat una malla fixa amb  $\Delta z = 0.30$  m i  $\Delta r = 0.04$  m i un pas de temps  $\Delta t = 500$  s. La solució corresponent a la malla fina s'ha obtingut utilitzant una malla de  $\Delta z = 0.04$  m ( $\Delta r = 0.04$  m,  $\Delta t = 500$  s). Aquest és el valor màxim de  $\Delta z$  a partir del qual la discrepància, expressada com la diferència entre la profunditat en el centre de simetria per a la qual  $\theta_l = 0.24$  segons les diferents mitjanes utilitzades, és, al final de la simulació, menor que un 1%. Posteriors reduccions de l'increment de temps usat en aquesta simulació no van aportar diferències significatives a la solució corresponent a un any d'infiltració. Els perfils de contingut volumètric en aigua corresponents a la simulació d'un període d'un any es mostren a la figura 2.8 segons els diferents mètodes d'amitjanament. Tot i que a primer cop d'ull els perfils semblen qualitativament similars, s'observen importants desviacions respecte al perfil corresponent a la solució per a la malla fina especialment per a les mitjanes tipus GM, WM i AM per  $\theta_l = 0.24$ . Aquestes desviacions respecte a la posició de la solució de la malla fina quan  $\theta_l = 0.24$ , tenen, en el cas en què  $r = 0$ , un valor d'un 6.28%, 8.9% i

18.3% per a les mitjanes GM, WM i AM. Cal esmentar que el temps esmerçat en la simulació d'un període d'un any ha estat, en el cas de la malla més grollera, de 23-28 minuts, mentre que el temps trigat en la simulació emprant la malla fina ha estat de 2 h i 45 minuts.

Aquests resultats en dues dimensions mostren com la utilització de la mitjana basada en el nostre esquema de càlcul permet treballar amb malles més grolleres amb la consegüent disminució significativa del temps de càlcul. Igualment es mostra com només el procediment basat en WM ha estat capaç de proporcionar valors correctes per als perfils de  $\theta_l$  corresponents als dos casos presentats.

### 2.3.5 INFILTRACIÓ EN UN SÒL ESTRATIFICAT

El mètode presentat per calcular les conductivitats internodals també pot ser aplicat en el cas de sòls estratificats, tal i com s'il·lustra en aquesta secció per a un cas d'infiltració unidimensional. L'aplicació de l'algorisme implica (1) localitzar un punt de malla en el límit entre capes adjacents del sòl i (2) utilitzar la pressió com a variable contínua del sistema [Bear i Bachmat, 1991]. La localització del node situat al límit entre les capes que formen el sòl assegura que tots els fluxos internodals es calculen en una capa del sòl homogènia.

L'estructura estratificada del sòl emprat en aquest exemple es correspon amb l'estructura presentada a *Hills et al.* [1989]. El domini del terra consisteix en una alternança de capes corresponents a dos sòls de característiques diferents: un sòl tipus *Berino*, de textura francoarenosa, i un sòl tipus *Glendale*, de textura argiloarenosa. Cada capa té una profunditat de 20 cm i la profunditat total del sistema és igual a 1 m. Ambdós sòls es descriuen mitjançant les funcions hidràuliques de VG amb els paràmetres, taula 2.3, presentats per *Hills et al.* [1989]. S'ha fixat un valor inicial per a la càrrega matricial igual a -100 m i una condició de contorn a la superfície igual a un valor constant de la càrrega matricial igual a -50 m. La figura 2.9 mostra els resultats corresponents a aquestes condicions després d'un episodi d'infiltració de 2 dies de

duració utilitzant un pas de malla constant i igual a  $\Delta z = 5$  cm i un increment de temps igual a  $\Delta t = 1$  s. La figura 2.9 mostra també els resultats corresponents a la solució emprant la malla fina ( $\Delta z = 0.005$  m,  $\Delta t = 1$  s) juntament amb el perfil usat com a condició inicial.

En tots els casos simulats els resultats obtinguts no han mostrat variacions apreciables en reduir l'increment de temps emprat. La comparació dels perfils del contingut volumètric en aigua corresponents a les diferents solucions (figura 2.9) demostra com el procediment basat en WM ressegueix amb precisió la solució corresponent a la malla fina. La posició del front, localitzat segons la solució corresponent a la malla fina a una profunditat de 0.725 m, està sobreestimada en un 3.45% (la profunditat és de 0.75 m). D'acord amb la solució per a la malla fina, el volum total d'aigua que ha entrat en el sistema és igual a  $0.1409 \text{ m}^3/\text{m}^3$ , i la discrepància respecte al valor calculat utilitzant el procediment de WM és igual a 0.2%. El mètode basat en AM localitza el front a una profunditat superior, 0.8 m, amb una corresponent sobreestimació del volum d'aigua que ha entrat al sistema d'un 5.1% respecte al valor per a la malla fina. El mètode d'amitjanament basat en GM és el que proporciona una posició del front més allunyada del valor corresponent a la malla fina, 0.5 m, amb una quantitat d'aigua infiltrada un 20.3% inferior al valor predit usant la malla fina.

## 2.4 CONCLUSIONS

S'ha proposat un nou procediment per avaluar la permeabilitat internodal d'un flux vertical en un sòl no saturat. El procediment emprat es basa en l'estimació del pes usat en el càlcul de la mitjana ponderada entre dos valors de permeabilitat situats en dos punts de malla consecutius. A partir de la solució numèrica precisa per a diferents fluxos verticals en estat estacionari, s'ha desenvolupat una correlació per als pesos aplicable a sòls descrits segons les funcions hidràuliques de *van Genuchten* [1980] i *Brooks i Corey* [1964]. Les correlacions proposades són funció dels valors de la

permeabilitat relativa, la distància internodal adimensional, així com paràmetres per al tipus de sòl. La correlació proposada és de fàcil implementació en codis numèrics i té un nivell de complexitat comparable als esquemes de càlcul emprats per calcular la mitjana aritmètica i la mitjana geomètrica. El mètode proposat permet estalviar temps de computació en simulacions en més d'una dimensió mantenint un raonable nivell de precisió.

El mètode és també aplicable a sòls estratificats amb una precisió que resulta ser la més elevada d'entre tots els mètodes d'avitjanament de permeabilitats internodals. Els resultats presentats, consistents amb estudis previs, mostren com l'ús de la mitjana aritmètica sobreestima el valor de la permeabilitat relativa, mentre que la mitjana geomètrica tendeix a subestimar el valor de permeabilitat relativa. El mètode d'avitjanament per pesos proposat permet utilitzar malles de càlcul més gruixudes mantenint un nivell de precisió raonable (comparat amb el resultat de la solució per a la malla fina) a l'hora de predir perfils de contingut volumètric en aigua i quantitat d'aigua infiltrada.

## 2.5 APÈNDIX: ESQUEMA DE CÀLCUL PER A LA TRANSICIÓ ENTRE CONDICIONS DE SATURACIÓ I NO SATURACIÓ

La conductivitat relativa internodal pot ser fàcilment calculada quan els dos punts de malla consecutius estan localment saturats; en aquest cas i ja que el valor per a ambdós punts és igual a la unitat, el valor de la conductivitat relativa és 1. La qüestió sorgeix, en canvi, quan localment un dels punts de malla està saturat mentre l'altre punt no està saturat. En aquestes circumstàncies l'esquema de càlcul, tal i com es mostrava en les equacions 2.3 i 2.4, no és aplicable i es fa necessari, per tant, un esquema de càlcul alternatiu.

Considerem un punt de malla superior ( $U$ ) situat a  $z_U$  i un punt de malla contigu situat ( $L$ ) a una posició inferior  $z_L$ . El node  $U$  es troba saturat i té un valor de càrrega matricial  $\psi_U$ , mentre que el node  $L$  es troba no saturat amb una càrrega matricial igual a  $\psi_L$ . L'objectiu es calcular una conductivitat hidràulica efectiva,  $k'$ , tal que

$$q^* = -k' \left( \frac{\psi_L - \psi_U}{z_L - z_U} - 1 \right) \quad A1$$

Entre  $z_L$  i  $z_U$  existeix un punt,  $z_S$ , situat al límit entre la zona saturada i no saturada. La càrrega matricial en aquest punt és  $\psi_S = 0$  per a les funcions hidràuliques de tipus VG, mentre que  $\psi_S = \psi_b$  en el cas de les funcions hidràuliques de BC. Ja que el flux en la part saturada i la part no saturada ha de ser el mateix, la següent relació és aplicable:

$$q^* = -k_S \left( \frac{\psi_S - \psi_U}{z_S - z_U} - 1 \right) = -k_w \left( \frac{\psi_L - \psi_S}{z_L - z_S} - 1 \right) \quad A2$$

on  $k_S = 1$  és la conductivitat relativa a saturació i  $k_w$  és la conductivitat relativa, calculada mitjançant el mètode d'amitjanament per pesos descrit en aquest capítol, per la zona compresa entre  $z_S$  i  $z_L$ .

Combinant les expressions A1 i A2 s'arriba a

$$k' = \frac{k_w(z_L - z_U)}{(z_L - z_S) + k_w(z_S - z_U)} \quad A3$$

on  $z_S$  és l'única incògnita necessària per poder calcular  $k_w$  i  $k'$ . Aquest valor per a  $z_S$  es pot calcular de manera exacta a partir de l'equació A2, utilitzant un procediment iteratiu. Amb tot, es pot utilitzar una aproximació raonable si considerem que la càrrega matricial varia linealment entre  $z_U$  i  $z_L$ . Aquesta aproximació és certa per al tros saturat i es compleix raonablement bé en la part no saturada, ja que es troba propera al valor de saturació. Per tant, es pot escriure:

$$z_L - z_S = (z_L - z_U) \frac{\psi_L - \psi_S}{\psi_L - \psi_U} \quad A4$$

i, finalment,

$$k' = \frac{k_w(\psi_L - \psi_U)}{(\psi_L - \psi_S) + k_w(\psi_S - \psi_U)} \quad A5$$

L'expressió A5 usada per calcular la conductivitat internodal ha estat provada per a un tipus de sòl de textura francoarenosa, amb diferents paràmetres referenciats per *Rawls i Brakensiek* [1989] i exposats a la taula 2.3. La comparació entre conductivitats efectives calculades de manera diferent per a aquest sòl, per un valor constant de  $\psi_L = -1.0$  m i un valor de  $\psi_U$  comprès en un rang que va de  $\psi_b = -0.0869$  a 0.5 m, es mostra a la figura A.1. Els càlculs clàssics per calcular el valor mitjà per a  $k$  es mostren insensibles a les variacions en el valor de la pressió matricial per al node  $U$  un cop ens trobem en la zona saturada, mentre el valor inferior de la pressió matricial es mantingui constant. La figura A.1 mostra aquests valors constants per a  $k$  calculats utilitzant la mitjana AM i GM. Per contra, els valors de  $k_{eff}$  calculats a partir de la quadratura de l'expressió 2.3 exhibeixen un increment monotònic a mesura que la



pressió superior s'incrementa. Aquest increment s'ajusta bastant a l'increment que segueix  $k'$  calculat segons l'expressió A5.

## BIBLIOGRAFIA

Baker D. L., M. E. Arnold, i H D. Scott, Some analytical and approximate darcian means, *Ground Water*, 37(4), 532-538, 1999.

Baker, D. L., Darcian weighted interblock conductivity means for vertical unsaturated flow, *Ground Water*, 33, 385-390, 1995.

Bear, J., i Y. Bachmat, *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*, Kluwer, Dordrecht, 1991.

Brooks, R. H., i A. T. Corey, Hydraulic properties of porous media, *Hydrol. Pap.* 3, Colo. state Univ., Fort Collins, 1964.

Carsel, R. F., i R. S. Parrish, Developing joint probability distribution of soil water retention characteristics, *Water Resour. Res.*, 24(5), 755-769, 1988.

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

Ferziger, J. H., *Numerical methods for engineering application*, Wiley, NewYork, 1981.

Grifoll, J., i Y. Cohen, A front tracking numerical algorithm for liquid infiltration into nearly dry soils, *Water Resour. Res.*, 35, 2579-2585, 1999.

Haverkamp, R., i M. Vauclin, A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flow problems, *Water Resour. Res.*, 15(1), 181-187, 1979.

Haverkamp, R., M. Vauclin, J. Touma, P. Wierenga i G. Vachaud, Comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 41, 285-294, 1977.

Hillel, D., *Fundamentals of Soil Physics*, Academic, San Diego, Calif., 1980.

Hills, R. G., I. Porro, D. B. Hudson i P. J. Wierenga, Modeling one-dimensional infiltration into very dry soils 1. Model development and evaluation, *Water Resour. Res.*, 25(6), 1259-1269, 1989.

IMSL, QDAG routine, *Visual Fortran Professional Edition*, Version 5.0.A, 1997.

Kirkland, M. R., R. G. Hills i P. J. Wierenga, Algorithms for solving Richards' equation for variably saturated soils, *Water Resour. Res.*, 28(8), 2049-2058, 1992.

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

Philip, J. R., Theory of infiltration, *Adv. Hydrosci.*, 5, 215-305, 1968.

Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, i W. T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge Univ. Press, New York, 1990.

Rawls, W. J., i D. L. Brakensiek, Estimation of soil water retention and hydraulic properties, in *Unsaturated Flow in Hydrologic Modeling*, pp 275-299, Kluwer, 1989.

Richards, L. A., Capillary conduction of liquids in porous media, *Physics*, 1, 318-333, 1931.

Ross, P. J., Cubic approximation of hydraulic properties for simulations of unsaturated flow, *Water Resour. Res.*, 28(10), 2617-2620, 1992.

Schnabel, R. R., i E. B. Richie, Calculation of internodal conductances for unsaturated flow simulations: A comparison, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 48, 1006-1010, 1984.

Srivastava, R., i A. Guzman-Guzman, Analysis of hydraulic conductivity averaging schemes for one-dimensional steady-state unsaturated flow, *Ground Water*, 33(6), 946-952, 1995.

Van Genuchten, M. T., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892-898, 1980.

Warrick, A. W., D. O. Lomen, i S.R. Yates, A generalized solution to infiltration, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49, 34-38, 1985.

Warrick, A. W., Numerical approximations of darcian flow through unsaturated soil, *Water Resour. Res.*, 27(6), 1215-1222, 1991.

Williams, G. A., C. T. Miller i C. T. Kelley, Transformation approaches for simulating flow in variably saturated porous media, *Water Resour. Res.*, 36(4), 923-934, 2000.

Zaidel, J., i D. Russo, Estimation of finite difference interblock conductivities for simulation of infiltration into initially dry soils, *Water Resour. Res.*, 28(9), 2285-2295, 1992.

TAULES

	$a_{10}$	$a_{11}$	$a_2$	$b_{01}$	$b_{02}$	$b_1$	$c_0$	$\beta$
<b>BC</b>	0.208	0.634	0.191	0.690	2.294	0.049	0.020	0.0080
<b>VG</b>	0.465	0.052	0.112	0.551	1.939	0.057	0.0090	0.011

Taula 2.1. Constants de la correlació  $w = w(k_U, k_L, n \Delta z^*)$  per a les funcions hidràuliques de Brooks i Corey (BC) i van Genuchten (VG).

	BC	VG
Error mitjà absolut	0.013	0.025
Error mitjà relatiu	22%	20%
Coefficients de la correlació	0.998	0.992

$error_i = |(w_i)_{basedades} - (w_i)_{correlació}|$ , per  $i = 1, \dots, ndb$ ; on  $ndb$  és el número de punts de la base de dades; l'error mitjà en valor absolut

$$error\ mitjà\ absolut = \sum_{i=1}^{ndb} error_i / ndb;$$

Taula 2.2. Paràmetres estadístics per als residuals i els coeficients de correlació emprats en l'ajust dels pesos ( $w$ ) als valors emmagatzemats a les bases de dades per a les funcions hidràuliques de BC i VG.

	<i>Funció</i>	$\psi_{ref}$ (m)	n	$\theta_s$	$\theta_r$	$K_s$ (m/s)
Francoargilo- arenós Carsel i Parrish [1988]	VG	0.133	1.89	0.41	0.065	$1.23 \cdot 10^{-5}$
Argilós-fi Warrick [1991]	VG	0.667	2	0.495	0.124	$1.23 \cdot 10^{-7}$
Francoarenós Rawls i Brakensiek [1989]	BC	0.0869	1.474	0.401	0.035	$1.70 \cdot 10^{-5}$
Argilollimós Rawls i Brakensiek [1989]	BC	0.3419	1.127	0.423	0.056	$2.50 \cdot 10^{-7}$
Berino franco- arenós Hills et al. [1989]	VG	0.357	2.2390	0.3658	0.0286	$6.26 \cdot 10^{-5}$
Glendale argilo- arenós Hills et al. [1989]	VG	0.962	1.3954	0.4686	0.1060	$1.52 \cdot 10^{-6}$

Taula 2.3. Paràmetres corresponents als diferents sòls.

$\psi_L$ (m)	$\psi_U$ (m)				
	-0.01	-0.1	-1	-10	-100
<b><math>q^*</math> (integral)</b>					
-0.01	0.805	0.110	-2.20e-2	-2.22e-2	-2.22e-2
-0.1	0.817	0.120	-6.64e-3	-6.80e-3	-6.80e-3
-1	0.819	0.123	3.86e-5	-4.60e-5	-4.60e-5
-10	0.819	0.123	7.96e-5	2.38e-9	-3.59e-8
-100	0.819	0.123	7.97e-5	3.80e-8	1.14e-13
<b><math>q^*</math> (mitjana aritmètica)/ <math>q^*</math> (integral)</b>					
-0.01	1.00	2.31	72.4	889.	9062.
-0.1	0.82	1.00	31.7	430.	4420.
-1	2.92	2.69	1.00	18.5	207.
-10	25.1	24.8	11.2	1.00	14.9
-100	246.	245.3	120.	14.2	1.00
<b><math>q^*</math> (mitjana geomètrica)/ <math>q^*</math> (integral)</b>					
-0.01	1.00	1.55	1.00	9.67e-2	7.61e-3
-0.1	0.55	1.00	1.14	0.12	9.59e-3
-1	4.05e-2	9.65e-2	1.00	0.29	2.51e-2
-10	2.72e-3	6.96e-3	0.17	1.00	0.23
-100	2.07e-4	5.32e-4	1.46e-2	0.22	1.00
<b><math>q^*</math> (mitjana amb pesos)/ <math>q^*</math> (integral)</b>					
-0.01	1.00	0.89	1.17	0.77	0.41
-0.1	1.12	1.00	1.11	0.79	0.43
-1	1.12	1.31	1.00	0.86	0.51
-10	5.77	5.77	3.29	1.00	1.17
-100	55.9	55.7	27.4	3.58	1.00

<sup>(a)</sup> Paràmetres per VG per a un sòl de textura francoargiloarenós reportats segons *Carsel i Parrish [1988]* i presentats a la Taula 2.3. La distància internodal considerada ha estat de  $\Delta z = 0.20$  m.

Taula 2.4. Fluxos adimensionals per a un sòl tipus francoargiloarenós i relació entre el flux calculat utilitzant diferents mètodes d'amitjanament i el valor de l'integral.

Test	$r_{bc}$ (m)	$R_T$ (m)	$Z_T$ (m)	$q_0$ (m/s)	sòl	$\psi_{inicial}$ (m)	Temps de simulació (days)
2DA	0.055	0.70	1.100	$1.389 \cdot 10^{-5}$	Francoarenós	-20.	4
2DB	0.220	2.80	4.100	$8.333 \cdot 10^{-8}$	Argilollimós	-100.	365

Taula 2.5. Condicions inicials i de contorn per als exemples en coordenades cilíndriques.

## FIGURES

Fig. 2.1. Representació esquemàtica del flux entre cel·les no uniformes.







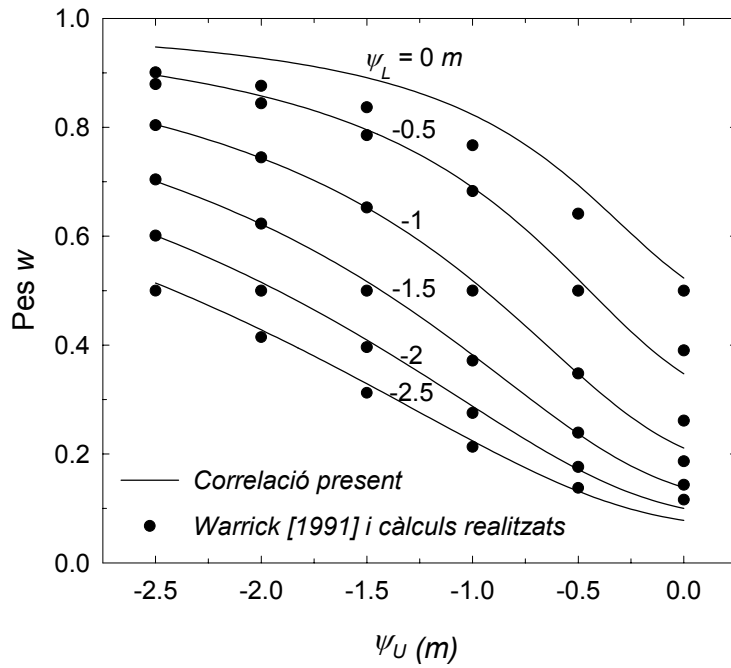


Fig. 2.4. Pesos per al sòl “Yolo light clay” (sòl tipus argilós-fi) corresponents a Warrick [1991] i pesos obtinguts a partir de la correlació presentada.

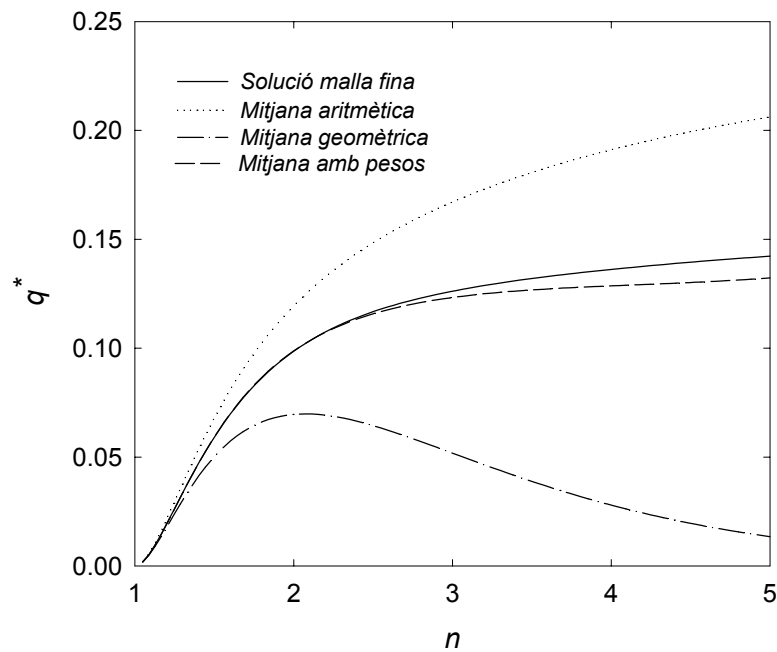


Fig. 2.5. Fluxos adimensionals entre dos punts nodals, calculats segons diferents mètodes d'avitjanament, amb  $\psi_U^* = -1$ ,  $\psi_L^* = -2$  i  $\Delta z^* = 0.5$ , en funció del paràmetre  $n$  de l'equació de VG.

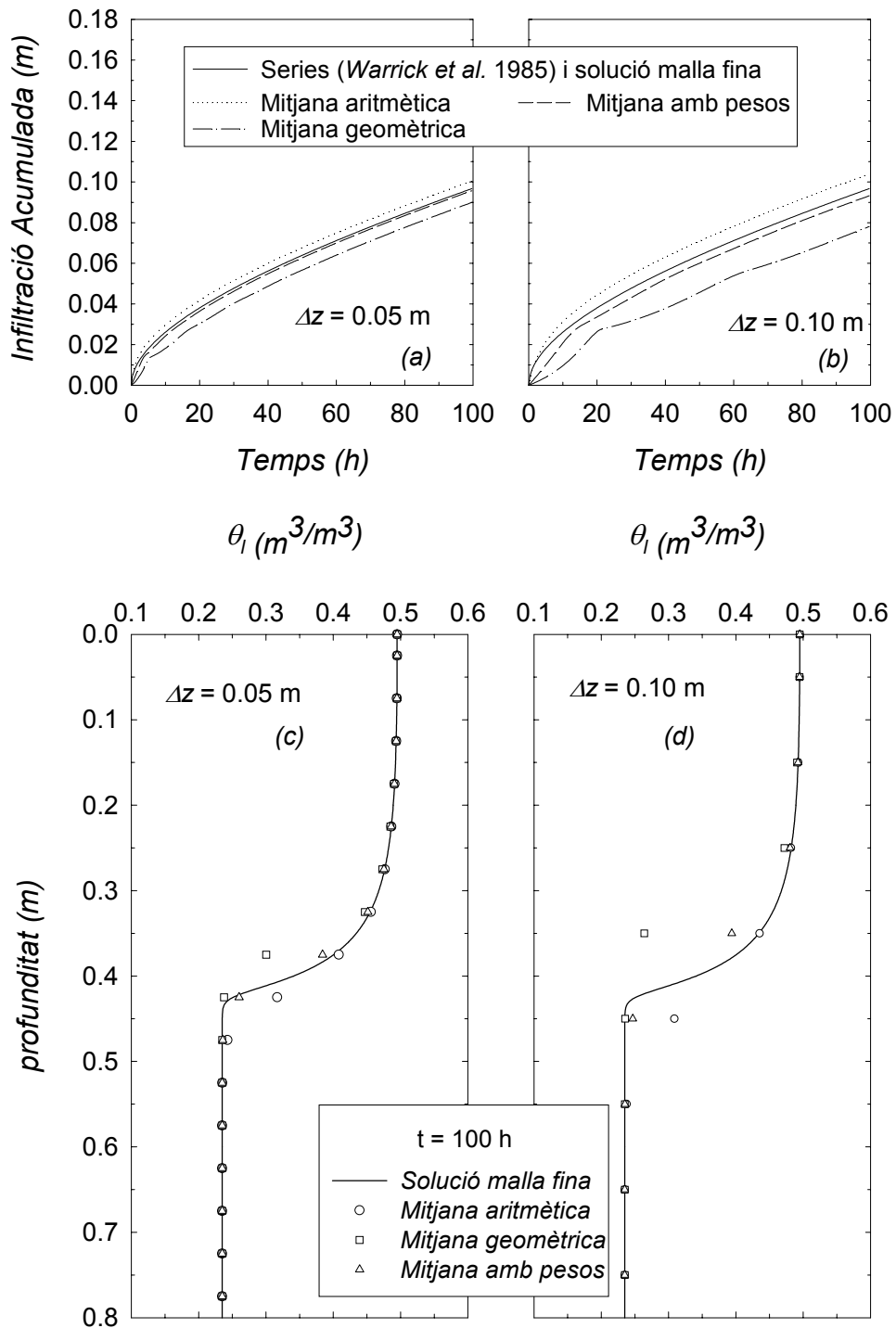


Fig. 2.6. Infiltració acumulada (a, b) i perfils de contingut volumètric en aigua (c, d) després de 100 h d'infiltració en un sòl amb  $n = 2$  i emprant una funció hidràulica tipus VG. Solució numèrica amb  $\Delta z = 0.05$  m (a,c) i  $\Delta z = 0.10$  m (b, d).

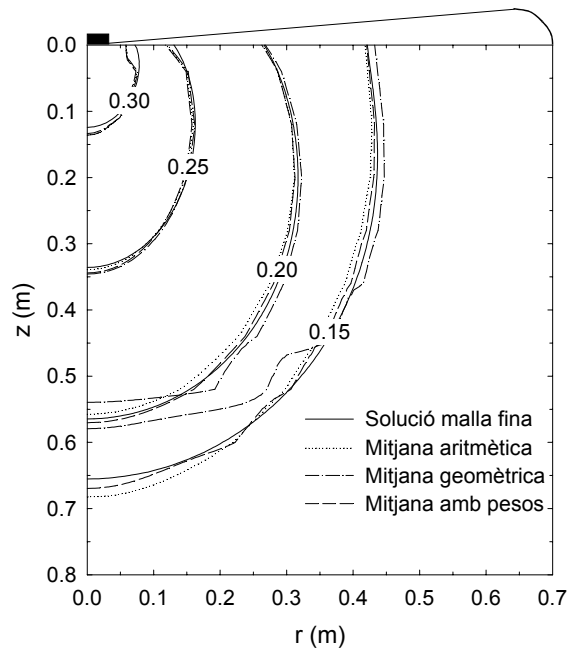


Fig. 2.7. Contorns per al contingut volumètric en aigua després de 4 dies d'infiltració des d'un àrea circular a la superfície de 0.055 m. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjanament amb  $\Delta z = 0.08$  m.

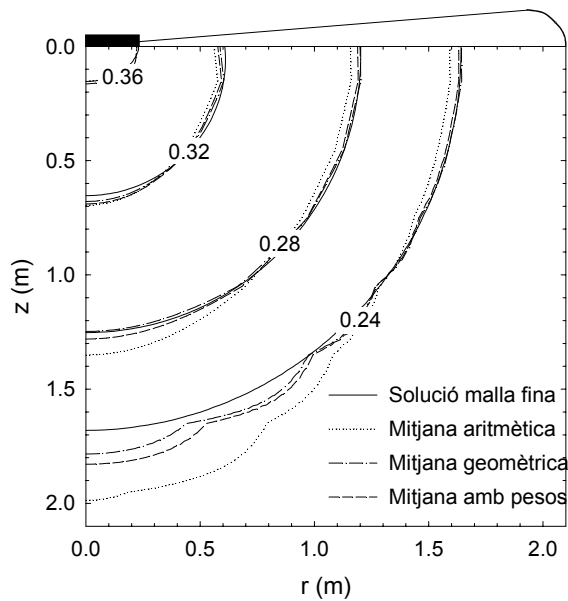


Fig. 2.8. Contorns per al contingut volumètric en aigua després de 365 dies d'infiltració des d'un àrea circular a la superfície de 0.220 m. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjanament amb  $\Delta z = 0.3$  m.

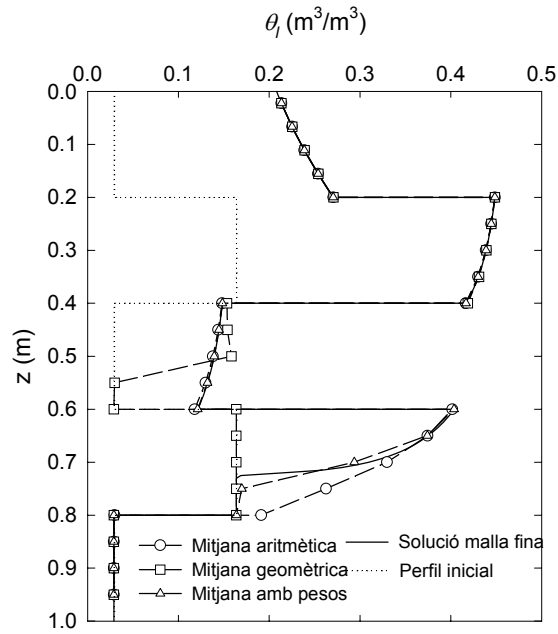


Fig. 2.9. Perfil de contingut volumètric en aigua en un sòl estratificat. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjanament amb  $\Delta z = 5.0$  cm després de 2 dies d'infiltració amb un valor de càrrega matricial constant a la superfície.

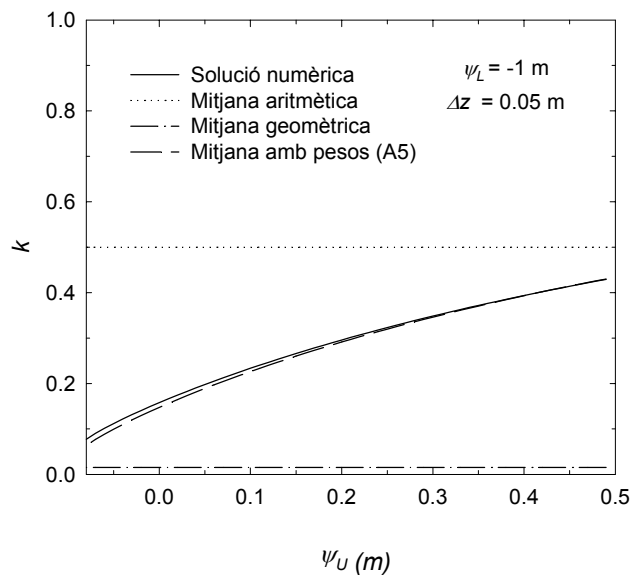


Fig. A.1. Permeabilitats internodals corresponents a un node superior saturat i diferents valors de pressió d'aigua i pressió constant d'aigua al node inferior (calculats per a un sòl tipus francoarenós).

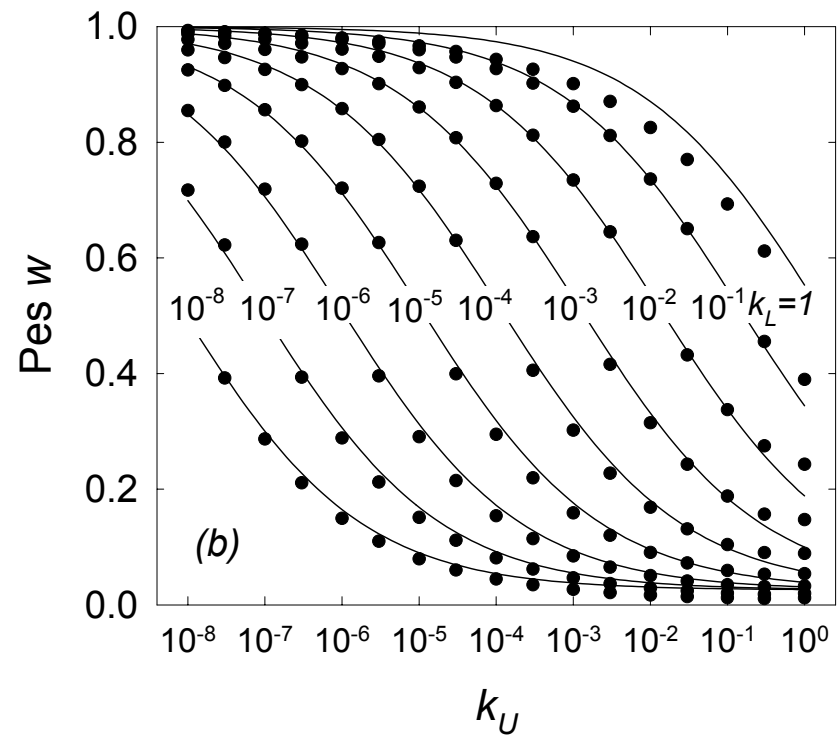
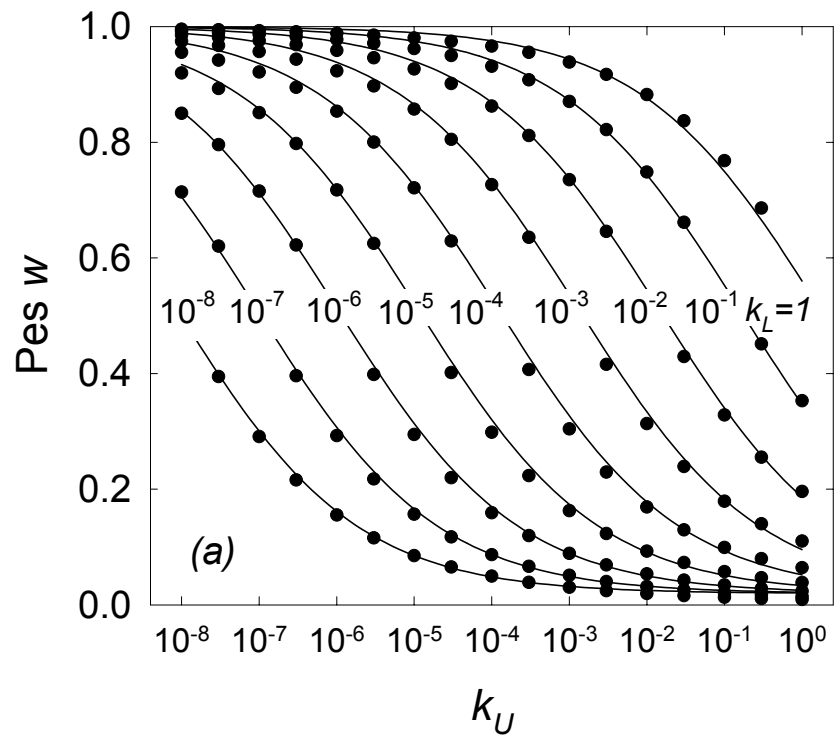


Fig. 2.2. Pesos obtinguts a partir de la correlació i dels valors exactes de la base de dades per  $n = 2$  i  $\Delta z^* = 0.20$ , per a les funcions hidràuliques de (a) BC i (b) VG.

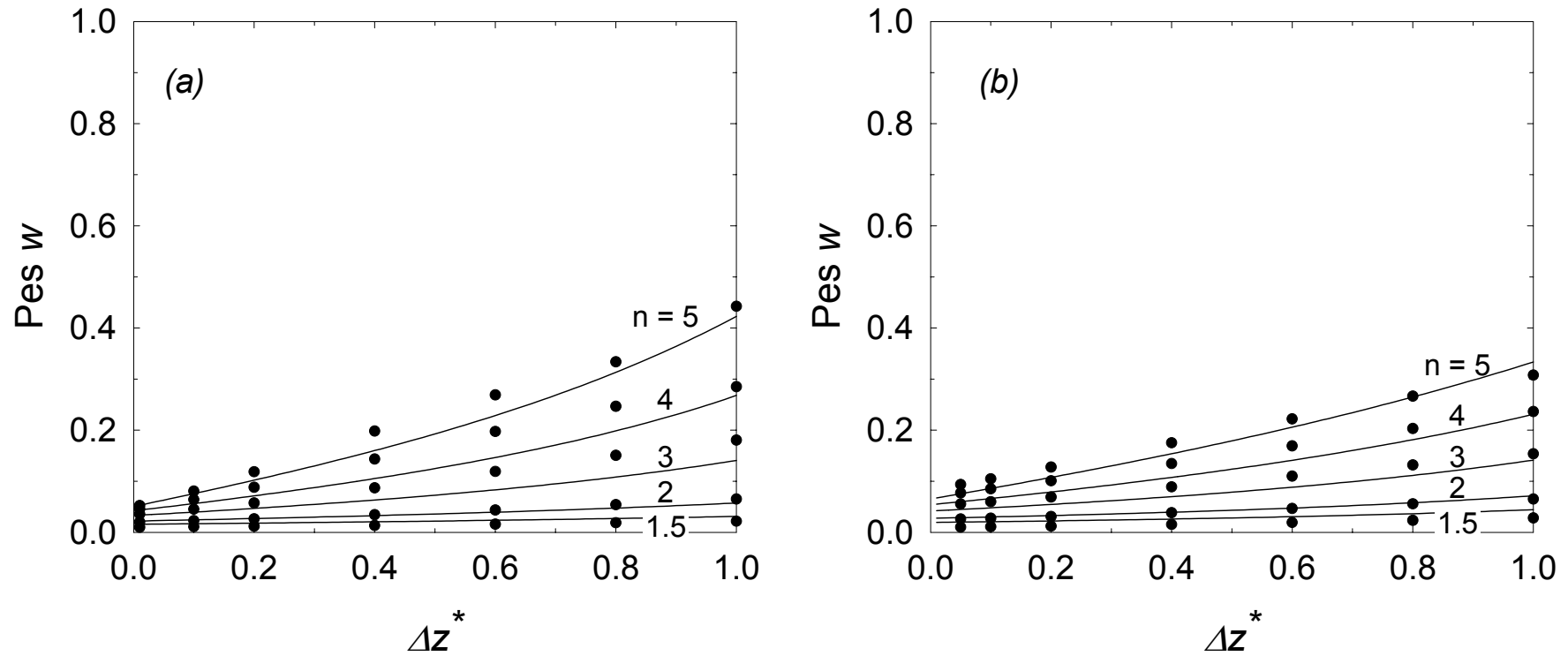


Fig. 2.3. Pesos obtinguts a partir de la correlació i dels valors exactes de la base de dades per  $k_U = 0.5$  i  $k_L = 10^{-6}$ , per a les funcions hidràuliques de (a) BC i (b) VG