

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Modelación numérica de la infiltración de agua en el suelo provista por un infiltrómetro de tensión usando el método de elemento finito

Tesis que presenta

Vanesa Carrillo Ayala

Para obtener el grado de:

Maestra en Ciencias (Matemáticas Aplicadas e Industriales)

Asesores:

Dra. María Luisa Sandoval Solís Dr. Aldo Ledesma Durán

Ciudad de México

Junio 2023

Agradecimientos

Quiero agradecer en primera instancia a mis padres y hermanos al apoyo que he recibido de parte de cada uno de ellos en los proyectos y metas que me he trazado en la vida. Gracias por la fortaleza, tenacidad y amor que me han brindado para enfrentar los desafíos que la vida me ha puesto. Siempre les mostraré mi gratitud por todo lo que han hecho y siguen haciendo por mí, no solo con palabras, sino también con hechos.

También quiero expresar mi agradecimiento a mis compañero de MCMAI por el excelente equipo de trabajo que formamos, los admiro a cada uno y agradezco conocerlos. Asimismo agradezco a mis amigos, en especial a Rodolfo y Nelsy aprecio el tiempo que se han tomando para apoyarme siempre que lo he necesitado. Gracias por demostrarme su cariño.

Agradezco mucho a mis asesores de tesis Dra. María Luisa Sandoval Solís y Dr. Aldo Ledesma Durán por la ayuda, paciencia, enseñanza y orientación durante el desarrollo del trabajo. Gracias por ser atentos, comprensivos y compartime la pasión que le ponen a su trabajo. A los miembros del jurado calificador Dr. Lorenzo Héctor Juárez Valencia, Dr. Francisco Javier Domínguez Mota, por sus contribuciones a esta tesis y por el tiempo que invirtieron para revisarla.

A la maestría en ciencias (Matemáticas Aplicadas e Industriales) y a sus profesores que compartieron su conocimiento. A CONACYT por el apoyo económico brindado para realizar mis estudios.

Resumen

En esta tesis se presenta la modelación numérica de la infiltración de agua en el suelo por medio de un infiltrómetro de tensión con la finalidad de servir como base al diseño de diferentes problemas relacionados con este proceso. Para el desarrollo del procedimiento numérico se utiliza la forma linealizada de la ecuación de Richards conocida como ecuación de Warrick con condición inicial igual a cero y condiciones de frontera de tipo mixto. Se discretiza el espacio con el método de elemento finito y la integración temporal a través del método de Crank-Nicolson. Además se emplean transformaciones isoparamétricas bicuadráticas para realizar los cálculos.

Con el fin de aproximar la solución del problema de estudio, se ha elaborado un programa en el lenguaje M de Matlab, el cual nos permitirá entender otro tipo de problemas relacionados con la infiltración. La verificación del programa se ha realizado con un problema semejante al propuesto por Warrick (Warrick, 1974), dedujimos la solución analítica y constatamos que los perfiles del potencial de flujo matricial que se generan tienen el mismo comportamiento y forma que los presentados tanto en el artículo como aquellos obtenidos numéricamente.

Para realizar el análisis del problema de estudio hemos considerado los datos del experimento tomado de (Pulido, 2019) que consistió en extraer 7 columnas de suelo: 3 del Bosque, 2 del Acahual y 2 de Agostadero y realizar ensayos de infiltración para cuatro diferentes tensiones (etapas) en el laboratorio, en donde se encontró los valores de la conductividad saturada, la constante de proporcionalidad de Gardner y los datos registrados de la lámina acumulada.

Los resultados numéricos se obtienen para los tres tipos de suelo: Bosque, Acahual y Agostadero y el valor del parámetro κ por medio del ajuste de las curvas de infiltración experimentales. Se muestran los perfiles del potencial de flujo matricial Θ y los caudales de entrada y salida. Se observa que al emplear diferentes tensiones se producen cambios en el caudal.

Finalmente los resultados demuestran que en el Bosque existe una mayor infiltración seguido del Acahual y Agostadero, debido probablemente a la estructura del suelo y la influencia humana. Además se aproximan los perfiles del potencial de flujo matricial que confirman lo dicho anteriormente. Se observa que las propiedades hídricas mejoran con los suelos menos perturbados (Bosque).

Índice general

1.	Intr	oducción	6
	1.1.	Objetivos	7
	1.2.	Estructura de tesis	7
2.	Preli	minares	9
	2.1.	El suelo y sus propiedades	9
		2.1.1. Composición del suelo	10
		2.1.2. Estructura del suelo	11
		2.1.3. Porosidad	12
		2.1.4. Relación del agua y el suelo	13
		2.1.5. Curvas características de humedad del suelo	14
	2.2.	Infiltrómetro de tensión	16
	2.3.	Dinámica del agua en medios porosos	17
		2.3.1. Ley de Darcy	17
		2.3.2. Ecuación de continuidad	19
		2.3.3. Ecuación de Richards	20
	2.4.	Modelos de Warrick y Wooding	21
3.	Prot	lema de estudio	23
	3.1.	Datos experimentales	23
	3.2.	Modelo	27
	3.3.	Solución Analítica para una fuente puntual	29
4.	Méte	odo de elemento finito	37
	4.1.	Definición de espacios	37
	4.2.	Formulación variacional	38
	4.3.	Discretización del problema variacional	40
	4.4.	Funciones de forma	43
	4.5.	Transformaciones isoparamétricas	44
	4.6.	Integración Numérica	47

ÍNDICE GENERAL

	4.7. Discretización sobre el tiempo	48
5.	Validación del programa5.1. Problema de validación: fuente puntual	49 49 50 52
6.	Resultados númericos 6.1. Cálculo del flujo de agua	54 54 57 61
7.	Conclusiones	65
A.	Transformadas de Fourier A.1. Transformada inversa de Fourier A.2. Teorema de Convolución	67 68 69
B.	Ecuación de calor en 1D	71
C.	Ecuación de calor 3DC.1. Ecuación de difusión de calor 3D en dominio infinitoC.2. Ecuación de difusión 3D con una fuente puntual en dimensión infinita	74 74 75
D.	Demostración del Teorema 1	79
E.	Cálculo del caudal computacional	82
F.	Programas F.1. Programa para la solución Analítica	84 84

l Capítulo

Introducción

Una propiedad de gran importancia en el suelo es la infiltración, que se define como la penetración de agua en los poros del terreno. La infiltración es parte fundamental del ciclo del agua y es crucial para la supervivencia, el crecimiento y el desarrollo de la comunidad vegetal (Shukla, 2013). La forma en la que el agua fluye a través del suelo esta influenciada por las propiedades del suelo, la cubierta vegetal, la humedad inicial y las propiedades hidráulicas. Debido a estos factores resulta complejo estimar el valor de la infiltración, a menos que el estimado se realice con base en determinaciones directas (Blair et al., 1963).

Un dispositivo para medir la infiltración de agua es el infiltrómetro de tensión que permite derivar propiedades hidrofísicas del suelo, tales como la conductividad hidráulica saturada e insaturada (no saturada), la porosidad efectiva o conducente (principal responsable de la infiltración) y la proporción total del flujo de infiltración para diferentes tamaños de poro (macro, meso y microporos), permitiendo analizar la infiltración en sus distintas componentes (Gómez-Tagle et al., 2014). El instrumento consta de un tubo de Mariotte con ajuste manual de la tensión aplicada, un reservorio principal único y un registro manual de las mediciones, aunque el dispositivo puede ser adaptado para la toma automatizada de datos. Una pequeña presión negativa también asegura que la infiltración tiene lugar a través de la matriz del suelo y no a través de las grietas, bioporos o agujeros de gusano del suelo (Mañas, 2005).

El uso de modelos matemáticos es una importante alternativa para estimar el contenido o redistribución de agua. El movimiento de agua y otros fluidos en el suelo es regido por la Ley de Darcy. Esta teoría, junto con la ecuación de continuidad dieron origen a la ecuación de infiltración, conocida como ecuación de Richards. La ecuación es no lineal lo que impide encontrar una solución analítica. Por ello, se debe considerar la linealización que se logra mediante la transformación de Kirchhoff y el modelo de Gardner dando como resultado la ecuación de Warrick, útil para pequeñas variaciones del contenido de humedad. Esta ecuación captura razonablemente la humedad del suelo para escenarios naturales, incluidos los estratificados y con vegetación (Friedman, 2019).

En esta tesis, la modelación del flujo de agua en una muestra de suelo en el infiltrómetro de tensión se

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

realiza a través de la ecuación de Warrick para una condición inicial igual a cero y ciertas condiciones de contorno. Para aproximar la solución se programa el método de elemento finito y se valida con un problema descrito por Warrick (Warrick, 1974), bajo ciertas condiciones, obteniendo resultados satisfactorios.

Los resultados numéricos generados están enfocados a mostrar el caudal de entrada y salida, los perfiles del potencial de flujo matricial y a cómo ajustar los datos de infiltración experimental para tres muestras de suelo Bosque, Acahual y Agostadero con datos obtenidos del experimento en laboratorio descrito en (Pulido, 2019).

1.1. Objetivos

El objetivo general de la tesis es modelar numéricamente la infiltración de agua en el suelo a través de un infiltrómetro de tensión usando el método de elemento finito. Para alcanzar este fin se definen los siguientes objetivos particulares:

- 1. Estudiar las relaciones entre el modelo matemático propuesto por Warrick y las ecuaciones de difusión-advección características de este proceso.
- 2. Emplear el método de Galerkin para construir la representación variacional del problema diferencial y la discretización del mismo.
- 3. Generar el programa para aproximar la solución del problema diferencial usando el método de elemento finito en el lenguaje de programación M de Matlab.
- 4. Revisar la solución analítica para validar el modelo numérico.
- 5. Presentar e interpretar los resultados obtenidos para la aplicación con los 3 tipos de suelo.

1.2. Estructura de tesis

Este documento consta de 7 capítulos. En el primero se encuentra la introducción, se presenta un panorama del tema de tesis y los objetivos de la misma.

En el capítulo 2 se describen conceptos y principios fundamentales con la finalidad de derivar la ecuación de Richards. También se linealiza dicha ecuación para obtener los modelos de Warrick y Wooding.

En el capítulo 3 se indica el sitio de estudio donde extrajeron tres tipos de suelo Bosque, Acahual y Agostadero, y se expone la generalidad del experimento en laboratorio mediante ensayos de infiltración con un infiltrométro de tensión y los datos que se obtuvieron. Además se plantea el modelo matemático a estudiar con sus condiciones de frontera e inicial y se desarrolla la solución analítica de

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

un problema semejante con el objetivo de verificar el programa propuesto.

El capítulo 4 muestra de manera detallada el procedimiento de la discretización del modelo de Warrick usando el método de elemento finito y un método $\hat{\theta}$ para realizar la discretización temporal.

Con el fin de constatar la fiabilidad del modelo númerico, en el capítulo 5 se realiza una comparación de la solución numérica con la solución analítica para una fuente puntual.

El capítulo 6 muestra los resultados numéricos obtenidos para cada tipo de suelo, describiendo el comportamiento de los perfiles del potencial de flujo matricial, las curvas de infiltración y las curvas de flujo de entrada y salida.

Por último en el capítulo 7 se presentan las conclusiones del trabajo.

Capítulo

Preliminares

En este capítulo se exponen, en términos generales algunos conceptos y los principios fundamentales mediante los cuales se deriva la ecuación de Richards que describe el flujo del agua en el suelo. Dado que dicha ecuación es no lineal, se deduce en su lugar el modelo de Warrick que se obtiene al linealizar la ecuación de Richards a partir del modelo de Gardner y la transformada de Kirchhoff. Dicha ecuación permite considerar la infiltración de manera simplificada.

2.1. El suelo y sus propiedades

El suelo es un cuerpo tridimensional en el que coexisten tres fases: sólida, líquida y gaseosa, ver figura 2.1. La fase sólida está compuesta por minerales derivados de las rocas y materia orgánica. Estas partículas, al unirse, forman los agregados que constituyen la estructura del suelo y determinan la circulación del agua y del aire.

La fase líquida está conformada principalmente por agua derivada de la precipitación y de diferentes ácidos orgánicos que se ubican en los espacios vacíos entre agregados. Esta fase ha sido clasificada en tres tipos: a) agua adsorbida en los agregados que no puede ser separada por acciones hidrodinámicas, b) agua capilar que permanece en el suelo por acción de las fuerzas capilares y puede moverse por la acción de éstas, c) agua gravitacional o libre, que es el agua que se mueve impulsada por la gravedad en los suelos y dependerá de la composición de éstos.

La fase gaseosa está formada por nitrógeno, oxígeno, vapor de agua y dióxido de carbono y está situada en los espacios vacíos restantes que no ocupa la fase líquida.



Figura 2.1: Representación visual del suelo y cuantificación del volumen, donde V es el vólumen total, V_s , V_w , V_v son los vólumenes del sólido, líquido y de la fase fluida.

Los suelos se clasifican de la manera siguiente:

- 1. Suelo saturado. Solamente se tiene la fase sólida y líquida. Se denomina saturado, porque todos los agregados y los espacios están llenos de agua.
- 2. Suelo no saturado. Interactúan simultáneamente las tres fases: sólida, líquida y gaseosa. Los vacíos entre los agregados están ocupados por aire y agua.
- 3. Suelo seco. Incluye la fase sólida y gaseosa, es decir, el suelo no contiene agua.

2.1.1. Composición del suelo

La textura indica el contenido relativo de partículas sólidas de diferente tamaño. La Sociedad Internacional de las Ciencias del Suelo (ISSS por sus siglas en inglés) define los tamaños de grano de acuerdo a la siguiente escala (Miyazaki, 2005):

- 1. grava (más grande que 2 mm)
- 2. arena gruesa (entre 2.0 y 0.2 mm)
- 3. arena fina (entre 0.2 y 0.02 mm)
- 4. limos (entre 0.02 y 0.002 mm)
- 5. arcillas (más pequeños que 0.002 mm).

La clasificación de texturas es conocida como triángulo de texturas. Las líneas trazadas en el triángulo fijan los límites porcentuales de cada componente (Arcilla, Limo y Arena). Por ejemplo si un suelo contiene 60 % de arena, 90 % de limo y 10 % de arcilla corresponde a una textura Franco arenosa, ver figura 2.2.



Figura 2.2: Triángulo de texturas.

2.1.2. Estructura del suelo

La estructura del suelo es la dispersión o unión de partículas que lo conforman. Las partículas individuales cuando se ensamblan, aparecen como partículas más grandes y son llamadas agregados. Los agregados varían en tamaño y forma dando como resultado diferentes estructuras de suelo, ver Figura 2.3. Por lo general, se conocen 4 tipos de estructuras

- 1. Las estructuras granulares son partículas individuales de arena, limo y arcilla agrupadas en pequeños granos redondos, humosas y porosas.
- 2. Las estructuras en bloques y en bloques subangulares son partículas de suelo que se adhieren entre sí en bloques casi cuadrados o angulares que tienen bordes más o menos afilados.
- 3. Las estructuras prismáticas y columnares son partículas de suelo que se han formado en columnas verticales o pilares separados por grietas verticales en miniatura, por efectos de desecación, contracción o rajaduras del suelo. El agua circula con mayor dificultad y el drenaje es deficiente.
- 4. La estructura laminar está formada por partículas de suelo agregadas en placas delgadas o láminas apiladas horizontalmente unas sobre otras de materiales finos, arenosos, salinos y carentes de una estructura (Shukla, 2013).



Figura 2.3: Tipos de estructura del suelo.

Es importante tener una buena estructura para permitir el movimiento del agua del suelo y su exceso se drene.

2.1.3. Porosidad

La porosidad del suelo η es el volumen total de espacio entre los agregados ocupado en diferentes porcentajes de agua y aire. La expresión matemática se define como

$$\eta = \frac{V_v}{V}.$$

Existen tres tipos de porosidad

- 1. Absoluta. Es el volumen total de los agregados interconectados y no interconectados con el volumen total del suelo.
- 2. Efectiva. Se refiere al porcentaje de agregados interconectados que permiten la circulación del agua.
- 3. No efectiva. Los agregados que no están conectados entre sí (aislados o cerrados), por lo tanto el agua no podrá salir ni desplazarse por esta zona.

Dentro del espacio poroso se pueden distinguir

- microporos (< 0.01 cm de radio del poro),
- mesoporos (de 0.01 a 0.05 cm de radio de poro) y
- macroporos (> 0.05 cm de radio de poro).

Los macroporos representan las vías para la circulación rápida del agua de gravedad y del aire, permitiendo su drenaje y eliminación cuando hay exceso. En cambio, en los microporos el agua queda retenida, en los de mayor tamaño puede moverse lentamente, pero en los más pequeños queda tan fuertemente retenida que permanece inmóvil.

2.1.4. Relación del agua y el suelo

La relación del agua y el suelo se refiere a la capacidad de los suelos de retener humedad. Las cantidades relativas de agua en los suelos se definen por el contenido volumétrico de agua θ

$$\theta = \frac{V_w}{V}.\tag{2.1.1}$$

Los suelos están divididos por el nivel freático. Por debajo del nivel freático, el suelo es saturado, el comportamiento está gobernado por el estrés que mantiene unidas a los agregados. En tanto, por encima del nivel freático se encuentra el suelo no saturado. Aquí ocurre el fenómeno capilar, es decir, la capacidad del agua para fluir a través de pequeños espacios entre los agregados conocidos como capilares en contra de la gravedad (Atkinson, 2017). El agua asciende debido fuerzas adhesivas y cohesivas que actúan contra la atracción gravitacional, ver figura 2.4.

El potencial matricial es la fuerza ejercida sobre el agua por el suelo, también conocido como tensión. Esencialmente es cero para un suelo saturado y negativo para un suelo no saturado, el potencial matricial nunca es positivo. La conductividad hidráulica se relaciona con el grado de resistencia de las partículas del suelo cuando el agua fluye por los poros. Esta resistencia se ve afectada por las formas, tamaños, ramificaciones, uniones y tortuosidades de los poros así como por la viscosidad del agua. A mayor resistencia menor conductividad hidráulica y viceversa, ver figura 2.4.



Figura 2.4: Clasificación de suelo.

Una medida de la capacidad del aire y el agua para moverse a través del suelo es su permeabilidad. Está influenciada por el tamaño, la forma y la continuidad de los espacios entre los agregados. Es similar a la conductividad hidráulica saturada K_s porque también describe la facilidad con la que el agua se puede mover.

Potencial Hídrico del Suelo

El potencial hídrico total del suelo ψ es una cantidad relativa porque se mide en relación con el agua libre y está descrito como

$$\psi = \psi_q + \psi_m + \psi_o + \psi_p,$$

donde ψ_g , ψ_m , ψ_o y ψ_p son los potenciales gravitacional, matricial, osmótico y de presión respectivamente, los cuales se describen a continuación.

Potencial gravitacional ψ_g . Es la fuerza de gravedad que actúa sobre el agua del suelo siempre hacia el centro de la tierra. Su valor puede ser positivo, negativo o cero según la localización del plano de referencia. Si se toma el eje z hacia arriba, el potencial gravitacional actúa en la dirección $-\mathbf{e}_z$ y es

$$\psi_g = -z. \tag{2.1.2}$$

Potencial matricial ψ_m . Representa el grado de retención del agua debido a las fuerzas de adhesión y capilaridad. Depende de la tensión superficial del agua y su ángulo de contacto con la fase sólida. Se define como

$$\psi_m = -h,$$

donde h es la succión, proporcional a la cabeza matricial. Su valor es siempre negativo, ya que la presión que origina se opone a la expulsión de agua del suelo. A medida que se seca un suelo, más negativo es el potencial matricial.

Potencial osmótico ψ_o . Representa la disminución de la capacidad agua debido a la presencia de solutos. La presencia de estos disminuye el potencial hídrico total del suelo. Sus valores varían entre cero y negativos.

Potencial de presión ψ_p . Es la presión ejercida por una columna de agua que se encuentra por encima del punto del suelo considerado. En zonas no saturadas el valor es cero y en las zonas saturadas el valor es positivo. Se considera la variación de presión externa respecto al nivel de referencia.

2.1.5. Curvas características de humedad del suelo

Para caracterizar el suelo es necesario conocer la relación entre la conductividad hidráulica y el potencial matricial, también la relación entre el contenido de humedad y el potencial matricial. A continuación, se exponen dichas correlaciones.

Conductividad vs potencial mátrico.- El modelo exponencial de Gardner (1958) se usa en el calculó de la conductividad hidráulica no saturada para cada potencial matricial y está dada por (Shukla, 2013)

$$K = K_s e^{\alpha \psi_m} \tag{2.1.3}$$

donde α es la constante de Gardner con unidades m⁻¹ y K_s la conductividad hidráulica saturada. Ésta mide la capacidad del suelo de absorber agua, su valor tiende a incrementarse desde bajos valores en texturas gruesas a altos valores texturas finas, ver figura 2.5.



Figura 2.5: Variación de la conductividad hidráulica K en función del potencial matricial ψ_m , valores de K obtenidos en suelos franco arenoso y franco arcilloso (Silva Robledo et al., 2015).

Potencial mátrico vs humedad. La curva característica de humedad del suelo expresa la relación entre el potencial matricial y el agua volumétrica. Está curva se ve fuertemente afectada por la textura, estructura del suelo y por otros componentes, incluida la materia órganica.

El proceso de humectación depende si se parte de un suelo húmedo que se está secando o si se parte de un suelo seco que se va humedeciendo. Como se ve en la figura 2.6, la curva $\psi_m(\theta)$ queda por encima en el primer caso. Esto significa que para un mismo contenido de humedad, en un período de desecación se presenta un potencial matricial mayor que en el período de humectación. A este fenómeno se le conoce como histéresis y se debe a la forma en que se produce el humedecimiento o el secado.



Figura 2.6: Esquema de histéresis, las curvas características del agua en suelo.

Las curvas características de humedad del suelo se aproximan por varios tipos de funciones como las ilustradas en el cuadro 2.1, donde a, b, c son parámetros, θ_r es el valor residual del contenido volumétrico de agua y θ_s el contenido de agua saturada, ver figura 2.6.

Función	Ecuación	
Potencia	$\psi_m = -a\theta^{-b}$	
Sigmoidea	$\log(-\psi_m) = a + b \ln \left[\frac{\theta}{\theta_s} - 1\right]$	
Van Genuchten	$\Theta = \left[\frac{1}{1 + (\sigma h)^n}\right]^m$	
Lineal	$\Theta = rac{ heta - heta_r}{ heta_s - heta_r}$	

Cuadro 2.1: Tipos de funciones para ajustar las curvas características de humedad.

2.2. Infiltrómetro de tensión

Para medir la infiltración de agua en el suelo se suele utilizar distintos dispositivos. Para los experimentos en laboratorio que modelaremos en este trabajo se empleó el infiltrómetro de tensión.

El infiltrómetro de tensión consiste en 2 tubos acrílico, uno de 90 cm de altura con 3.83 cm de diámetro interior llamado reservorio principal. El otro consiste de un tubo más pequeño de 30 cm de altura y 1.96 cm de diámetro interior, llamado tubo mariotte. En el montaje del experimento, el reservorio principal va tapado con un tapón de goma. Por arriba del tubo Mariotte está un tapón de huele atravesado por un tubo de burbujeo, que tiene 0.32 cm de diámetro interno y 27 cm de largo.

Por abajo tiene otro tapón con otro tubo atravesado de 0.32 cm y 27 cm de largo que se llama tubo respiradero. Este tubo respiradero está conectado a una manguera negra de hule con 0.45 cm de diámetro interno y de 15 cm de longitud. A su vez, esta manguera negra conecta con una perforación en la base de aluminio para unir el tubo de Mariotte con la sección cónica de la base. El radio de la base del infiltrómetro es r_0 = 5 cm (Gómez-Tagle et al., 2014). Ver figura 2.7.



Figura 2.7: Infiltrómetro de tensión. Reservorio principal (1), tubo de Mariotte (2), manguera para conexión tubo de Mariotte-base de aluminio (3), base de aluminio torneada (4), palanca de válvula de esfera (5), malla de nylon permeable hidrofílica (6), liga (7), placa de policarbonato perforada (8), orificio de burbujeo (9). A) Detalle de la base de aluminio y malla de nylon asegurada con liga, B) detalle de la placa de policarbonato perforada, C) detalle de la parte inferior de la base de aluminio torneada en sección cónica, con el orificio de burbujeo y con la placa de policarbonato perforada e instalada (Gómez-Tagle et al., 2014).

2.3. Dinámica del agua en medios porosos

2.3.1. Ley de Darcy

La Ley de Darcy describe el experimento que se llevó a cabo en una columna vertical llena de arena completamente saturada de agua. Darcy demostró que el flujo de agua a través de la columna de suelo era proporcional a la diferencia de carga hidráulica, $H_1 - H_2$, ver figura 2.8. La constante de proporcionalidad entre la tasa de flujo y el gradiente de flujo se conocen como conductividad

hidráulica saturada, K_s (Shukla, 2013).



Figura 2.8: Flujo de agua a través de un perfil tridimensional que representa cabezas potenciales en la entrada y salida a través de un volumen de suelo de longitud L. Suponiendo que la referencia está sobre el eje x, la cabeza hidráulica total en la entrada es $H_1 = H_2 + L + h$, y altura hidráulica a la salida H_2 .

En el experimento de Darcy, la tasa de flujo volumétrico del agua Q que sale del fondo de un perfil de suelo saturado durante el flujo unidimensional está dada por

$$Q = -K_s A \frac{H_1 - H_2}{L},$$
(2.3.4)

donde A es el área de la sección transversal a través de la cual tiene lugar el flujo, L es la longitud de la columna de suelo (cm) a través de la cual tiene lugar el flujo, h es la columna de agua sobre la superficie del suelo. En está ecuación, las unidades del caudal volumétrico Q son cm³s⁻¹, la conductividad hidráulica K cm s⁻¹ y de las cabezas de entrada y salida H_1 y H_2 con cm.

El signo negativo indica que el flujo de el agua se lleva de un área con mayor potencial a un área con menor potencial. En la ecuación (2.3.4) el flujo por unidad de área es $\frac{Q}{A} = q$. En esta notación, la ley de Darcy en tres dimensiones se escribe como

$$q_x = -K_{sx}\frac{\partial H}{\partial x}, \ q_y = -K_{sy}\frac{\partial H}{\partial y}, \ q_z = -K_{sz}\frac{\partial H}{\partial z},$$
(2.3.5)

donde K_{sx} , K_{sy} y K_{sz} son las conductividades hidráulicas en x, y y z, respectivamente. Su forma vectorial está descrita de la siguiente manera:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}_{\mathbf{s}} \cdot \nabla H, \tag{2.3.6}$$

donde

$$\mathbf{K}_{\mathbf{s}} = \begin{pmatrix} K_{sx} & 0 & 0\\ 0 & K_{sy} & 0\\ 0 & 0 & K_{sz} \end{pmatrix}.$$
 (2.3.7)

2.3.2. Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad describe la conservación de la cantidad de fluido a través de un volumen, en nuestro caso, en un medio poroso tridimensional. El fluido que entra y sale de un volumen V por unidad de tiempo t, está dado por $\int \mathbf{q} \, dA$, donde la integral se realiza en el área A que circunda el volumen. Aplicando la ley de Gauss, esta integral es $\int \nabla \cdot \mathbf{q} \, dV$, y cuantifica el agua que entra y sale del sistema. Por otro lado, el cambio de masa del fluido en el volumen por unidad de tiempo es $\int \frac{\partial \theta}{\partial t} \, dV$ (Munson et al., 2004). La ecuación de continuidad establece que el cambio en el volumen de agua del volumen total se debe a la entrada y salida de ella a través de sus fronteras, es decir,

$$\int \frac{\partial \theta}{\partial t} \, dV = -\int \nabla \cdot \mathbf{q} \, dV$$

donde el signo menos explica la convención de que hay un aumento en la cantidad de agua cuando los vectores de flujo y el normal a la superficie tienen sentido contrario. Dado que la expresión es válida para cualquier volumen entonces

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q}. \tag{2.3.8}$$

Para flujo saturado, la tasa de cambio del contenido de agua con respecto al tiempo es cero, ver figura 2.9.



Figura 2.9: Ecuación de continuidad para el agua que entra y sale de un suelo.

2.3.3. Ecuación de Richards

El movimiento del agua a través de suelos no saturados puede ser presentado por un ecuación diferencial parcial no lineal también conocida como la ecuación de Richards. Está ecuación se deduce al aplicar la ley de Darcy (2.3.6) junto con la ecuación de continuidad (2.3.8) para un suelo no saturado. Al hacer esto se obtiene

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial H}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial H}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial H}{\partial z} \right].$$
(2.3.9)

Despreciando el potencial de presión y el osmótico, la carga hidráulica solo depende del potencial matricial y gravitacional, es decir, $H = \psi_m + \psi_g$. Usando la ecuación (2.1.2) que establece que el potencial gravitatorio actúa en la dirección $-\mathbf{e}_z$, el flujo en la vertical es $q_z = -K_z \left(\frac{\partial \psi_m}{\partial z} + 1\right)$ y la ecuación (2.3.9) es

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial\psi_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial\psi_m}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial\psi_m}{\partial z} \right] + \frac{\partial K_z}{\partial z}.$$
 (2.3.10)

A (2.3.10) se le conoce como ecuación de Richards, e involucra al contenido volumétrico θ , el potencial mátrico ψ_m y las conductividades hidráulicas K_x , K_y y K_z . Es importante mencionar que la ecuación Richards sirve para modelar cualquier proceso que involucre infiltración en suelo.

Si suponemos que la conductividad K es la misma en todas las direcciones y si definimos a

$$D = K \frac{d\psi_m}{d\theta} \tag{2.3.11}$$

como la difusividad del agua, la ecuación (2.3.10) se puede reescribir en términos del contenido volumétrico θ como

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial\theta}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D \frac{\partial\theta}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D \frac{\partial\theta}{\partial z} \right] + \frac{\partial K}{\partial z}.$$
(2.3.12)

Dado que los parámetros K y ψ_m son funciones de θ en (2.3.11), la ecuación de Richards es no lineal difícil de resolver, principalmente para cambios de tensiones grandes que provocan rigidez. Para reducir esta dificultad se puede linealizar la ecuación como se muestra en el siguiente apartado.

Cabe señalar que al aproximar la solución de la ecuación de Richards se pueden utilizar métodos de linealización como son: el método de Newton (también llamado Newton-Raphson en la literatura), el método de Picard, el método de Picard modificado, el método de Picard acelerado, el L-esquema y una combinación de ellos (List, 2016). En el caso que se modele un proceso donde aparezca rigidez además se deben usar estrategias numéricas para captar esa rigidez.

2.4. Modelos de Warrick y Wooding

La linealización de la ecuación de Richards (2.3.12) se logra al utilizar el cambio de variable, conocido como transformación de Kirchhoff

$$\Theta = \int D \, d\theta, \qquad (2.4.13)$$

donde Θ es el potencial del flujo matricial. Esta identidad junto con la ecuación (2.3.11) permite obtener las siguientes relaciones:

$$d\Theta = D \, d\theta \, \mathbf{y} \, K d\psi_m = d\Theta \tag{2.4.14}$$

En la ecuación (2.4.13) observamos que si D es una constante se tiene que el potencial de flujo matricial es proporcional al contenido volumétrico de agua siempre y cuando los cambios de tensión sean pequeños, ver ecuación (2.4.14).

De la relación (2.4.14) junto con la ecuación de Gardner (2.1.3) e integrar de $-\infty$ a ψ_m se llega a

$$\Theta = \int_{-\infty}^{\psi_m} K_s e^{\alpha \psi_m} d\psi_m = \frac{K}{\alpha}, \qquad \alpha > 0.$$
(2.4.15)

Al sustituir (2.4.14) y (2.4.15) en la ecuación de Richards (2.3.10) y usar $\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial \Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial t} = D^{-1} \frac{\partial \Theta}{\partial t}$ se obtiene la ecuación

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = D\nabla^2 \Theta + D\alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z}.$$
(2.4.16)

Esta relación es conocida como la ecuación de Warrick (Warrick, 1974) y se usa para entender la infiltración en el caso no estacionario. Constituye la aproximación lineal de la ecuación de Richards (2.3.10) y tiene la ventaja de depender de una sola variable Θ . Es costumbre escribir está ecuación en términos del parámetro κ definido como

$$\kappa = \frac{dK}{d\theta}.\tag{2.4.17}$$

De la definición (2.4.17) junto con (2.4.14) y (2.4.15) se puede derivar que $D = \frac{\kappa}{\alpha}$. En estos términos, la ecuación de Warrick (2.4.16) es

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\kappa}{\alpha} \nabla^2 \Theta + \kappa \frac{\partial \Theta}{\partial z}.$$
(2.4.18)

Cuando se tiene el estado estacionario, es decir, $\frac{\partial \Theta}{\partial t} = 0$ se recupera la ecuación de Wooding (Wooding, 1968)

$$-\alpha \frac{\partial \Theta}{\partial z} = \nabla^2 \Theta. \tag{2.4.19}$$

Para establecer las condiciones de frontera de nuestro problema, es conveniente escribir la ecuación de Warrick como una ecuación de conservación

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J},\tag{2.4.20}$$

donde J es el flujo de agua y tiene unidades de volumen por unidad de área y tiempo. Al comparar con (2.4.18) se identifica que

$$\mathbf{J} = -\frac{\kappa}{\alpha} \nabla \Theta - \kappa \Theta \mathbf{e}_z. \tag{2.4.21}$$

Capítulo

Problema de estudio

El objetivo de este trabajo es modelar cómo ocurre la infiltación de agua dentro de una columna de suelo usando el modelo de Warrick. Por ello, se utilizan los datos experimentales de (Pulido, 2019) donde se toman tres muestras de diferentes tipos de uso de suelo en la Sierra Gorda de Querétaro asociados a distintas actividades humanas: Bosque, Acahual y Agostadero.

La infiltración de agua en las muestras de suelo se estudia mediante el infiltrómetro de tensión en el cual la cantidad de agua infiltrada se registra en función del tiempo. Los detalles del experimento se describen en el primer apartado del capítulo. Después se presenta la modelación de este infiltrómetro usando la ecuación de Warrick y las condiciones inicial y de frontera apropiadas para resolverlo numéricamente. Esto nos permitirá comparar con las curvas experimentales y obtener parámetros de importancia ecológica. Dado que del modelo de estudio no se puede obtener una solución analítica, en el último apartado se deduce la solución de un problema para una fuente puntual que es similar a aquel que se está estudiando y que servirá para validar el programa desarrollado, ver capítulo 5.

3.1. Datos experimentales

Justificación y lugar de estudio

La reserva de la biósfera de la Sierra Gorda de Querétaro está ubicada en el norte del estado de Querétaro entre los paralelos 20°50' y 21°45' de latitud norte y los meridianos 98°50' y 100°10' de longitud oeste, con una extensión de 383,567-44-87.5 ha, lo que representa el 32.2 % del territorio total del estado.

El suelo predominante en el reserva es un litosol de color negro o gris muy oscuro, con alto contenido de nutrientes y presenta desde 10 cm de profundidad en laderas y pendientes abruptas con alto riesgo de erosión, hasta 50 cm en los valles (Bayona et al., 2006). También los hay de color rojizo o amarillo ácido, con pedregosidad superficial, que se asocian con suelos secundarios de tipo litosoles, rendzinas, feozem y en algunas partes, cambisoles calcáreos. Estas asociaciones presentan texturas de medias a

24

finas, migajosas y arcillosas. La reserva pertenece a la región hidrológica del río Pánuco (RH-26). El área se divide en dos cuencas: la del río Tampaón o Tamuín y el río Moctezuma. La primera ocupa una extensión de 2,038km² de la reserva, siendo su principal afluente el río Extoraz (Mendoza-Villa et al., 2018).

Esta zona es de interés debido a su fuerte influencia en la infiltración de agua por las precipitaciones intensas, que ocurre a causa del efecto de sombra orográfica y el efecto Coriolis, jugando un papel clave en las actividades agrícolas y ganaderas.

Generalidades del experimento

El sitio de estudio está ubicado en la comunidad de Ojo de Agua, San Francisco en el municipio de Jalpan de Sierra en el estado de Querétaro. Allí se escogieron tres puntos de muestreo, un bosque primario (bosque con vegetación primaria) de coordenadas 21°33'06.8 N de latitud con 99°11'50.10" O de longitud y 1247 msnm (metros sobre el nivel del mar), un Acahual (bosque de vegetación secundaria) ubicado en las coordenadas 21°33'11.00" N de latitud con 99°11'43.90" O de longitud y 1251 msnm. Por último, un Agostadero de coordenadas 21°33'13.60" N con 99°11'42.50" O y 1259 msnm (Bayona et al., 2006).

La extracción de las muestras consiste en enterrar un tubo de PVC de radio r_1 = 0.075 m y z_A = 0.13 m de alto en el horizonte superficial del suelo, para luego extraerlo procurando no dañar la estructura del suelo. Una vez que se extrae la columna de suelo, se marca una flecha que apunta al fondo del suelo para replicar la orientación en el experimento de laboratorio. Finalmente, la muestra se envuelve con papel de aluminio y se coloca en una bolsa de plástico. Se extrajeron 7 columnas que se usarán para comparar con el modelo de estudio: 3 del Bosque, 2 del Acahual y 2 del Agostadero.

Para medir la infiltración en cada muestra en el laboratorio, se utiliza un filtro de tensión INDI. Las condiciones para el infiltrómetro, así como el protocolo utilizado para el análisis de datos siguen el estándar establecido en (Gómez-Tagle et al., 2014). Para ello, en el infiltrómetro se recomienda usar un mínimo de tres tensiones en diferentes tiempos para la aplicación exitosa de la solución por Logsdon y Jaynes en el cálculo de la conductividad hidráulica (Logsdon, 1993).

Debido a lo anterior, se emplearon las tensiones correspondientes a $\psi_{m_0} = 0.0 \text{ m}$, $\psi_{m_1} = -0.03 \text{ m}$, $\psi_{m_2} = -0.07 \text{ m}$ y $\psi_{m_3} = -0.14 \text{ m}$ para ajustar el tubo Mariotte en orden ascendente, de ψ_{m_3} a ψ_{m_0} , según el protocolo de tensión dado por

$$\psi_m(t) = \sum_{t=0}^3 \psi_{m_i} \text{unit}(t_{i+1}, t_i), \qquad (3.1.1)$$

donde unit (t_{i+1}, t_i) es una función que es 1 entre los tiempos t_i y t_{i+1} con i = 0, 1, 2, 3 y 0 fuera de este intervalo. Los cambios de tensión se realizaron cuando los flujos se vuelven constantes en cada

ψ_m (m)	Bosque (s)	Acahual (s)	Agostadero (s)
-0.14	6411.6 ± 3247.2	9194.4 ±2228.4	7736.4 ± 2476.8
-0.07	4104 ± 1134	6332.4 ± 1159.2	7038 ± 637.2
-0.03	3510 ± 1854	3584.16 ± 867.6	3906 ± 673.2
0	1712.16 ± 1267.2	2965.68 ± 3178.8	4496.4 ± 2847.6

uno de los intervalos (Gómez-Tagle et al., 2014). Los tiempos para cada una de las muestras está reportado en el cuadro 3.1. Este tipo de protocolo de tensión se gráfica en la figura 3.1.

Cuadro 3.1: Tiempos para cambiar las tensiones en la ecuación (3.1.1).



Figura 3.1: Función por partes que representa el protocolo de tensión en la ecuación (3.1.1).

Resultados experimentales

Con base al protocolo anterior, se realizó el experimento de infiltración para los tres tipos de suelo, donde se registró el agua infiltrada en función del tiempo. En la figura 3.2 se exponen los resultados que representan los valores promedio de las muestras para cada uso de suelo diferente (3 para el Bosque, 2 para el Acahual y 2 para el Agostadero).



Figura 3.2: Curvas de infiltración experimental para los tres usos del suelo.

Se observa que la mayor infiltración está en el Bosque, seguido del Acahual y la más baja se encontró en el Agostadero.

De acuerdo al manual (Gómez-Tagle et al., 2014), esta información permite obtener propiedades hidrofísicas del suelo como la constante de Gardner α y la conductividad hidráulica saturada K_s . Los valores promedio de α y K_s obtenidos para cada tipo de suelo se presentan en el cuadro 3.2.

Muestra (m)	$K_s ({\rm ms}^{-1})$	α (m ⁻¹)
Bosque	4.84×10^{-5}	6.57
Acahual	2.84^{-5}	9.27
Agostadero	1.70^{-6}	1.94

Cuadro 3.2: Mediciones experimentales de la conductividad hidráulica saturada K_s y constante de Gardner α .

Estos datos experimentales se utilizan para ajustar las curvas de conductividad de Gardner K en función del potencial matricial ψ_m , ver figura 3.3.



Figura 3.3: Curva de Gardner para los tres diferentes usos del suelo.

3.2. Modelo

La dinámica del agua del suelo en la zona no saturada es fundamental para el ciclo hidrológico de los ecosistemas con vegetación. La capacidad de modelar la humedad del suelo y su interacción con la vegetación tiene aplicaciones importantes en el clima, agricultura y manejo de ecosistemas (Daly, 2005).

El modelo más utilizado es la ecuación de Richards (2.3.10), que combina la ley de Darcy extendida a suelos no saturados con la ecuación de continuidad. Si las curvas de saturación $\theta(\psi_m)$ y $K(\psi_m)$ se conocen de los experimentos, la ecuación de Richards (2.3.10) puede resolverse directamente por métodos numéricos. Sin embargo, en nuestro caso no es así, y la información experimental debe deducirse de otra manera.

Como vimos en el capítulo anterior, para cambios de tensión pequeños, se puede hacer una linealización de la ecuación de Richards (2.3.10) utilizando la transformada de Kirchhoff, asumiendo que la conductividad hidráulica es una función exponencial (Modelo de Gardner) y la relación $\kappa = \frac{dK}{d\theta}$. Esto nos permite encontrar la ecuación Warrick

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\kappa}{\alpha} \nabla^2 \Theta + \kappa \frac{\partial \Theta}{\partial z}$$

en la que Θ es conocida como el potencial de flujo matricial de dimensiones m²s⁻¹ y donde las unidades de α y κ son m⁻¹, ms⁻¹ respectivamente. Está ecuación describe la dinámica del agua en el

suelo en un régimen limitado de tensiones si se conocen las condiciones de contorno y los parámetros α y κ . En nuestro caso los valores de α ya están reportados en el cuadro 3.2 y los valores de κ se encontrarán haciendo los ajustes del flujo en función del tiempo y que explicaremos en el capítulo 6.

Condición de frontera

Se modelará la infiltración de agua en la columna de suelo. Por ello, se considera como dominio espacial al cilindro de la figura 3.4. Para modelar lo que ocurre en el interior se aplican distintos tipos de condiciones de frontera. Por la geometría del dominio usaremos las coordenadas cilíndricas $r, \varphi y$ z. Cabe mencionar que para el protocolo establecido en (3.1.1), las condiciones de contorno dependen del tiempo, ya que las tensiones en la parte superior de la columna de suelo cambian también.



Figura 3.4: Condiciones de frontera para el infiltrómetro de tensión con una base de radio r_0 . La columna del suelo con radio r_1 y altura z_A .

Sobre la región húmeda S_1 , el valor de la función de Kirchoff está determinado por la tensión dependiente del tiempo. Por tanto, de (2.4.15), en esta región tenemos

$$\Theta(r,\varphi,z_A,t) = \Theta_0 e^{\alpha \psi_m(t)},$$

donde hemos utilizado el valor de referencia $\Theta_0 = \frac{K_s}{\alpha}$, ver figura 3.4.

Sobre la superficie S_2 , suponiendo que la evaporación es insignificante, la componente vertical de la velocidad alcanza $q_z = 0$. Por la ley de Darcy, esto implica que $\frac{\partial \Theta}{\partial z} = -K$. Sin embargo, en el caso de poca húmedad, en la igualdad anterior se puede utilizar la relación (2.4.15) para obtener

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z} = -\alpha \Theta$$

Para la columna que estamos considerando, el suelo está rodeado por una pared sólida donde el flujo es nulo. En este caso, tenemos que la componente radial de la velocidad es nula $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_r = 0$. Usando la ley de Darcy, esto es $K \nabla \psi_m \cdot \mathbf{e}_r = 0$, o equivalentemente, en la superficie S_3

$$\frac{\partial \Theta}{\partial r}(r,\varphi,z,t) = 0.$$

Por último, en la parte inferior de la columna de suelo se encuentra una malla apretada y delgada para evitar que la tierra descienda. Así que en la base, la superficie S_4 , no hay potencial de agua, $\theta = 0$, es decir, se considera que la columna es larga que no se alcanza a salir el agua. Esto implica que

$$\Theta(r,\varphi,z,t) = 0.$$

Por lo tanto, el modelo de estudio a resolver

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \qquad (r, \varphi, z) \in [0, r_1] \times [0, 2\pi] \times [0, z_A], \ t > 0, \qquad (3.2.2)$$

sujeto a las condiciones de contorno

$$S_1: \Theta(r, \varphi, z_A, t) = \frac{1}{\alpha} K_s e^{\alpha \psi_m(t)}, \qquad (r, \varphi) \in [0, r_0] \times [0, 2\pi], t > 0, \qquad (3.2.3)$$

$$S_2: \frac{\partial \Theta(r, \varphi, z_A, t)}{\partial z} = -\alpha \Theta, \qquad (r, \varphi) \in [r_0, r_1] \times [0, 2\pi], \ t > 0, \qquad (3.2.4)$$

$$S_3: \frac{\partial \Theta(r_1, \varphi, z, t)}{\partial r} = 0, \qquad (\varphi, z) \in [0, 2\pi] \times [0, z_A], t > 0, \qquad (3.2.5)$$

$$S_4: \Theta(r, \varphi, 0, t) = 0, \qquad (r, \varphi) \in [0, r_1] \times [0, z_A], t > 0 \qquad (3.2.6)$$

y la condición inicial

$$\Theta(r,\varphi,z,0) = 0, \qquad (r,\varphi,z) \in [0,r_1] \times [0,2\pi] \times [0,z_A], \qquad (3.2.7)$$

 $\cos \psi_m(t)$ descrita en la relación (3.1.1).

3.3. Solución Analítica para una fuente puntual

Cabe mencionar que el modelo (2.4.18) con condiciones de frontera (3.2.3)-(3.2.6) y condición inicial (3.2.7) no tiene solución analítica. Para comprobar la validez de nuestro código compararemos con la solución analítica de un modelo similar propuesto en 1974 por Warrick (Warrick, 1974) para una fuente puntual en el origen y dominio semi-infinito z > 0, ver figura 3.5. En este caso, la dirección z positiva se considera hacia abajo.



Figura 3.5: Representación del modelo propuesto por Warrick (1974) para una fuente puntual en el origen.

Warrick (Warrick, 1974), basándose en los estudios de Philip (Philip, 1971) y los resultados de Carslaw y Jaeger (Carslaw, 1959), planteó el siguiente problema: Sea

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\kappa}{\alpha} \nabla^2 \phi - \kappa \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\kappa}{\alpha} q \delta(x - 0) \delta(y - 0) \delta(z - 0), \qquad -\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, z > 0,$$
(3.3.8)

sujeta a la condición de frontera

$$-\frac{\partial\phi}{\partial z} + \alpha\phi = 0, \text{ en } z = 0, \tag{3.3.9}$$

y la condición inicial

$$\phi(x, y, z, 0) = 0. \tag{3.3.10}$$

Con el objetivo de conseguir la solución del problema se transforma la ecuación (3.3.8) a la ecuación de calor no homogéneo con el cambio de variable $\hat{z} = z - \kappa t$. Entonces

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\kappa}{\alpha} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \hat{z}^2} \right) + \frac{\kappa}{\alpha} q \delta(x-0) \delta(y-0) \delta(\hat{z}+\kappa t).$$
(3.3.11)

Para obtener la solución de este problema, primero se usará la solución del Apéndice C.2 que consta de resolver la misma ecuación (3.3.11) y condición inicial (3.3.10), pero en un medio infinito. En dicha solución (C.2.12) usamos $D = \frac{\kappa}{\alpha} y g(\tau) = \frac{\kappa}{\alpha} q$, luego la solución para un medio infinito ϕ_B es

$$\phi_B(x,y,\hat{z},t) = \int_0^t \frac{\frac{\kappa}{\alpha}q}{8\left(\pi\frac{\kappa}{\alpha}(t-\tau)\right)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{x^2+y^2+(\hat{z}+\kappa\tau)^2}{4\frac{\kappa}{\alpha}(t-\tau)}} d\tau.$$

Regresando a la variable original, se tiene

$$\phi_B(x, y, z, t) = \int_0^t \frac{\sqrt{\alpha}q}{8\sqrt{\kappa} \left(\pi(t-\tau)\right)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{x^2 + y^2 + (z-\kappa(t-\tau))^2}{4\frac{\kappa}{\alpha}(t-\tau)}} d\tau.$$

Por simetría axial, consideramos el plano semiinfinito descrito en la figura 3.5. Tomando $r^2 = x^2 + y^2$ y definiendo $\top = t - \tau$, la ecuación anterior se escribe como

$$\phi_B(r,z,t) = \int_0^t \frac{\sqrt{\alpha}q}{8\sqrt{\kappa} (\pi\top)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-[r^2+z^2]}{4\frac{\kappa}{\alpha}} + \frac{2\kappa\tau z - (\kappa\tau)^2}{4\frac{\kappa}{\alpha}}} d\tau.$$

Definimos $R^2 = r^2 + z^2$ y $\xi^2 = \frac{\alpha R^2}{4\kappa \top}$, de lo cual se obtiene $2\xi d\xi = \frac{-\alpha R^2}{4\kappa \top^2} d\top$ y $\frac{\alpha(\kappa \top)^2}{4\kappa \top} = \frac{\alpha^2 R^2}{16\xi^2}$. Como $\top = t - \tau$, entonces $\frac{4\sqrt{\kappa} \top^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\alpha}R} d\xi = d\tau$. Usando estos cambios resulta

$$\phi_B = \frac{q}{2(r^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}(\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{\alpha z}{2}} \int_{\sqrt{\frac{\alpha(r^2 + z^2)}{4\kappa t}}}^{\infty} e^{-\xi^2 - \frac{\alpha^2(r^2 + z^2)}{16\xi^2}} d\xi.$$
(3.3.12)

Es convención trabajar esta solución en coordenadas adimensionales. Para ello, se definen las variables adimensionales siguientes:

$$R = \frac{\alpha r}{2}, \qquad \qquad Z = \frac{\alpha z}{2}, \qquad \qquad T = \frac{\alpha \kappa t}{4}, \qquad \qquad \Phi_B = \frac{8\pi \phi_B}{\alpha q}. \tag{3.3.13}$$

Empleando las identidades (3.3.13) en la solución (3.3.12), se deduce el potencial de flujo adimensional como

$$\Phi_B = \frac{2e^Z}{\sqrt{\pi\rho}} \int_{\frac{\rho}{2\sqrt{T}}}^{\infty} e^{-\xi^2 - \frac{\rho^2}{4\xi^2}} d\xi, \qquad (3.3.14)$$

donde $\rho^2 = R^2 + Z^2$.

Para simplificar esta solución se puede utilizar el siguiente resultado dado en (Abramowitz, 1964):

$$\int e^{-a^2x^2 - \frac{b^2}{x^2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a} \left[e^{2ab} erf\left(ax + \frac{b}{x}\right) + e^{-2ab} erf\left(ax - \frac{b}{x}\right) \right] + const.$$
(3.3.15)

Usando esta expresión para la integral de la ecuación (3.3.14) y las propiedades de las funciones de error se llega a

$$\Phi_B = \frac{e^Z}{2\rho} \left[e^{\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} + \sqrt{T}\right) + e^{-\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} - \sqrt{T}\right) \right].$$
(3.3.16)

Dado que $\lim_{w\to\infty} \operatorname{erfc}(w) = 0$ y $\lim_{w\to-\infty} \operatorname{erfc}(w) = 2$ cuando $T \to \infty$, la ecuación (3.3.16) en el límite de estado estacionario se reduce a

$$\lim_{T \to \infty} \Phi_B = \frac{e^Z}{2\rho} \left[e^{\rho} \lim_{T \to \infty} \operatorname{erfc}\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} + \sqrt{T}\right) + e^{-\rho} \lim_{T \to \infty} \operatorname{erfc}\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} - \sqrt{T}\right) \right],$$
$$= \frac{e^Z}{2\rho} \left[e^{\rho}(0) + e^{-\rho}(2) \right] = \frac{e^Z}{2\rho} \left[2e^{-\rho} \right] = \frac{e^{Z-\rho}}{\rho},$$

que es la solución para un tiempo muy grande.

Recordemos que Φ_B no cumple la condición de frontera (3.3.9) porque está dada para un medio infinito. Para encontrar la solución que cumpla (3.3.9), primero observemos que la parcial con respecto a Z de Φ_B es

$$\frac{d\Phi_B}{dZ} = \Phi_B - \frac{Ze^Z}{2\rho^{\frac{3}{2}}} \left[e^{\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} + \sqrt{T}\right) + e^{-\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} - \sqrt{T}\right) \right] \\
+ \frac{e^Z}{2\rho} \left[\frac{Z}{\rho} \left(e^{\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} + \sqrt{T}\right) - e^{-\rho} erfc\left(\frac{\rho}{2\sqrt{T}} - \sqrt{T}\right) - \frac{1}{\sqrt{\pi T}} \left(e^{\frac{\rho}{2} - \frac{\rho^2}{4T} - T} + e^{-\frac{\rho}{2} - \frac{\rho^2}{4T} + T} \right) \right) \right].$$
(3.3.17)

Por tanto, la cantidad

$$\Phi_B - \frac{d\Phi_B}{dZ} = 0 \tag{3.3.18}$$

a lo largo de Z = 0 tiende a cero cuando $\rho \to \infty$ para cualquier Z.

Para entender la relación de la ecuación (3.3.18) con la condición de frontera $-\frac{\partial \phi}{\partial z} + \alpha \phi = 0$, la escribiremos en coordenadas adimensionales dada por $\Phi = \frac{8\pi\phi}{\alpha q}$ y $Z = \frac{\alpha z}{2}$. En estas variables la ecuación (3.3.9) es

$$\Phi - \frac{1}{2}\frac{\partial\Phi}{\partial Z} = 0. \tag{3.3.19}$$

Dado que las ecuaciones (3.3.18) y (3.3.19) son igual a cero, podemos obtener

$$\Phi - \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial Z} = \Phi_B - \frac{\partial \Phi_B}{\partial Z}$$

Esta ecuación establece una relación entre la solución en un medio infinito Φ_B y la solución que buscamos en un medio semi-infinito Φ . Esta relación se puede reescribir como

$$\frac{1}{2}e^{2Z}\frac{\partial}{\partial Z}\left[e^{-2Z}\Phi(Z)\right] = e^{Z}\frac{\partial}{\partial Z}\left[e^{-Z}\Phi_{B}(Z)\right].$$

Al reordenar e integrar en ambos lado con respecto a \mathcal{Z} , se llega a

$$\int_{\infty}^{Z} \frac{\partial}{\partial \mathcal{Z}} \left[e^{-2\mathcal{Z}} \Phi(\mathcal{Z}) \right] d\mathcal{Z} = \int_{\infty}^{Z} 2e^{-\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{Z}} \left[e^{-\mathcal{Z}} \Phi_{B}(\mathcal{Z}) \right] d\mathcal{Z},$$

donde en el lado izquierdo se usa el teorema fundamental del cálculo y en el lado derecho integración por partes. Finalmente resolviendo para Φ se tiene

$$e^{-2Z}\Phi - \lim_{\mathcal{Z}\to\infty} e^{-2\mathcal{Z}}\Phi = 2\left[e^{-Z}e^{-Z}\Phi_B - \lim_{\mathcal{Z}\to\infty} e^{-2\mathcal{Z}}\Phi_B + \int_{\infty}^{Z} e^{-2\mathcal{Z}}\Phi_B d\mathcal{Z}\right],$$

$$\Phi = 2\left[\Phi_B - e^{2Z}\int_{Z}^{\infty} e^{-2\mathcal{Z}}\Phi_B d\mathcal{Z}\right].$$
(3.3.20)

La Φ representa la solución del problema de la fuente puntual en el origen (3.3.8) con condición inicial (3.3.10) y de frontera (3.3.9) en un medio semiinfinito ($Z > 0, R \in [0, \infty]$). Esta depende de Φ_B dada en (3.3.16) en variables adimensionales.

Para entender los perfiles que aporta la solución (3.3.20), se realizan 6 pruebas utilizando nuestro programa F.1 para comparar las soluciones Φ con las publicadas por Warrick (Warrick, 1974). La figura 3.6 compara las curvas de nivel para $\Phi = 0.5, 1 \text{ y } 2$, en tiempos pequeños (gráficas a, c y e) y grandes (gráficas b, d y f). Se superponen nuestras soluciones de F.1 (líneas continuas) con las prediciones de Warrick (líneas discontinuas). Se contempla que solamente hay pequeñas discrepancias entre las dos soluciones, lo que confirma que hemos reproducido correctamente la solución analítica de Warrick.







Figura 3.6: Comparación de la forma y avance del potencial de flujo matricial adimensional $\Phi = 0.5, 1, 2$ para una fuente puntual.

Para establecer la solución estacionaria para tiempos grandes, se procede a desarrollar los cálculos siguientes:

$$\begin{split} \Phi_s &= \lim_{T \to \infty} 2 \left[\Phi_B - e^{2Z} \int_Z^\infty e^{-2Z} \Phi_B d\mathcal{Z} \right] = 2 \left[\lim_{T \to \infty} \Phi_B - e^{2Z} \int_Z^\infty e^{-2Z} \lim_{T \to \infty} \Phi_B d\mathcal{Z} \right], \\ \Phi_s &= 2 \left[\frac{e^{Z-\rho}}{\rho} - e^{2Z} \int_Z^\infty e^{-2Z} \frac{e^{Z-\rho}}{\rho} d\mathcal{Z} \right] = 2 \left[\frac{e^{Z-\rho}}{\rho} - e^{2Z} \int_Z^\infty \frac{e^{-(Z+\rho)}}{\rho} d\mathcal{Z} \right], \end{split}$$

definiendo $\beta = \mathcal{Z} + \rho$ y $d\beta = \frac{\beta}{\rho}\,d\mathcal{Z}$ entonces

$$\Phi_s = 2 \left[\frac{e^{Z-\rho}}{\rho} - e^{2Z} \int_{Z+\rho}^{\infty} \frac{e^{-\beta}}{\beta} d\beta \right],$$

$$\Phi_s = 2 \left[\frac{e^{Z-\rho}}{\rho} - e^{2Z} E_1(Z+\rho) \right],$$
(3.3.21)

donde $E_1(Z+\rho)$ es la integral exponencial y para estimarla se usa la ecuación (5.1.53) hasta la (5.1.56) de la referencia (Abramowitz, 1964). Cabe mencionar que las curvas obtenidas con Φ_s (3.3.21) son

equivalentes a las curvas presentada en las gráficas de la figura 3.6 con $T = \infty$.

Como se espera, la cantidad de agua avanza desde la fuente en el origen propagándose en todas direcciones y preferencialmente en z. En este caso no hay fronteras laterales o inferiores por lo que nuestro programa para un infiltrómetro tendrá perfiles solamente para tiempos cortos.
Capítulo

Método de elemento finito

En este capítulo se aproxima númericamente la solución del modelo (3.2.2)-(3.2.7) a través del método de elemento finito. Para ello, primero se definen los espacios funcionales y se desarrolla la formulación variacional. Después se realiza la discretización espacial usando elementos isoparamétricos bicuadráticos y el método de Crank-Nicolson para el tiempo.

4.1. Definición de espacios

Establecemos la terminología y la notación necesaria para introducir una formulación variacional. Se definen los espacios siguientes sobre $\Omega \in \mathbb{R}^d$ para $d \ge 1$:

Definición 1. El espacio de las funciones cuadrado integrables en Ω se definde como

$$L^{2}(\Omega) = \left\{ w : \Omega \to \mathbb{R} \middle| \int_{\Omega} |w(\mathbf{x})|^{2} d\Omega < \infty \right\},$$

dotado del producto interior

$$(u,w)_{L^2} = \int_{\Omega} u(\mathbf{x})w(\mathbf{x}) \, d\Omega,$$

cuya norma asociada está dada por

$$||w||_{L^2} = \left(\int_{\Omega} |w(\mathbf{x})|^2 \, d\Omega\right)^{\frac{1}{2}}$$

Definición 2. *El espacio de Sobolev* H^1 *sobre* Ω *se define como*

$$H^{1}(\Omega) = \left\{ w \in L^{2}(\Omega) \middle| \frac{\partial w}{\partial x_{i}} \in L^{2}(\Omega), \text{ para } i = 1, \dots, d. \right\},\$$

con producto interior y norma inducida, respectivamente,

$$(v,w)_{H^1} = \int_{\Omega} v(\mathbf{x})w(\mathbf{x}) \, d\Omega + \sum_{i=1}^d \int_{\Omega} \frac{\partial v(\mathbf{x})}{\partial x_i} \frac{\partial w(\mathbf{x})}{\partial x_i} \, d\Omega,$$
$$\|w\|_{H^1} = [(w,w)_{H^1}]^{\frac{1}{2}}.$$

Definición 3. Sea $\partial \Omega_D$ la frontera de Ω tal que contenga condiciones de contorno tipo Dirichlet. Se define el espacio $H_0^1(\Omega)$ como

$$H_0^1(\Omega) = \left\{ w \in H^1(\Omega) \middle| w(\mathbf{x}) = 0; \mathbf{x} \in \partial \Omega_D \right\},\$$

dotado con los mismos producto interior y norma de $H^1(\Omega)$.

4.2. Formulación variacional

Sea el dominio $\Omega_v = [0, r_1] \times [0, 2\pi] \times [0, z_A]$ el volumen del cilindro con frontera $\partial \Omega_v = \bigcup_{i=1}^4 S_i$, ver figura 3.4. En este caso $\partial \Omega_D = \partial S_1 \cup S_4$. Para obtener la formulación variacional del modelo consideremos funciones de prueba $w \in H_0^1(\Omega_v)$. La ecuación (3.2.2) se multiplica por w e integramos respecto a Ω_v

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \int_{\Omega_v} \nabla \cdot \mathbf{J} w \, d\Omega_v = 0, \qquad \forall w \in H^1_0(\Omega_v). \tag{4.2.1}$$

La fórmula de Green establece que

$$\int_{\Omega_v} (\nabla \cdot \mathbf{J}) w \, d\Omega_v = \int_S w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega_v} \mathbf{J} \cdot \nabla w \, d\Omega_v, \qquad (4.2.2)$$

donde la n es la normal exterior a la frontera $\partial \Omega_v$. Sustituyendo (4.2.2) en la ecuación (4.2.1) resulta

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \int_S w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega_v} \mathbf{J} \cdot \nabla w \, d\Omega_v = 0, \qquad \forall w \in H^1_0(\Omega_v).$$

Las condiciones de frontera (3.2.3)-(3.2.6) se describen en función del operador J como se muestra en la figura 4.1. De ahí observamos que las integrales de línea en S_2 y S_3 son igual a cero, entonces



Figura 4.1: Condiciones de frontera en función del flujo J.

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \int_{S1} w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{S4} w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega_v} \left(-\frac{\kappa}{\alpha} \nabla \Theta - \kappa \Theta \mathbf{e}_{\mathbf{z}} \right) \cdot \nabla w \, d\Omega_v = 0,$$

donde se utiliza la definición del operador de flujo (2.4.21).

Ahora, como $w(r, \varphi, z, t) = 0$ en $S_1 \cup S_4$, se obtiene

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_v} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, d\Omega_v + \kappa \int_{\Omega_v} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, d\Omega_v = 0. \tag{4.2.3}$$

Dado que Ω_v esta descrita en coordenadas cilíndricas se integra respecto a φ

$$\int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, r dr dz + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r dr dz + \kappa \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, r dr dz = 0.$$

Por símetria axial se puede trabajar solo en el dominio $\Omega = [0, r_1] \times [0, z_A]$, por lo cual el problema variacional relacionado con las ecuaciones (3.2.2)-(3.2.7) se reescribe como

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, r d\Omega + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r d\Omega + \kappa \int_{\Omega} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, r d\Omega = 0, \qquad \forall w \in H_0^1(\Omega), \tag{4.2.4}$$

con $drdz = d\Omega$ y las condiciones de frontera siguientes:

$$\Gamma_{1}:\Theta(r,z_{A},t) = \frac{1}{\alpha}K_{s}e^{\alpha\psi_{m}} \qquad r \in [0,r_{0}], t > 0$$

$$\Gamma_{2}:\frac{\partial\Theta(r,z_{A},t)}{\partial z} = -\alpha\Theta \qquad r \in [r_{0},r_{1}], t > 0$$

$$\Gamma_{3}:\frac{\partial\Theta(r_{1},z,t)}{\partial r} = 0 \qquad z \in [0,z_{A}], t > 0$$

$$\Gamma_{4}:\Theta(r,0,t) = 0 \qquad r \in [0,r_{1}], t > 0,$$

ver Figura 4.2.



Figura 4.2: Por símetria axial se tiene el dominio Ω en \mathbb{R}^2 , donde Γ_5 es una frontera computacional.

4.3. Discretización del problema variacional

La construcción geométrica de elementos finitos es una triangulación del dominio computacional Ω . Ésta consiste en hacer una partición del domino en un número finito de subconjuntos Ω_e , que satisfagan las propiedades siguientes:

- 1. $\Omega_h = \bigcup_{e=1}^{ne} \Omega_e$, donde *ne* es el número total de elementos y $\Omega_h \subset \overline{\Omega}$.
- 2. Para cada elemento $\Omega_e \in \Omega_h$, Ω_e es cerrado y el interior de Ω_e es diferente del vacío.

3. Para cada par de elementos Ω_{e_1} y Ω_{e_2} distintos, se tiene que

$$\Omega_{e_1} \cap \Omega_{e_2} = \begin{cases} \emptyset \\ \\ \text{una arista o un vértice en común.} \end{cases}$$

4. Para cada $\Omega_e \in \Omega_h$ la frontera $\partial \Omega_e$ es Lipschitz continua.

El tamaño de la malla está definido por $h := \max_{1 \le e \le ne} ||h_e||$, donde h_e es el diámetro del conjunto Ω_e (diámetro del círculo circunscrito al elemento Ω_e) (Johnson, 2012).

Definición 4. Un elemento finito se define como la tripleta $(\Omega_e, \mathbb{Q}_2(\Omega_e), \sum_e)$ donde

- a) Ω_e define la geometría del elemento.
- b) $\mathbb{Q}_2(\Omega_e)$ es el espacio de polinomios de grado menor o igual a 2 en cada una de las componentes de \mathbb{R}^2 restringido a Ω_e .
- c) \sum_{e} es el conjunto de grados de libertad en Ω_{e} . El número de grados de libertad coincide con el número de nodos en los elementos.

Sean W_h , $W_{h,0}$ subespacios de dimensión finita tales que

$$W_h = \{ w_h \in \mathbf{C}^0(\Omega) : w_h |_{\Omega_e} \in \mathbb{Q}_2(\Omega_e), \ \forall \Omega_e \in \Omega_h, \}, \\ W_{h,0} = \{ w_h \in W_h : w_h(r,z) = 0, \ \forall (r,z) \in \Gamma_1 \cup \Gamma_4 \},$$

donde $\overline{\Omega}$ es la cerradura de Ω y $\mathbf{C}^0(\overline{\Omega})$ es el espacio de funciones continuas en $\overline{\Omega}$. Lo que se desea es aproximar una función $\Theta \in H^1(\Omega)$ por medio de una función $\Theta_h \in W_h$.

Definimos nnt como el número de nodos totales o grados de libertad global del problema, entonces la dimensión del espacio W_h es igual a nnt.

El conjunto de funciones base de W_h es $\{\phi_j\}_{j=1}^{nnt}$, tal que cada función satisface que

$$\phi_j(r_i, z_i) = \begin{cases} 1, \text{ si } i = j, \\ 0, \text{ si } i \neq j, \end{cases}$$

donde (r_i, z_i) son las coordenadas del nodo *i*-ésimo, \mathbf{n}_i . En particular ϕ_j es distinta de cero en su soporte. Definimos al soporte de la función ϕ_j como el conjunto formado por todos los elementos Ω_e que contengan al nodo $\mathbf{n}_j = (r_j, z_j)$, ver figura 4.3.



Figura 4.3: Soporte de la función ϕ_j en el nodo \mathbf{n}_j .

Además por ser $\{\phi_j\}_{j=1}^{nnt}$ una base de $W_h, \Theta_h \in W_h$ entonces

$$\Theta_h(r, z, t) = \sum_{j=1}^{nnt} \Theta_j(t) \phi_j(r, z).$$
(4.3.5)

Al evualar Θ_h en (r_j, z_j) se tiene, por definición de ϕ_j que

$$\Theta_h(r_j, z_j, t) = \sum_{j=1}^{nnt} \Theta_j(t) \phi_j(r_j, z_j) = \Theta_j(t).$$

Observemos que $\{\phi_j\}_{j=1}^{nnt}$ también es una base de $W_{h,0}$. El problema (4.2.4) se convierte en un problema variacional discreto en el cual se debe encontrar $\Theta_h \in W_h$ tal que

$$\int_{\Omega_h} w_h \frac{\partial \Theta_h}{\partial t} r d\Omega + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_h} \nabla \Theta_h \cdot \nabla w_h r d\Omega + \kappa \int_{\Omega_h} \Theta_h \frac{\partial w_h}{\partial z} r d\Omega = 0, \quad \forall w_h \in W_h.$$
(4.3.6)

Al sustituir (4.3.5) y $w_h = \phi_i$ en la ecuación (4.3.6) se obtiene

$$\sum_{j=1}^{nnt} \frac{\partial \Theta_j(t)}{\partial t} \int_{\Omega_h} \phi_j \phi_i \, r d\Omega + \sum_{j=1}^{nnt} \Theta_j(t) \left\{ \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_h} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, r d\Omega + \kappa \int_{\Omega_h} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \phi_j \, r d\Omega \right\} = 0, \ (4.3.7)$$

por lo que, definimos las siguientes matrices:

$$M_{i,j} = \int_{0}^{z_A} \int_{0}^{r_1} \phi_j \phi_i \, r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt, \qquad (4.3.8)$$

$$A_{i,j} = \int_0^{z_A} \int_0^{r_1} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt, \qquad (4.3.9)$$

$$S_{i,j} = \int_0^{z_A} \int_0^{r_1} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \phi_j \, r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt.$$
(4.3.10)

Así, la ecuación (4.3.7) se puede escribir como

$$\sum_{j=1}^{nnt} M_{i,j} \frac{\partial \Theta_j(t)}{\partial t} + \sum_{j=1}^{nnt} \left\{ \frac{\kappa}{\alpha} A_{i,j} + \kappa S_{i,j} \right\} \Theta_j(t) = 0, \qquad \forall i, j = 1, 2, \dots, nnt.$$
(4.3.11)

El sistema de ecuaciones lineales (4.3.11) se escribe en notación matricial de la siguiente manera

$$M\frac{\partial \Theta(t)}{\partial t} + \left[\frac{\kappa}{\alpha}A + \kappa S\right]\Theta(t) = 0, \qquad (4.3.12)$$

con $\Theta(t) = [\Theta_1(t), \Theta_2(t), \dots, \Theta_{nnt}(t)]^T$. Por la propiedad de sumabilidad, las matrices (4.3.8)-(4.3.10) se reinscriben de la forma

$$M_{i,j} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} (\phi_j|_{\Omega_e}) (\phi_i|_{\Omega_e}) r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt,$$
(4.3.13)

$$A_{i,j} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \nabla(\phi_j|_{\Omega_e}) \cdot \nabla(\phi_i|_{\Omega_e}) r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt,$$
(4.3.14)

$$S_{i,j} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \frac{\partial(\phi_i|_{\Omega_e})}{\partial z} (\phi_j|_{\Omega_e}) r d\Omega; \qquad i, j = 1, 2, \dots, nnt.$$
(4.3.15)

donde $\phi_j|_{\Omega_e} \mathbf{y} \phi_i|_{\Omega_e}$ son funciones de forma definidas sobre Ω_e .

4.4. Funciones de forma

Si se restringen las funciones base ϕ_j y ϕ_i al elemento Ω_e se obtiene las funciones de forma $\phi_j|_{\Omega_e} = \psi_{\beta}^e, \phi_i|_{\Omega_e} = \psi_{\lambda}^e \operatorname{con} \lambda, \beta = 1, \dots, nne$, donde *nne* es el número de nodos del elemento. En este caso λ y β son los índices locales a diferencia de i,j que son índices globales. Dichas funciones de forma cumplen lo siguiente:

I.
$$\psi_{\lambda}^{e}(r_{\beta}, z_{\beta}) = \begin{cases} 1, & \text{si } \beta = \lambda, \\ 0, & \text{si } \beta \neq \lambda. \end{cases}$$

II. $\sum_{k=1}^{nne} \psi_{k}^{e}(r, z) = 1.$

Entonces, las matrices (4.3.13) a (4.3.15) del sistema de ecuaciones (4.3.12), se reescriben como

$$M = \sum_{e=1}^{ne} M^e \quad \text{con} \quad M^e_{\lambda,\beta} = \int_{\Omega_e} \psi^e_{\beta} \psi^e_{\lambda} r d\Omega; \qquad \lambda,\beta = 1,2,\dots,nne,$$
(4.4.16)

$$A = \sum_{e=1}^{ne} A^e \quad \text{con} \quad A^e_{\lambda,\beta} = \int_{\Omega_e} \nabla \psi^e_\beta \cdot \nabla \psi^e_\lambda r d\Omega; \qquad \lambda,\beta = 1, 2, \dots, nne,$$
(4.4.17)

$$S = \sum_{e=1}^{ne} S^e \quad \text{con} \quad S^e_{\lambda,\beta} = \int_{\Omega_e} \frac{\partial \psi^e_\beta}{\partial z} \psi^e_\lambda r d\Omega; \qquad \lambda,\beta = 1, 2, \dots, nne,$$
(4.4.18)

donde M^e, A^e, S^e son matrices elementales cuadradas.

En este trabajo se desarrolla el método de elementos finitos utilizando aproximaciones con polinomios de grado 2 en cada una de las componentes, a este elemento se le llama bicuadrático, es decir,

$$w_h^e(r,z) = a_1 + a_2r + a_3z + a_4rz + a_5r^2 + a_6z^2 + a_7r^2z + a_8rz^2 + a_9r^2z^2, \ w_h^e \in \mathbb{Q}_2(\Omega_e)$$

= $w_1\psi_1^e + w_2\psi_2^e + w_3\psi_3^e + w_4\psi_4^e + w_5\psi_5^e + w_6\psi_6^e + w_7\psi_7^e + w_8\psi_8^e + w_9\psi_9^e$

donde w_{λ} y ψ_{λ}^{e} , $\lambda = 1, ..., 9$ son los grados de libertad locales y las funciones bases locales asociadas al elemento Ω_{e} , respectivamente (Pepper, 2005). Se emplea la numeración local indicada en la figura 4.4. Cabe señalar que los elementos bicuadráticos son más precisos que los elementos lineales, en particular funcionan mejor en medios porosos (Sánchez, 2020).



Figura 4.4: Numeración de las funciones de forma para un cuadrilátero de 9 nodos.

4.5. Transformaciones isoparamétricas

Las integrales (4.4.16) a (4.4.18) se realizan para cada elemento Ω_e de la malla y dado que es difícil realizar las operaciones, se emplea un elemento de referencia $\hat{\Omega}$, el cual se relaciona con cada elemento

 Ω_e a través de una transformación T_e . Cuando el número de nodos del elemento de referencia $\hat{\Omega}$ es igual al número de nodos de cada elemento en T_e se le llama transformación isoparamétrica (Becker et al., 1981) y está definida por

$$T_e: \hat{\Omega} \longrightarrow \Omega_e,$$
 (4.5.19)

tal que

$$r = r(\xi, \eta) = \sum_{\substack{k=1\\nne}}^{nne} r_k \hat{\psi}_k(\xi, \eta),$$

$$z = z(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{nne} z_k \hat{\psi}_k(\xi, \eta),$$

(4.5.20)

donde $\hat{\psi}_k$ y (r_k, z_k) , $k = 1, \dots, nne$ son las funciones de forma del elemento de referencia $\hat{\Omega}$ y las coordenadas de los nodos de Ω_e , respectivamente. También cumplen que

I.
$$\hat{\psi}_{\lambda}(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}) = \begin{cases} 1, & \text{si } k = \lambda, \\ 0, & \text{si } k \neq \lambda. \end{cases}$$

II. $\sum_{k=1}^{nne} \hat{\psi}_{k}(\xi, \eta) = 1.$

Observemos que $T_e(\hat{\Omega}) = \Omega_e$, ver figura 4.5.



Figura 4.5: Transformación Isoparamétrica T_e.

Las funciones de forma para el elemento de referencia bicuadrático se presentan en el cuadro 4.1. La figura 4.6 muestra la numeración local en el elemento de referencia.

	Funciones de forma	
$\hat{\psi}_1 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 - \eta)$	$\hat{\psi}_2 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 - \eta)$	$\hat{\psi}_3 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 + \eta)$
$\hat{\psi}_4 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 + \eta)$	$\hat{\psi}_5 = \frac{1}{2}(1-\xi^2)(\eta^2 - \eta)$	$\hat{\psi}_6 = \frac{1}{2}(\xi^2 + \xi)(1 - \eta^2)$
$\hat{\psi}_7 = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 + \eta)$	$\hat{\psi}_8 = \frac{1}{2}(\xi^2 - \xi)(1 - \eta^2)$	$\hat{\psi}_9 = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)$

Cuadro 4.1: Funciones de forma para elementos bicuadráticos.





Teorema 1. Dada la transformación isoparamétrica en (4.5.20) se tiene que

$$\nabla_{rz}\psi_{\lambda}^{e} = J_{e}^{-T}\nabla_{\xi\eta}\hat{\psi}_{\lambda}, \qquad (4.5.21)$$

con J_e la matriz Jacobiana de la transformación isoparamétrica.

La demostración del teorema 1 se presenta en el Anexo D.

En particular, al usar las relaciones (D.0.4), (D.0.9) y (4.5.21) del teorema 1 en las integrales sobre Ω_e de la ecuaciones (4.4.16) a la (4.4.18) se transforman en integrales sobre el elemento de referencia

 $\hat{\Omega}$, esto es

$$M = \sum_{e=1}^{ne} M^e \quad \text{con} \quad M^e_{\lambda,\beta} = \int_{\hat{\Omega}} \hat{\psi}_{\beta} \hat{\psi}_{\lambda} \hat{r} |J_e| d\xi d\eta,$$
(4.5.22)

$$A = \sum_{e=1}^{ne} A^e \quad \text{con} \quad A^e_{\lambda,\beta} = \int_{\hat{\Omega}} \left(J_e^{-T} \nabla_{\xi\eta} \hat{\psi}_\beta \right) \left(J_e^{-T} \nabla_{\xi\eta} \hat{\psi}_\lambda \right) \hat{r} |J_e| d\xi d\eta, \tag{4.5.23}$$

$$S = \sum_{e=1}^{ne} S^e \quad \text{con} \quad S^e_{\lambda,\beta} = \int_{\hat{\Omega}} \frac{\partial \hat{\psi}_{\beta}}{\partial z} \hat{\psi}_{\lambda} \hat{r} |J_e| d\xi d\eta.$$
(4.5.24)

4.6. Integración Numérica

Las integrales se aproximan usando una fórmula de integración numérica adecuada, la cual se elige tomando en cuenta el orden de los polinomios de interpolación. En general la fórmula de cuadratura de una integral se escribe de la manera siguiente:

$$\int_{\Omega_e} g(r,z) d\Omega = \int_{\hat{\Omega}} \hat{g}(\xi,\eta) |J_e(\xi,\eta)| d\hat{\Omega} \approx \sum_{l=1}^{npg} \hat{g}(\xi_l,\eta_l) |J_e(\xi_l,\eta_l)| w_l$$

donde w_l y (ξ_l, η_l) son los pesos y puntos de la cuadratura, respectivamente y npg es el número de puntos de ésta.

Para realizar la integración númerica sobre elemento de referencia bicuadrático $\hat{\Omega}$, ecuaciones (4.5.22) a la (4.5.24), se utilizan los puntos de cuadratura (η_l, ξ_l) con sus pesos correspondientes w_l definidos en el cuadro 4.2 y la fórmula es exacta para $Q_2(\hat{\Omega})$, ver (Reddy, 1993) (Sánchez, 2020).

ξ_l	η_l	w_l
$-\sqrt{3/5}$	$-\sqrt{3/5}$	25/81
0	$-\sqrt{3/5}$	40/81
$\sqrt{3/5}$	$-\sqrt{3/5}$	25/81
$-\sqrt{3/5}$	0	40/81
0	0	64/81
$\sqrt{3/5}$	0	40/81
$-\sqrt{3/5}$	$\sqrt{3/5}$	25/81
0	$\sqrt{3/5}$	40/81
$\sqrt{3/5}$	$\sqrt{3/5}$	25/81

Cuadro 4.2: Puntos y pesos de cuadratura para el elemento de referencia bicuadrático.

4.7. Discretización sobre el tiempo

Para aproximar la derivada $\frac{\partial \Theta(t)}{\partial t}$ se divide el intervalo $[t_0, T]$ en N subintervalos de tamaño $\Delta t = \frac{T - t_0}{N}$, los nodos se definen por $t_n = t_0 + n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots, N$.

La idea de los métodos $\hat{\theta}$ es conocer el valor $\Theta(t)$ del problema (4.3.12) al tiempo t_{n+1} a partir del valor de $\Theta(t)$ en el tiempo t_n . Esto se realiza mediante un promedio ponderado de $\frac{\partial \Theta(t_n)}{\partial t}$ y $\frac{\partial \Theta(t_{n+1})}{\partial t}$ de la siguiente forma:

$$\frac{\Theta(t_{n+1}) - \Theta(t_n)}{\Delta t} = \hat{\theta} \frac{\partial \Theta(t_{n+1})}{\partial t} + (1 - \hat{\theta}) \frac{\partial \Theta(t_n)}{\partial t} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{1}{2} - \hat{\theta}\right) \Delta t, \Delta t^2\right)$$

con $0 \leq \hat{\theta} \leq 1$. En particular, usaremos $\hat{\theta} = \frac{1}{2}$ que es el método de Crank-Nicolson, cuyo orden es $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ (Donea, 2003). Dado que la ecuación (4.3.12) se puede rescribir como $M \frac{\partial \Theta(t)}{\partial t} = \mathcal{L}(\Theta(t))$, donde $\mathcal{L}(\Theta(t)) = \left(-\frac{\kappa}{\alpha}A - \kappa S\right)\Theta(t)$, la discretización en el tiempo empleando el método $\hat{\theta}$ se establece como

$$M\frac{\Theta^{n+1}-\Theta^n}{\Delta t} = \hat{\theta}\mathcal{L}(\Theta^{n+1}) + (1-\hat{\theta})\mathcal{L}(\Theta^n).$$
(4.7.25)

Así que,

$$M\frac{\Theta^{n+1} - \Theta^n}{\Delta t} = \hat{\theta} \left(-\frac{\kappa}{\alpha} A - \kappa S \right) \Theta^{n+1} + (1 - \hat{\theta}) \left(-\frac{\kappa}{\alpha} A - \kappa S \right) \Theta^n,$$
$$M \left(\Theta^{n+1} - \Theta^n \right) = \Delta t \hat{\theta} \kappa \left(-\frac{1}{\alpha} A - S \right) \Theta^{n+1} + (1 - \hat{\theta}) \Delta t \kappa \left(-\frac{1}{\alpha} A - S \right) \Theta^n.$$

Finalmente, en cada paso de tiempo n = 1, ..., N se resuelve el sistema de ecuaciones siguiente:

$$\left[M + \Delta t \hat{\theta} \kappa \left(\frac{1}{\alpha} A + S\right)\right] \Theta^{n+1} = \left[M - \Delta t (1 - \hat{\theta}) \kappa \left(\frac{1}{\alpha} A + S\right)\right] \Theta^n, \tag{4.7.26}$$

donde las matrices M, A y S están definidas en las relaciones (4.5.22)-(4.5.24).

Capítulo

Validación del programa

En este capítulo se valida el modelo numérico de nuestro problema de estudio (3.2.2) - (3.2.7). Para ello, a la ecuación diferencial parcial (3.2.2) se le agrega una fuente puntual. Se elimina la condición de S_1 y se respeta las demás condiciones. Después la solución aproximada se comprara con la solución analítica desarrollada en el apartado 3.3.

5.1. Problema de validación: fuente puntual

A la ecuación diferencial parcial (3.2.2) se le agrega la fuente puntual $q \frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \delta(z - z_0)$. Se respeta el mismo dominio de estudio, como las condiciones de frontera para S_2 , S_3 y S_4 y la condición inicial. De esta manera se llega al problema de validación.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} + q \frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \delta(z - z_0)$$
(5.1.1)

con las condiciones de frontera

$$S_2: \frac{\partial \Theta(r, \varphi, z_A, t)}{\partial z} = -\alpha \Theta, \qquad (\varphi, r) \in [0, 2\pi] \times [0, r_1], \ t > 0, \qquad (5.1.2)$$

$$S_3: \frac{\partial \Theta(r_1, \varphi, z, t)}{\partial r} = 0, \qquad (\varphi, z) \in [0, 2\pi] \times [0, z_A], \ t > 0, \qquad (5.1.3)$$

$$S_4: \Theta(r, \varphi, 0, t) = 0, \qquad (r, \varphi) \in [0, r_1] \times [0, 2\pi], \ t > 0 \qquad (5.1.4)$$

y la condición inicial

$$\Theta(r,\varphi,z,0) = 0, \tag{5.1.5}$$

ver figura 5.1.



Figura 5.1: Modelo con una fuente puntual.

5.2. Formulación variacional y discretización

En este caso $\partial \Omega_D = S_4$. Multiplicamos (5.1.1) por la función $w \in H^1_0(\Omega_v)$ y se integra en Ω_v ,

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \int_{\Omega_v} \nabla \cdot \mathbf{J} w \, d\Omega_v - \int_{\Omega_v} q \frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \delta(z - z_0) w \, d\Omega_v = 0. \qquad \forall w \in H^1_0(\Omega_v),$$
(5.2.6)

usando la fórmula de Green (4.2.2), obtenemos

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \int_S w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega_v} \mathbf{J} \cdot \nabla w \, d\Omega_v - \int_{\Omega_v} q \frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \delta(z - z_0) w \, d\Omega_v = 0.$$

Las condiciones de contorno (5.1.2)-(5.1.4) se describen en término de J como se muestra en la figura 4.1. Por lo que las integrales de línea en S_2 y S_3 son igual a cero, así que

$$\int_{\Omega_{v}} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_{v} + \int_{S4} w \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega_{v}} \left(-\frac{\kappa}{\alpha} \nabla \Theta - \kappa \Theta \mathbf{e}_{\mathbf{z}} \right) \cdot \nabla w \, d\Omega_{v} - \int_{\Omega_{v}} q \frac{1}{r} \delta(r - r_{0}) \delta(\varphi - \varphi_{0}) \delta(z - z_{0}) w \, d\Omega_{v} = 0,$$

aplicando que $w(r, \varphi, z, t) = 0$ en S_4 , se tiene

$$\int_{\Omega_v} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, d\Omega_v + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_v} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, d\Omega_v + \kappa \int_{\Omega_v} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, d\Omega_v - \int_{\Omega_v} q \frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \delta(z - z_0) w \, d\Omega_v = 0,$$

es decir, en coordenadas cilíndricas

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, r dr dz d\varphi + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r dr dz d\varphi + \kappa \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r dr dz d\varphi + \kappa \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, r dr dz d\varphi - \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} q \delta(r - r_{0}) \delta(\varphi - \varphi_{0}) \delta(z - z_{0}) w \, dr dz d\varphi = 0.$$

Por la propiedad de la delta de Dirac (C.2.8), resulta

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, r dr dz d\varphi + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r dr dz d\varphi + \kappa \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, r dr dz d\varphi - q w (r_{0}, \varphi_{0}, z_{0}) = 0.$$

Al integrar sobre φ (simetría axial), la ecuación anterior se reduce a

$$\int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \frac{\partial \Theta}{\partial t} w \, r dr dz + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \nabla \Theta \cdot \nabla w \, r dr dz + \kappa \int_{0}^{z_{A}} \int_{0}^{r_{1}} \Theta \frac{\partial w}{\partial z} \, r dr dz - \frac{1}{2\pi} q w (r_{0}, \varphi_{0}, z_{0}) = 0.$$
(5.2.7)

Definimos por nnq al nodo donde se aplica la fuente puntual q. Si en (5.2.7) reemplazamos Θ por Θ_h y w por w_h . El problema discreto asociado sobre la triangulación Ω_h es

$$\int_{\Omega_h} w_h \frac{\partial \Theta_h}{\partial t} r d\Omega + \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_h} \nabla \Theta_h \cdot \nabla w_h r d\Omega + \kappa \int_{\Omega_h} \Theta_h \frac{\partial w_h}{\partial z} r d\Omega - \frac{1}{2\pi} q w_h(r_{nnq}, 0, z_{nnq}) = 0 \quad \forall w_h \in W_h,$$

al sustituir (4.3.5) y $w_h = \phi_i$ en la ecuación anterior se tiene

$$\sum_{j=1}^{nnt} \frac{\partial \Theta_j(t)}{\partial t} \int_{\Omega_h} \phi_j \phi_i r d\Omega + \sum_{j=1}^{nnt} \Theta_j(t) \left\{ \frac{\kappa}{\alpha} \int_{\Omega_h} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i r d\Omega + \kappa \int_{\Omega_h} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \phi_j r d\Omega \right\} - \frac{1}{2\pi} q \phi_i(r_{nnq}, z_{nnq}) = 0.$$

Por lo cual,

$$\sum_{j=1}^{nnt} M_{i,j} \frac{\partial \Theta_j(t)}{\partial t} + \sum_{j=1}^{nnt} \left\{ \frac{\kappa}{\alpha} A_{i,j} + \kappa S_{i,j} \right\} \Theta_j(t) - \frac{1}{2\pi} q \phi_i(r_{nnq}, z_{nnq}) = 0, \qquad \forall i, j = 1, 2, \dots, nnt,$$
(5.2.8)

donde $M_{i,j}$, $A_{i,j}$ y $S_{i,j}$ están definidas en (4.3.8)-(4.3.10). Entonces, el sistema de ecuaciones lineales (5.2.8) se escribe en notación matricial como

$$M\frac{\partial \Theta(t)}{\partial t} + \left[\frac{\kappa}{\alpha}A + \kappa S\right] \Theta(t) - \frac{1}{2\pi}q\phi_i(r_{nnq}, z_{nnq}) = 0, \qquad (5.2.9)$$

 $\operatorname{con} \boldsymbol{\Theta}(t) = [\Theta_1(t), \Theta_2(t), \dots, \Theta_{nnt}(t)]^T.$

Para la discretización en el tiempo se emplea el método $\hat{\theta}$

$$M\frac{\Theta^{n+1} - \Theta^{n+1}}{\Delta t} = \hat{\theta}\mathcal{L}(\Theta^{n+1}) + (1 - \hat{\theta})\mathcal{L}(\Theta^n)$$
(5.2.10)

donde $\mathcal{L}(\Theta) = \left[-\frac{\kappa}{\alpha}A - \kappa S\right]\Theta + \frac{1}{2\pi}q\phi_i(r_{nnq}, z_{nnq})$. La ecuación discretizada es la siguiente:

$$\left(M + \Delta t \hat{\theta} \kappa \left[\frac{1}{\alpha}A + S\right]\right) \mathbf{\Theta}^{n+1} = \left(M - \Delta t (1 - \hat{\theta}) \kappa \left[\frac{1}{\alpha}A + S\right]\right) \mathbf{\Theta}^{n} + \Delta t \frac{1}{2\pi} q \phi_i(r_{nnq}, z_{nnq}).$$
(5.2.11)

5.3. Comparación de soluciones analítica y numérica

Se realiza una comparación entre la solución numérica (5.2.11) y la analítica (3.3.20). Los valores de los parámetros que se emplean son: $\alpha = 2 \text{ m}^{-1}$, $\kappa = 1 \text{ ms}^{-1}$, $K_s = 4.84 \times 10^{-5} \text{ ms}^{-1}$, $\psi_m = -0.14 \text{ m}$, T = 10 s, $\Delta t = 0.002$. Cabe señalar que el dominio es diferente en ambos casos, por lo cual el dominio de la analítica se trasladó verticalmente dos unidades. Por otro lado, el dominio de la solución analítica consiste en el semi-plano inferior, ver figura 3.5 y el dominio de la solución aproximada es un la mitad de ese semi-plano, ver figura 5.1. En consecuencia en la simulación númerica se utiliza $q = \frac{25}{2} \text{ m}^3 \text{s}^{-1}$, mientras que en la analítica el valor de la fuente es $q = 25 \text{ m}^3 \text{s}^{-1}$.

En la figura 5.2 se comparan los contornos del potencial de flujo matricial analítico (líneas discontinuas) contra los contornos numéricos (líneas continuas). Se puede observar que los contornos cercanos a la fuente son prácticamente los mismos y conforme se van alejando de la fuente comienzan a mostrarse pequeñas diferencias causadas por las condiciones de frontera del problema (5.1.1)-(5.1.4). Por medio de está comparación en los contornos cercanos a la fuente, se verifica la confiabilidad de nuestro modelo númerico.



Figura 5.2: Comparación del potencial de flujo matricial Θ entre solución analítica en (3.3.20) (líneas discontinuas) y la numérica en (5.2.11) (líneas continuas) usando nuestro método.

Capítulo

Resultados númericos

En el presente capítulo se exponen y discuten los resultados del modelo (3.2.2)-(3.2.7), cuya solución se obtiene al resolver el sistema (4.7.26) en cada paso de tiempo. Para ello, se calcula la solución con una κ de prueba, se aproxima tanto el flujo de agua como la infiltración y a partir de estos resultados, se ajustan los datos experimentales.

En particular, se detalla el cálculo del flujo, la infiltración en función del tiempo y los resultados para los tres tipos de suelo, Bosque, Acahual y Agostadero.

6.1. Cálculo del flujo de agua

Con el objetivo de medir el flujo de agua a través de la base del infiltrómetro y determinar la velocidad de flujo de salida de agua del sistema se integra el flujo J

$$Q = \iint_S (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) r dr d\varphi,$$

donde Q es el caudal de agua (en unidades de volumen por unidad de tiempo) y S denota la superficie a través de la cual se está midiendo el flujo. El caudal de entrada se calcula sobre la superficie circular de radio r_0 y altura z_A llamada S_1 (figura 3.4). Usando la ecuación (2.4.21) se tiene

$$Q_1(t) = \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \left(-\frac{\kappa}{\alpha} \nabla \Theta - \kappa \Theta \mathbf{e}_z \right) \cdot \mathbf{e}_z r dr d\varphi = -2\pi \int_0^{r_0} \left(\frac{\kappa}{\alpha} \frac{\partial \Theta}{\partial z} + \kappa \Theta \right) r dr.$$
(6.1.1)

Análogamente, en la base de la columna de suelo de radio r_1 está la superficie S_4 donde el caudal de agua de salida es

$$Q_4(t) = 2\pi \int_0^{r_1} \left(\frac{\kappa}{\alpha} \frac{\partial \Theta}{\partial z} + \kappa \Theta\right) r dr.$$

Estos dos caudales Q representan la velocidad con la que entra y sale el agua al tiempo t. El cálculo del caudal de entrada y salida computacional se presenta en el Apéndice E. La infiltración I(t), es decir, la cantidad de agua que ha entrado y salido al tiempo t se define a través de la ecuación

$$I(t) = \int_0^t Q(t')dt'.$$
 (6.1.2)

Es importante notar que tanto los caudales Q(t) como la infiltración I(t) son proporcionales al valor de κ , es decir, al incrementar κ crece la infiltración y cuando κ disminuye baja la infiltración. Esta propiedad es la que usaremos en la siguiente sección para ajustar la infiltración numérica con respecto a las curvas experimentales que aparecen en la figura 3.2. Antes de realizar este ajuste, hay que considerar la relación entre infiltración y lámina acumulada y la variación temporal de la tensión descritas a continuación.

Infiltración experimental y lámina acumulada. Los experimentos de la lámina acumulada (figura 3.2) implica restar la altura de lámina equivalente (h_2) para cada registro, o sea, la altura de agua infiltrada en el suelo al tiempo t y la altura de lámina equivalente al inicio del ensayo de infiltración. Los datos conocidos son la sección circular de área del reservatorio principal A_1 y el de la muestra de suelo A_2 , además de la altura de la columna de agua h_1 . Para calcular h_2 se considera que el volumen de agua V_1 que se perdió en el reservorio principal es igual al volumen de agua V_2 que se infiltró en el suelo, y siendo que $V_1 = A_1 * h_1$ y $V_2 = A_2 * h_2$. Entonces

$$h_2 = \frac{A_1 h_1}{A_2},\tag{6.1.3}$$

de esta forma se puede calcular para cada medición de altura de columna de agua una altura de lámina equivalente. Una vez calculadas las alturas de la lámina equivalente, se procedió al cálculo de la lámina acumulada

$$L_{\rm acum} = A_{\rm leq} - A_{\rm leqi}, \tag{6.1.4}$$

donde L_{acum} es la lámina acumulada para un registro específico, A_{leq} es la altura de lámina equivalente para cada altura de columna de agua y A_{leqi} es la altura de lámina equivalente al inicio del ensayo de infiltración (Gómez-Tagle et al., 2014), ver figura 6.1



Figura 6.1: A la área de la muestra de suelo, A_1 la área de sección circular del reservorio principal, A_2 la área donde entra agua en la muestra de suelo, h_1 la altura de la columna de agua perdida en el reservorio principal y h_2 la lámina equivalente del agua infiltrada en el suelo (Gómez-Tagle et al., 2014).

Los experimentos son una herramienta interesante para obtener el valor del parámetro κ , pues se pueden utilizar las soluciones numéricas para ajustar la infiltración experimental. La cual se obtiene de multiplicar la lámina acumulada (L_{acum}) por el área del cilindro (A).

Dependencia en el tiempo de κ . En nuestro sistema la tensión tiene cuatro cambios en el tiempo, que se aprecian en la figura 3.1. Estos cambios de tensión o etapas se reflejan en la velocidad con la que entra agua, esto es, en los cambios de pendiente de la gráfica de la lámina acumulada de la figura 3.2.

Por ello, para ajustar los valores de la lámina acumulada es necesario usar un valor de κ en cada etapa. El procedimiento para obtener κ de la primera etapa, consta de tomar la primera tensión así como proponer un valor para κ , resolver los sistemas (4.7.26) y estimar la infiltración. La gráfica de la infiltración numérica se compara con los resultados experimentales de la lámina acumulada y mediante ensayo y error se ajusta el valor de κ . Si la infiltración estimada con una κ está por arriba se debe bajar su valor y si está por debajo se aumenta, hasta obtener un ajuste razonable. Una vez concluida la primera etapa se realiza la misma técnica para cada una de las tensiones.

6.2. Procedimiento para el ajuste de datos

Todos los algoritmos han sido programados en MATLAB versión 9.9.0.1524771 (R2020b) y ejecutados en una PC con procesador Intel(R) Core(TM) i5-1035G1 de 8Gb de RAM bajo Windows 10. Se ha utilizado una malla con elementos bicuadráticos donde hay un refinamiento homogéneo en la frontera Γ_1 y fuera de ella se usa una serie geométrica, esto se debe principalmente porque en el punto (r_0, z_A) existe una discontinuidad entre las condiciones de frontera (3.2.3) y (3.2.4). En la dirección z el tamaño de h es uniforme, ver figura 6.2.



Figura 6.2: Malla con elementos bicuadráticos.

Los datos empleados para generar la mallas son:

h=0.000625 m, tamaño de los elementos más pequeños de la malla.

f=1.02, el radio con el que crece la serie geométrica en la dirección de r.

 $r_0=0.05$ m, la parte de la malla que es uniforme.

nnt=87,153, número de nodos totales.

ne= 21,632, número de elementos totales.

Los valores de la conductividad hidráulica K_s , el potencial matricial o tensión ψ_m y la constante de Gardner α utilizados para las diferentes muestras de suelo están descritos en los cuadros 3.1-3.2. Se considera un paso de tiempo $\Delta t = 10$. En el ajuste de infiltración llevado en 4 etapas en los tres suelos Bosque, Acahual y Agostadero se encontraron los valores del parámetro κ como se muestran en los

CAPÍTULO 6. RESULTADOS NÚMERICOS

cuadros 6.1, 6.2 y 6.3, respectivamente. En estos mismos cuadros se presentan los tiempos finales empleados en cada etapa. Cabe mencionar que el tiempo inicial de una etapa es el tiempo final de la etapa anterior. Todos los experimentos inician con $t_0 = 0$.

Etapa	ψ_m (m)	Bosque (s)	$\kappa\left(\frac{m}{s}\right)$
1	-0.14	9340	$1.120 \times 10^{-7}, 6.190 \times 10^{-2}, 4.090 \times 10^{-3}$
2	-0.07	14450	1.010×10^{-6} , 6.545×10^{-2} , 9.420×10^{-2}
3	-0.03	18760	9.740 ×10 ⁻³ ,6.940 ×10 ⁻³ ,3.086 ×10 ⁻³
4	0	21300	2.900×10^{-4} , 2.999 , 1.930

Cuadro 6.1: Valores de κ para las diferente tensión en el Bosque.

Etapa	ψ_m (m)	Acahual (s)	$\kappa\left(\frac{m}{s}\right)$
1	-0.14	8420	1.500×10^{-7} , 3.740×10^{-1} , 5.740×10^{-2}
2	-0.07	15840	2.168×10^{-6} , 6.935×10^{-2} , 5.894×10^{-2}
3	-0.03	19150	1.905×10^{-6} , 8.015×10^{-1} , 9.781×10^{-1}
4	0	19940	9.990×10^{-1} , 6.550×10^{-1} , 3.230×10^{-1}

Cuadro 6.2: Valores de κ para las diferente tensión en el Acahual.

Etapa	ψ_m (m)	Agostadero (s)	$\kappa\left(\frac{m}{s}\right)$
1	-0.14	8560	1.989×10^{-3}
2	-0.07	16130	9.790×10^{-4}
3	-0.03	21161	6.819×10^{-4}
4	0	27880	6.128×10^{-3}

Cuadro 6.3: Valores de κ para las diferente tensión en el Agostadero.

Observemos que al ajustar los datos experimentales para el Bosque y Acahual fue necesario emplear tres diferentes κ en cada etapa, como se muestra en los cuadros 6.1 y 6.2, respectivamente, lo que dificulta el análisis de resultados.

Como ejemplo, se describe el procedimiento para ajustar los datos del Agostadero. En la primera etapa se resuelve la ecuación de Warrick con la condición inicial igual a cero y se propone un valor de κ hasta encontrar una que se adecue a la curva de infiltración de los datos experimentales, ver figura 6.3.a. Una vez obtenido el ajuste de la curva de infiltración iniciamos la segunda etapa, se resuelve nuevamente la ecuación de Warrick, donde la solución final de la primera etapa ahora es la condición

inicial. Otra vez, debemos aproximar los datos experimentales con diversos valores de κ hasta encontrar el apropiado, ver figura 6.3.b. El procedimiento se repite hasta terminar la última etapa.



Figura 6.3: Ajuste de la curva de infiltración: (a) primera etapa y (b) segunda etapa.



Figura 6.4: Caudal de entrada y salida. La línea de color azul representa la primera etapa y la de color café la segunda.

Es importante resaltar que para el Agostadero no fue necesario utilizar diferentes valores de κ en cada etapa. En la figura 6.4 se presenta el caudal de entrada y salida, observe que el caudal de entrada disminuye constantemente en ambas etapas con un cambio drástico entre ellas. Ahora bien, el caudal de salida crece en los primeros pasos de tiempo y prácticamente permanece constante en la primera etapa. Luego se reduce en el cambio de etapa y se mantiene nuevamente constante en la segunda etapa. Todo ello es consecuencia de los cambios abruptos en κ , ya que provocan alteraciones en la velocidad del fluido y por lo tanto en el caudal.

Las figuras 6.5 y 6.6 muestran los perfiles del potencial de flujo matricial Θ y un acercamiento alrededor del punto de discontinuidad (r_0, z_A) , donde se aplicó la estrategia de refinamiento, para la primera y segunda etapa, respectivamente. Se observa un movimiento vertical del agua en el suelo debido a la tensión y al potencial gravitacional. En comparación a la primera etapa, los valores del potencial de flujo matricial suben poco, lo cual se corrobora en la gráfica de infiltración 6.3.b.



Figura 6.5: Distribución del contenido de agua al finalizar la primera etapa en el Agostadero.



Figura 6.6: Distribución del contenido de agua al finalizar la segunda etapa en el Agostadero.

6.3. Ajuste de infiltración

En esta sección se exponen los resultados numéricos obtenidos en el ajuste de las curvas de infiltración, los perfiles del potencial de flujo matricial y el caudal de entrada y salida para los 3 tipos de suelo. El cuadro 6.4 presenta el tiempo de CPU (en segundos) que tarda el programa de elemento finito en aproximar la solución para cada tipo de suelo.

Suelo	Tiempo CPU (s)
Bosque	14,039.64
Acahual	11,745.92
Agostadero	7,110

Cuadro 6.4: Tiempos de CPU que emplea el método de elemento finito en aproximar las soluciones.

Las curvas de infiltración experimental y del modelo numérico para cada tipo de suelo de suelo se presentan en las gráficas de la figura 6.7. Observamos que el mejor ajuste de la curva se logra en el Agostadero. Como se mencionó anteriormente, para poder ajustar los datos experimentales del Bosque y Acahual es indispensable utilizar distintas κ en cada etapa.



Figura 6.7: Curvas de infiltración experimental y del modelo numérico: (a) Bosque, (b) Acahual y (c) Agostadero.

De las figuras 3.2, 3.3 y 6.8 se aprecia una mayor infiltración en el Bosque, seguida del Acahual y Agostadero.



Figura 6.8: Curvas de infiltración.

Las gráficas de las figuras 6.9 exhiben el caudal de entrada y salida de agua para los tres tipos de suelo. La muestra de Acahual registra más velocidad de entrada de agua en el suelo que el Bosque y el Agostadero, ver figura 6.9.a; se hubiera esperado que ésto suceda en el Bosque por mayor filtración, pero en realidad la infiltración es el resultado de las variaciones de κ . A su vez, se nota que el caudal de salida en el Bosque es mayor que las otras dos muestras, ver figura 6.9.b.



Figura 6.9: Caudal de entrada y salida de los tres tipos de suelo.

Para comparar los perfiles del potencial de flujo matricial Θ se toma la primera etapa con el mismo tiempo 8,420 segundos y se presentan en las gráficas de la figura 6.10. Se registra que el contenido de agua en el Bosque es superior que las otras dos muestras.



Figura 6.10: Perfiles del potencial de flujo matricial: (a) Bosque, (b) Acahual y (c) Agostadero.

| Capítulo

Conclusiones

En este trabajo se modela la infiltración de agua en una muestra de suelo correspondiente a tres tipos de uso: Bosque, Acahual y Agostadero mediante un infiltrómetro de tensión. Para ello, se utiliza la ecuación de Warrick y las condiciones apropiadas para la entrada y salida de agua. Se aproxima la solución a través del método de elemento finito y se ajustan los datos experimentales de infiltración, con el fin de encontrar el valor del parámetro κ .

La ecuación de Richards permite entender procesos como la infiltración o la redistribución de agua en un medio poroso. Ésta se obtiene de combinar la ley de Darcy con la ecuación de continuidad. La dificultad para resolver dicha ecuación es la relación no lineal entre la conductividad hidráulica, el potencial matricial y el contenido de agua del suelo.

Con el fin de reducir la dependencia no lineal de tres variables y poder contar con una solución analítica se linealiza la ecuación de Richards usando el modelo de Gardner y la transformada de Kirchhoff, dando como resultado la ecuación de Warrick. Esta ecuación se ha empleado para modelar la infiltración de agua. Para aproximar su solución se ha utilizado el método de elemento finito con elementos bicuadráticos para la discretización espacial y el esquema de Crank-Nicolson en la integración temporal.

Cabe mencionar que el problema del infiltrómetro de tensión presenta un punto de discontinuidad donde coinciden las condiciones de frontera de entrada de agua y la de no flujo. Para resolver este conflicto se ha refinado la malla en esa región que nos permite obtener resultados aceptables.

Para realizar la validación del programa se considera un problema similar al que se está resolviendo propuesto por Warrick (Warrick, 1974). La solución analítica se encuentra en el trabajo Philip (Philip, 1971) y consiste en encontrar la solución del problema de una fuente puntual de calor en un medio semiinfinito. Reprodujimos la dinámica de los perfiles del potencial de flujo matricial según los resultados de Warrick (Warrick, 1974). La metodología necesaria para la solución analítica constó de estudiar la técnica de transformadas de Fourier para ecuaciones diferenciales parciales, teorema de

CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES

convolución y funciones de Green para una, dos y tres dimensiones.

La solución numérica de la ecuación de Warrick tiene la ventaja de una programación más sencilla que aproximar la ecuación de Richards y la desventaja es la precisión de los resultados. Los resultados confirman, que existe mayor infiltración en el Bosque seguido del Acahual y Agostadero. Se cree que esto se debe al tamaño y configuración de los poros, la textura, la estructura y la perturbación humana (Pulido, 2019). Cabe mencionar que este trabajo retoma el modelo propuesto en la referencia (Pulido, 2019), con algunas aportaciones importantes como el ajuste de infiltración y la obtención del caudal. Otra ventaja resulta de la independencia de contar con un programa propio que resuelve el modelo de estudio y nos ayude a comprender otro tipo de problemas relacionados con la infiltración.

Dado que en el protocolo experimental se empleó una tensión diferente en cada etapa, provocó que el cambio de humedad no fuera suave y eso se reflejó al tratar de ajustar el valor de κ . Consideramos que podemos emplear dos estrategias para mejorar la aproximación del valor de κ . Una es modelar directamente con la ecuación de Richards junto con una ecuación constitutiva para relacionar $K y \theta$. La otra es calcular un problema de mínimos cuadrados para cada κ propuesta, de esa manera se puede elegir la κ que produzca menor error, en vez de realizar el ajuste por ensayo y error.

Es importante señalar que la metodología propuesta se puede emplear, incluso con el modelo lineal, para otro tipo de suelos. De hecho, sugerimos homogeneizar el protocolo experimental para obtener mejores resultados por ejemplo, proponemos que la duración en cada etapa sea la misma, con un cambio de tensión más suave y con el mismo número de etapas en cada suelo. De esa forma esperaríamos que no hubiera cambios tan abruptos en las gráficas de infiltración y del caudal, y por lo tanto, que se puedan hacer mejores ajustes de κ .

Apéndice

Transformadas de Fourier

La transformación de Fourier es una herramienta importante en matemáticas, física, informática, química y las ciencias médicas y farmacéuticas. Definimos la transformada de Fourier, la transformada inversa y el Teorema de Convolución para 1D y 3D respectivamente.

Definición 5. La transformada de Fourier en una dimensión se define como

$$\mathcal{F}\left\{g(x)\right\} = G(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{-i\alpha x}dx,$$
(A.0.1)

siempre que la integral exista (Chirikjian, 2016).

Definición 6. La transformada de Fourier tridimensional se define como

$$\mathcal{F}\left\{g(x,y,z)\right\} = G(\alpha,\beta,\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y,z) e^{-i(\alpha x + \beta y + \sigma z)} dx dy dz.$$
(A.0.2)

siempre que las integrales existan (Glenn et al., 2023).

La transformación de Fourier tridimensional puede considerarse como el producto de tres transformaciones de Fourier unidimensionales (en diferentes variables), entonces para segundas derivadas parciales $\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 g}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}$ obtenemos las fórmulas siguientes:

$$\iiint \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} e^{-i\alpha x} e^{-i\beta y} e^{-i\sigma z} dx dy dz = \iint \left(\int \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} e^{-i\alpha x} dx \right) e^{-i\beta y} e^{-i\sigma z} dy dz$$
$$= -\alpha^2 \iint G_1(\alpha, y, z) e^{-i\beta y} e^{-i\sigma z} dy dz$$
$$= -\alpha^2 \int G_2(\alpha, \beta, z) e^{-i\sigma z} dz = -\alpha^2 G(\alpha, \beta, \sigma).$$
(A.0.3)

$$\iiint \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} e^{-i\alpha x} e^{-i\beta y} e^{-i\sigma z} dy dz dx = \iint \left(\int \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} e^{-i\alpha y} dy \right) e^{-i\alpha x} e^{-i\sigma z} dz dx$$
$$= -\beta^2 \iint G_3(x,\beta,z) e^{-i\alpha x} e^{-i\sigma z} dz dx$$
$$= -\beta^2 \int G_4(x,\beta,\sigma) e^{-i\alpha x} dx = -\beta^2 G(\alpha,\beta,\sigma).$$
(A.0.4)

$$\iiint \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} e^{-i\sigma z} e^{-i\alpha x} e^{-i\beta} dz dx dy = \iint \left(\int \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} e^{-i\sigma z} dz \right) e^{-i\alpha x} e^{-i\beta y} dx dy$$
$$= -\sigma^2 \iint G_5(x, y, \sigma) e^{-i\alpha x} e^{-i\beta y} dx dy$$
$$= -\sigma^2 \int G_6(\alpha, y, \sigma) e^{-i\beta y} dy = -\sigma^2 G(\alpha, \beta, \sigma).$$
(A.0.5)

donde $\alpha, \beta, \sigma \in \mathbb{R}$ y

$$G_{1}(\alpha, y, z) = \int g(x, y, z)e^{-i\alpha x} dx, \qquad G_{2}(\alpha, \beta, z) = \iint g(x, y, z)e^{-i(\alpha x + \beta y)} dx dy,$$

$$G_{3}(x, \beta, y) = \int g(x, y, z)e^{-i\alpha y} dy, \qquad G_{4}(x, \beta, \sigma) = \iint g(x, y, z)e^{-i(\beta y + \sigma z)} dy dz,$$

$$G_{5}(x, y, \sigma) = \int g(x, y, z)e^{-\sigma z} dz, \qquad G_{6}(\alpha, y, \sigma) = \iint g(x, y, z)e^{-i(\beta x + \sigma z)} dx dz.$$

A.1. Transformada inversa de Fourier

Definición 7. La transformada inversa de Fourier en una dimensión se define como

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{G(\alpha)\right\} = g(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha.$$
(A.1.6)

siempre que la integral exista (Chirikjian, 2016).

Resultado. La transformada inversa de Fourier de $e^{-p^2\alpha^2}$ es

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-p^{2}\alpha^{2}}\right\} = \frac{e^{\frac{-x^{2}}{4p^{2}}}}{2\sqrt{\pi}p}.$$
(A.1.7)

Se considera que

$$\mathcal{F}\left\{e^{\frac{-x^2}{4p^2}}\right\} = 2\sqrt{\pi}pe^{-p^2\alpha^2}.$$

Al aplicar en ambos lados la transformada inversa de Fourier se obtiene

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\left\{e^{\frac{-x^{2}}{4p^{2}}}\right\}\right\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{2\sqrt{\pi}pe^{-p^{2}\alpha^{2}}\right\} = 2\sqrt{\pi}p\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-p^{2}\alpha^{2}}\right\},$$
$$\frac{e^{\frac{-x^{2}}{4p^{2}}}}{2\sqrt{\pi}p} = \mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-p^{2}\alpha^{2}}\right\}.$$
(A.1.8)

Definición 8. La transformada inversa de Fourier tridimensional se define como

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{G(\alpha,\beta,\sigma)\right\} = g(x,y,z) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\alpha,\beta,\sigma) e^{i(\alpha x + \beta y + \sigma z)} d\alpha d\beta d\sigma.$$
(A.1.9)

siempre que las integrales existan (Glenn et al., 2023).

Resultado.- La Transformada inversa de la función delta de Dirac (Hoskins, 2009) es:

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-i(\alpha x_0 + \beta y_0 + \sigma z_0)}\right\} = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0).$$
(A.1.10)

Transformada inversa de $e^{-D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)(t-\tau)}$ es:

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)(t-\tau)}\right\} = \frac{e^{\frac{-(x^2+y^2+z^2)}{4D(t-\tau)}}}{8(\pi D(t-\tau))^{\frac{3}{2}}}.$$
(A.1.11)

Esta fórmula se obtiene de aplicar para cada parámetro α , β , σ la relación (A.1.8).

A.2. Teorema de Convolución

Definición 9. Sean f, g funciones continuas $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Se define la convolución de f y g como la función (Chirikjian, 2016)

$$(f * g)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau)d\tau.$$

Teorema 2. Teorema de convolución para la transformada de Fourier en 1D. Si f y g son funciones continuas de $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ y de orden exponencial, entonces

$$(f * g)(x) = \mathcal{F}^{-1} \{ F(\alpha) G(\alpha) \} = \mathcal{F}^{-1} \{ F(\alpha) \} * \mathcal{F}^{-1} \{ G(\alpha) \},$$
(A.2.12)

donde $F(\alpha) = \mathcal{F}\{f(x)\} \ y \ G(\alpha) = \mathcal{F}\{g(x)\}.$

Definición 10. Sean f, g funciones continuas en $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$. Se define la convolución de f y g como (*Chirikjian*, 2016)

$$(f * g)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{l})g(\mathbf{x} - \mathbf{l}) d\mathbf{l}.$$

Teorema 3. Si $f \ y \ g$ son functiones continuas de $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ y de orden exponencial, entonces

$$(f * g)(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1} \{ F(\alpha, \beta, \sigma) G(\alpha, \beta, \sigma) \} = \mathcal{F}^{-1} \{ F(\alpha, \beta, \sigma) \} * \mathcal{F}^{-1} \{ G(\alpha, \beta, \sigma) \}, \quad (A.2.13)$$

donde $F(\alpha, \beta, \sigma) = \mathcal{F} \{ f(x, y, z) \}$ y $G(\alpha, \beta, \sigma) = \mathcal{F} \{ g(x, y, z) \}.$

Apéndice **B**

Ecuación de calor en 1D

El problema del flujo de calor lineal en un sólido o varilla infinita se escribe como

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \qquad -\infty < x < \infty, t > 0, \tag{B.0.1}$$

con condición inicial

$$v(x,0) = f(x).$$
 (B.0.2)

Solución 1. Para resolver dicho problema tomamos la transformada de Fourier con respecto a x en ambos lados de la ecuación (B.0.1)

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial v}{\partial t}\right\} = \mathcal{F}\left\{D\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right\},$$
$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial v}{\partial t}\right\} = D\mathcal{F}\left\{\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right\},$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{dt}e^{-i\alpha x}dx = D(-\alpha^2)V(\alpha, t),$$
$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} ve^{-i\alpha x}dx = D(-\alpha^2)V(\alpha, t),$$

así,

$$\frac{dV(\alpha,t)}{dt} + D\alpha^2 V(\alpha,t) = 0, \qquad t > 0, \alpha \in \mathbb{R}.$$

Si la condición inicial (B.0.2) se transforma en

$$\mathcal{F}\{v(x,0)\} = \mathcal{F}\{f(x)\}$$
$$V(\alpha,0) = F(\alpha),$$

obtenemos el problema de valor inicial

$$\frac{dV(\alpha,t)}{dt} + D\alpha^2 V(\alpha,t) = 0, \qquad \forall t > 0, -\infty < \alpha < \infty$$
(B.0.3)

$$V(\alpha, 0) = F(\alpha). \tag{B.0.4}$$

La solución de la ecuación (B.0.3) es $V(\alpha, t) = Ce^{-D\alpha^2 t}$, al evaluar la condición inicial (B.0.4) resulta

$$V(\alpha, 0) = Ce^{-D\alpha^2(0)}$$
$$= C = F(\alpha).$$

Entonces

$$V(\alpha, t) = \mathcal{F}\left\{v(x, 0)\right\} e^{-D\alpha^2 t}$$
(B.0.5)

Para encontrar la solución v(x,t) se aplica la transformada inversa de Fourier de ambos lados de la ecuación (B.0.5) y el teorema de convolución (A.2.12)

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{V(\alpha,t)\right\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{\underbrace{\mathcal{F}\left\{v(x,0)\right\}}_{F(\alpha)}\right\}\underbrace{e^{-D\alpha^{2}t}}_{G(\alpha)}\right\},$$
$$v(x,t) = \mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\left\{v(x,0)\right\}\right\} * \mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-D\alpha^{2}t}\right\},$$
$$v(x,t) = v(x,0) * \mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-D\alpha^{2}t}\right\}.$$

Por el resultado (A.1.7) considerando $p = \sqrt{Dt}$ se deduce que

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-(\sqrt{Dt})^{2}\alpha^{2}}\right\} = \frac{e^{\frac{-x^{2}}{4(\sqrt{Dt})^{2}}}}{2\sqrt{\pi}\sqrt{Dt}},$$
$$\mathcal{F}^{-1}\left\{e^{-Dt\alpha^{2}}\right\} = \frac{e^{\frac{-x^{2}}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi}Dt}.$$

Partiendo de esta expresión tenemos que

$$\begin{split} v(x,t) &= v(x,0) * \frac{e^{\frac{-x^2}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi Dt}},\\ v(x,t) &= f(x) * \frac{e^{\frac{-x^2}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi Dt}}. \end{split}$$
Por definición de convolución

$$v(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} dx'.$$
 (B.0.6)

En esta solución se observa que la función de Green $G(x, x', t - \tau)$ del problema es

$$G(x, x', t - 0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{(x - x')^2}{4Dt}}.$$
(B.0.7)

Se considera que la función de Green es la respuesta del sistema en la posición x y tiempo t debido a una temperatura inicial f(x') aplicada en la posición x', al tiempo $\tau = 0$, ver figura B.1



Figura B.1: Función de Green.

Nótese que la función de Green se parece a llama la curva de distribución normal en estadística.

Apéndice

Ecuación de calor 3D

Se sugiere que antes de seguir la solución de la ecuación tridimensional se revise el apéndice A de transformadas de Fourier y el apéndice B sobre la solución de la ecuación de calor unidimensional en un dominio infinito.

C.1. Ecuación de difusión de calor 3D en dominio infinito

El problema de calor tridimensional en un dominio infinito en coordenadas cartesianas se escribe como

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right), \quad -\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t > 0 \quad (C.1.1)$$

con la condición inicial

$$v(x, y, z, 0) = f(x, y, z).$$
 (C.1.2)

Solución 2. Multiplicando la ecuación (C.1.1) y (C.1.2) por $e^{-i(\alpha x + \beta y + \sigma z)}$ y aplicando la transformada de Fourier (A.0.2), además de las relaciones (A.0.3),(A.0.4) y (A.0.5) resulta

$$\frac{dV(\alpha,\beta,\sigma,t)}{dt} + D(\alpha^2 + \beta^2 + \sigma^2)V(\alpha,\beta,\sigma,t) = 0, \qquad \forall t > 0, \alpha, \beta, \sigma \in \mathbb{R}$$
(C.1.3)

$$V(\alpha, \beta, \sigma, 0) = F(\alpha, \beta, \sigma), \tag{C.1.4}$$

donde $\mathcal{F}\{v(x, y, z, t)\} = V(\alpha, \beta, \sigma, t)$. La solución de la EDO (C.1.3) de primer orden se encuentra por medio de variables separables y es $Ce^{-D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)t}$. Al evaluar la condición inicial (C.1.4) obtenemos

$$V(\alpha, \beta, \sigma, 0) = Ce^{-D(\alpha^2 + \beta^2 + \sigma^2)(0)}$$
$$= C = F(\alpha, \beta, \sigma).$$

Luego

$$V(\alpha, \beta, \sigma, t) = F(\alpha, \beta, \sigma) e^{-D\alpha^{2}t} e^{-D\beta^{2}t} e^{-D\sigma^{2}t},$$

$$V(\alpha, \beta, \sigma, t) = \mathcal{F} \{ v(x, y, z, 0) \} e^{-D\alpha^{2}t} e^{-D\beta^{2}t} e^{-D\sigma^{2}t}.$$

A esta última igualdad primero se le aplica la transformada inversa de Fourier (A.1.9) y después el teorema de convolución (A.2.13)

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{V(\alpha,\beta,\sigma,t)\right\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{\underbrace{\mathcal{F}\left\{v(x,y,z,0)\right\}}_{F(\alpha,\beta,\sigma)}\right\}\underbrace{e^{-D\alpha^{2}t}e^{-D\beta^{2}t}e^{-D\sigma^{2}t}}_{G(\alpha,\beta,\sigma)}\right\}.$$

De donde resulta:

$$v(x,y,z,t) = \mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\left\{v(x,y,z,0)\right\}\right\} * \frac{1}{8\pi^3} \iiint e^{-(D\alpha^2 t + D\beta^2 t + k\sigma^2 t)} e^{i\alpha x + i\beta y + i\sigma z} d\alpha d\beta d\sigma$$

$$\begin{aligned} v(x,y,z,t) &= v(x,y,z,0) * \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\alpha^2 t} e^{i\alpha x} d\alpha\right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\beta^2 t} e^{i\beta y} d\beta\right) \\ & \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\sigma^2 t} e^{i\sigma z} d\alpha\right), \end{aligned}$$

$$v(x, y, z, t) = v(x, y, z, 0) * \left[\mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-D\alpha^2 t} \right\} \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-D\beta^2 t} \right\} \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-D\sigma^2 t} \right\} \right],$$

de aplicar la definición (A.1.6). Si ahora se emplea el resultado (A.1.7) con $p = \sqrt{Dt}$, se tiene

$$v(x, y, z, t) = f(x, y, z) * \left[\frac{e^{\frac{-x^2}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi Dt}} \frac{e^{\frac{-y^2}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi Dt}} \frac{e^{\frac{-z^2}{4Dt}}}{2\sqrt{\pi Dt}} \right],$$

Por definición de convolución

$$v(x,y,z,t) = \frac{1}{8(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x',y',z') e^{\frac{-[(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2]}{4Dt}} dx' dy' dz'.$$
(C.1.5)

C.2. Ecuación de difusión 3D con una fuente puntual en dimensión infinita

El problema de calor 3D no homogéneo con una fuente puntual $F(x, y, z, t) = g(t)\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)$ aplicada en el punto (x_0, y_0, z_0) se describe como

$$\frac{\partial v}{\partial t} - D\nabla^2 v = F(x, y, z, t), \quad -\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t > 0$$
 (C.2.6)

sujeto a la condición inicial

$$v(x, y, z, 0) = f(x, y, z).$$
 (C.2.7)

Solución 3. Para resolver el modelo (C.2.6)-(C.2.7) se descompone en dos subproblemas, el primero con F = 0 y condición inicial no homogénea ($f \neq 0$) y el otro con f = 0 y la ecuación diferencial parcial no homogénea ($F \neq 0$), esto es

Encontrar \breve{v} tal que,

$$P_1: \begin{cases} \frac{\partial \breve{v}}{\partial t} = D\nabla^2 \breve{v} \\ \breve{v}(x, y, z, 0) = f(x, y, z) \end{cases}$$

Encontrar \hat{v} tal que,

$$P_2: \begin{cases} \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} = D\nabla^2 \hat{v} + F(x, y, z, t) \\ \hat{v}(x, y, z, 0) = 0 \end{cases}$$

Así la solución v del problema (C.2.6)-(C.2.7) se calcula como $v = \breve{v} + \hat{v}$. Observemos que la solución del problema P_1 esta dada en la ecuación (C.1.5). Ahora para resolver el problema P_2 se aplica la transformada de Fourier fijando t. Para la fuente puntual se obtiene que

$$\mathcal{F}\left\{g(t)\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)\right\} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}g(t)\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$$
$$e^{-i(\alpha x+\beta y+\sigma z)}dxdydz,$$

$$=g(t)\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)e^{-i(\alpha x+\beta y+\sigma z)}dxdydz=g(t)e^{-i(\alpha x_0+\beta y_0+\sigma z_0)},$$

donde se ha usado la propiedad de la función delta de Dirac (Hansen, 2014)

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x_0}) \, d\Omega = f(\mathbf{x_0}). \tag{C.2.8}$$

De esa manera, si $\mathcal{F}\left\{\hat{v}(x, y, z, t)\right\} = \hat{V}(\alpha, \beta, \sigma, t)$ y se emplean las identidades (A.0.3),(A.0.4) y (A.0.5), el problema se reduce a

$$\frac{d\hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,t)}{dt} = -D(\alpha^2 + \beta^2 + \sigma^2)\hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,t) + g(t)e^{-i(\alpha x_0 + \beta y_0 + \sigma z_0)}, \qquad \alpha,\beta,\sigma \in \mathbb{R}, \forall t > 0,$$
(C.2.9)

$$\hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,0) = 0. \tag{C.2.10}$$

Para resolver la ecuación lineal no homogénea se multiplica la identidad (C.2.9) por el factor integrante $e^{\int D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)d\tau}$, con lo que obtenemos

$$\frac{d\hat{V}}{d\tau}e^{\int D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)d\tau} + D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)\hat{V}e^{\int D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)d\tau} = g(\tau)e^{-i(\alpha x_0+\beta y_0+\sigma z_0)}e^{\int D(\alpha^2+\beta^2+\sigma^2)d\tau},$$

por lo cual,

$$\frac{d}{d\tau} \left(\hat{V} e^{\int D(\alpha^2 + \beta^2 + \sigma^2) d\tau} \right) = g(\tau) e^{-i(\alpha x_0 + \beta y_0 + \sigma z_0)} e^{\int D(\alpha^2 + \beta^2 + \sigma^2) d\tau}$$

Al integrar de 0 a t y aplicar la condición inicial (C.2.10) se tiene

$$\begin{split} \hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,t)e^{D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})t} - \hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,0)e^{D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(0)} &= \int_{0}^{t} g(\tau)e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})+D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})\tau}d\tau, \\ \hat{V}(\alpha,\beta,\sigma,t) &= \int_{0}^{t} g(\tau)e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})}e^{-D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(t-\tau)}d\tau. \end{split}$$

Para regresar a las variables originales se utiliza la transformada inversa de Fourier (A.1.9)

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\hat{V}(t)\right\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{\int_{0}^{t}g(\tau)e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})}e^{-D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(\tau-t)}d\tau\right\},$$
$$\hat{v}(x,y,z,t) = \frac{1}{8\pi^{3}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{t}g(\tau)e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})}e^{-D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(t-\tau)}e^{i(\alpha x+\beta y+\sigma z)}d\tau d\alpha d\beta d\sigma,$$
$$= \int_{0}^{t}g(\tau)\frac{1}{8\pi^{3}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})}e^{-D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(t-\tau)}e^{i(\alpha x+\beta y+\sigma z)}d\alpha d\beta d\sigma d\tau$$
$$= \int_{0}^{t}g(\tau)\mathcal{F}^{-1}\left\{\underbrace{e^{-i(\alpha x_{0}+\beta y_{0}+\sigma z_{0})}}_{F(\alpha,\beta,\sigma,t)}\underbrace{e^{-D(\alpha^{2}+\beta^{2}+\sigma^{2})(t-\tau)}}_{G(\alpha,\beta,\sigma,t)}\right\}d\tau.$$

Ahora, al aplicar el teorema de convolución (A.2.13) y las relaciones siguientes (A.1.10) y (A.1.11) da lugar a

$$\begin{split} \hat{v}(x,y,z,t) &= \int_0^t g(\tau) \left[\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0) * \frac{e^{\frac{-(x^2+y^2+z^2)}{4D(t-\tau)}}}{8(\pi D(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} \right] d\tau, \\ &= \int_0^t g(\tau) \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \delta(x'-x_0)\delta(y'-y_0)\delta(z'-z_0) \frac{e^{\frac{-[(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2]}{4D(t-\tau)}}}{8(\pi D(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} dx' dy' dz' d\tau \end{split}$$

Por lo cual, la solución del problema P_2 es

$$\hat{v}(x,y,z,t) = \int_0^t \frac{g(\tau)}{8(\pi D(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2]}{4D(t-\tau)}} d\tau.$$
(C.2.11)

Por lo tanto, la solución general del problema (C.2.6)-(C.2.7) es la suma de las soluciones (C.1.5) y (C.2.11):

$$v(x,y,z,t) = \frac{1}{8(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x',y',z') e^{\frac{-[(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2]}{4D(t-\tau)}} dx' dy' dz' + \int_{0}^{t} \frac{g(\tau)}{8(\pi D(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2]}{4D(t-\tau)}} d\tau.$$
(C.2.12)

Apéndice

Demostración del Teorema 1

Demostración. Supongamos que las funciones r y z definidas en (4.5.20) son continuamente diferenciables con respecto a ξ y η , entonces

$$dr = \frac{\partial r}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial r}{\partial \eta} d\eta,$$

$$dz = \frac{\partial z}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial z}{\partial \eta} d\eta,$$
 (D.0.1)

esto es

$$\begin{bmatrix} dr \\ dz \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial \xi} & \frac{\partial r}{\partial \eta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = J_e \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix}.$$
 (D.0.2)

Si $|J_e| = det(J_e) = \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta} \neq 0$, entonces

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = J_e^{-1} \begin{bmatrix} dr \\ dz \end{bmatrix} = \frac{1}{|J_e|} \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial \eta} & -\frac{\partial r}{\partial \eta} \\ -\frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial r}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dr \\ dz \end{bmatrix}.$$
 (D.0.3)

El área del paralelogramo formado por la dr y la dz se puede transformar a través de

$$drdz = \|(dr,0,0) \times (0,dz,0)\| = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial r}{\partial \xi} d\xi & \frac{\partial z}{\partial \xi} d\xi & 0 \\ \frac{\partial r}{\partial \eta} d\eta & \frac{\partial z}{\partial \eta} d\eta & 0 \end{vmatrix} = \|\mathbf{k}|J_e|d\xi d\eta\| = |J_e|d\xi d\eta.$$
(D.0.4)

Por otro lado, la transformada inversa isoparamétrica se escribe como

$$T_e^{-1} : \begin{cases} \xi = \xi(r, z) \\ \eta = \eta(r, z) \end{cases}, \quad T_e^{-1}(\Omega_e) = \hat{\Omega}, \tag{D.0.5}$$

y cumple que

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial\xi}{\partial r} & \frac{\partial\xi}{\partial z} \\ \frac{\partial\eta}{\partial r} & \frac{\partial\eta}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dr \\ dz \end{bmatrix}.$$
 (D.0.6)

Igualando las ecuaciones (D.0.3) y (D.0.6) resulta

Si $g: \Omega_e \longrightarrow \mathbb{R}$ es una función, entonces

$$g(r,z) = g(r(\xi,\eta), z(\xi,\eta)) = g(T_e(\xi,\eta)) = \hat{g}(\xi,\eta)$$
(D.0.8)

y además

$$\hat{g}(\xi,\eta) = g(T_e^{-1}(\xi,\eta)) = g(r,z).$$

En consecuencia,

$$\psi_{\lambda}^{e}(r,z) = \hat{\psi}_{\lambda}(\xi,\eta) = \hat{\psi}_{\lambda}(\xi(r,z),\eta(r,z)), \quad \lambda = 1, 2, \dots, nne.$$
 (D.0.9)

Por la regla de la cadena

$$\frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial r} = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r}, \qquad \qquad \frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial z} = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z}. \tag{D.0.10}$$

Ahora empleando la transformación isoparamétrica definida en (4.5.20) se tiene

$$\frac{\partial r}{\partial \xi} = \sum_{k=1}^{nne} r_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \xi}(\xi, \eta), \quad \frac{\partial r}{\partial \eta} = \sum_{k=1}^{nne} r_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \eta}(\xi, \eta), \quad \frac{\partial z}{\partial \xi} = \sum_{k=1}^{nne} z_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \xi}(\xi, \eta), \quad \frac{\partial z}{\partial \eta} = \sum_{k=1}^{nne} z_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \eta}(\xi, \eta).$$
(D.0.11)

Usando las identidades (D.0.11) en ecuación (D.0.7) se obtiene

$$\frac{\partial\xi}{\partial r} = \frac{1}{|J_e|} \frac{\partial z}{\partial \eta} = \frac{1}{|J_e|} \sum_{k=1}^{nne} z_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \eta}, \qquad \qquad \frac{\partial\xi}{\partial r} = -\frac{1}{|J_e|} \frac{\partial r}{\partial \eta} = -\frac{1}{|J_e|} \sum_{k=1}^{nne} r_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \eta}, \qquad (D.0.12)$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial r} = -\frac{1}{|J_e|} \frac{\partial z}{\partial \xi} = -\frac{1}{|J_e|} \sum_{k=1}^{nne} z_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \xi}, \qquad \qquad \frac{\partial\eta}{\partial z} = \frac{1}{|J_e|} \frac{\partial r}{\partial \xi} = \frac{1}{|J_e|} \sum_{k=1}^{nne} r_k \frac{\hat{\psi}_k}{\partial \xi}.$$

Sustituyendo las relaciones (D.0.12) en (D.0.10), da como resultado

$$\frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial r} = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \left[\frac{1}{|J_{e}|} \sum_{k=1}^{nne} z_{k} \frac{\hat{\psi}_{k}}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \left[-\frac{1}{|J_{e}|} \sum_{k=1}^{nne} z_{k} \frac{\hat{\psi}_{k}}{\partial \xi} \right] = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \left[\frac{1}{|J_{e}|} \frac{\partial z}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \left[-\frac{1}{|J_{e}|} \frac{\partial z}{\partial \xi} \right],$$

$$\frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial z} = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \left[-\frac{1}{|J_{e}|} \sum_{k=1}^{nne} r_{k} \frac{\hat{\psi}_{k}}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \left[\frac{1}{|J_{e}|} \sum_{k=1}^{nne} r_{k} \frac{\hat{\psi}_{k}}{\partial \xi} \right] = \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \xi} \left[-\frac{1}{|J_{e}|} \frac{\partial r}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}}{\partial \eta} \left[\frac{1}{|J_{e}|} \frac{\partial r}{\partial \xi} \right].$$
(D.0.13)

Entonces, de (D.0.3) se observa que

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial r} \\ \frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{1}{J_{e}} \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial \eta} & -\frac{\partial z}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial r}{\partial \eta} & \frac{\partial r}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}^{e}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}^{e}}{\partial \eta} \end{bmatrix} = J_{e}^{-T} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\psi}_{\lambda}^{e}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \psi_{\lambda}^{e}}{\partial \eta} \end{bmatrix}$$

En notación compacta

$$\nabla_{rz}\psi^e_{\lambda} = J_e^{-T}\nabla_{\xi\eta}\hat{\psi}^e_{\lambda}$$

Apéndice

Cálculo del caudal computacional

Las integrales se van a resolver por medio del método Simpson en cada uno de los elementos bicuadráticos. Para el cálculo de las derivadas se considera la aproximación de diferencia hacia atrás. El cálculo del flujo Q_1 en la ecuación (6.1.1) se escribe de manera aproximada como

$$Q_{1} = -2\pi \int_{0}^{r_{0}} \left[\frac{\kappa}{\alpha} \left(\frac{\Theta(r, z_{A}) - \Theta(r, z_{A} - h)}{h} \right) + \kappa \Theta(r, z_{A}) \right] r dr$$
$$= -2\pi \kappa \int_{0}^{r_{0}} \left[\left(\frac{1}{\alpha h} + 1 \right) \Theta(r, z_{A}) - \frac{1}{\alpha h} \Theta(r, z_{A} - h) \right] r dr,$$

al aplicar Simpson y hacer la integral sobre el elemento de referencia

$$Q_{1} = \frac{-2\pi\kappa h}{6} \sum_{e}^{nef1} \left[\left(\frac{1}{\alpha h} + 1 \right) \Theta^{e}(r_{1}, z_{A}) - \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e-M}(r_{1}, z_{A} - h) \right] r_{1}^{e} + 4 \left[\left(\frac{1}{\alpha h} + 1 \right) \Theta^{e}(r_{3}, z_{A}) - \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e-M}(r_{3}, z_{A} - h) \right] r_{3}^{e} + \left[\left(\frac{1}{\alpha h} + 1 \right) \Theta^{e}(r_{2}, z_{A}) - \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e-M}(r_{2}, z_{A} - h) \right] r_{2}^{e}.$$

donde nef1 es el número de elementos en la frontera 1 y las r_k^e con k = 1, 2, 3 corresponde a los nodos de los elementos bicuadráticos. Este mismo razonamiento se utiliza para Q_4 , así

$$Q_4 = 2\pi \int_0^{r_1} \left[\frac{\kappa}{\alpha} \left(\frac{\Theta(r, 0+h) - \Theta(r, 0)}{h} \right) + \kappa \Theta(r, 0) \right] r dr$$
$$= 2\pi \kappa \int_0^{r_1} \left[\left(1 - \frac{1}{\alpha h} \right) \Theta(r, 0) + \frac{1}{\alpha h} \Theta(r, 0+h) \right] r dr,$$

al utilizar Simpson resulta

$$Q_{4} = \frac{2\pi\kappa}{6} \sum_{e=1}^{nef4} h_{e} \left[\left(1 - \frac{1}{\alpha h} \right) \Theta^{e}(r_{1}, 0) + \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e+M}(r_{1}, 0+h) \right] r_{1}^{e} \\ + 4 \left[\left(1 - \frac{1}{\alpha h} \right) \Theta^{e}(r_{3}, 0) + \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e+M}(r_{3}, 0+h) \right] r_{3}^{e} \\ \left[\left(1 - \frac{1}{\alpha h} \right) \Theta^{e}(r_{2}, 0) + \frac{1}{\alpha h} \Theta^{e+M}(r_{2}, 0+h) \right] r_{2}^{e}.$$

donde nef4 es el número de elementos en la frontera 4.



Programas

F.1. Programa para la solución Analítica

Programa principal:

```
2% Definir variables:
         kappa
3
         alpha
4
         q
         Т
6
         rt
7
         zt
8
9% Dimensiones de variables:
        % rt = (alpha * rt)/2;
10
        \% zt = (alpha * zt)/2;
        % T = (alpha * kappa * T)/4;
12
13
4 % Malla:
       [r, z]=meshgrid(rt, zt);
15
        n=size(rt,2);
16
        m = size(zt, 2);
17
18
   for i = 1: m
19
         for j=1:n
20
21
                  rij=r(i,j);
                  zij=z(i,j);
22
23
24
25
26
27
28
29
                  [Int]=integral(rij, zij,T);
                  B1=exp(2*zij)*Int;
                  [phi_b] = funphib(rij, zij, T);
                  Phi(i, j) = 2*(phi_b - B1);
          end
    end
```

```
so
s% Dimensiones de phi:
s2 % phi=(Phi*alpha*q)/(8*pi);
```

Función integral:

```
function [Int2]=integral(r,z,T)
% Definir
_{3} b = 100;
_{4} a=z;
5 h = 0.01;
6 w=a:h:b;
7 \text{ nk} = size(w, 2);
8
9 for k= 1: nk
          wk=w(k);
10
          [ phi_b ] $=funphib(r,wk,T);
1
     F(k,1) = exp(-2*wk)*phi_b;
12
13 end
4
% Integral trapecio compuesto
   sum=0
16
7 for 1 = 2: nk-2
       sum=sum+F(1);
8
19 end
20
1 \ln t^2 = (\hbar/2) * (F(1) + 2*sum + F(nk));
2ænd
```

Función funcionphib (% ϕ_B):

```
1 function [phi_b]=funcionphib(r,z,T)
2% Definir
3 rho=sqrt{ r^2+ z^2};
4 A1=exp(z)/(2*rho);
5 RT=\sqrt{T};
6 A2= erfc(rho/2*RT+RT);
7 A3=erfc(rho/2*RT-RT);
8
2% Calcular phi_b
mphi_b=A1*(exp(rho)*A2+ exp(-rho)* A3);
11
pend
```

Bibliografía

- Abramowitz, Milton y Stegun, I. A. (1964). *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables,* volume 55. US Government printing office.
- Atkinson, J. (2017). The mechanics of soils and foundations. CRC press.
- Bayona, A., Rivera Sánchez, E., Valtierra, G., et al. (2006). *Caracterización de los ecosistemas, cambios en el uso del suelo y unidades paisajísticas en la reserva de la biósfera "Sierra Gorda" de Querétaro*, volume Reporte Técnico.12.
- Becker, E., Carey, G. F., et al. (1981). Finite elements: An introduction, volume 1. Prentice Hall.
- Blair, E. et al. (1963). Manual de riegos y avenamientos. IICA.
- Carslaw, Horatio Scott y Jaeger, J. C. (1959). *Conduction of heat in solids*. OXFORD University Press, second edition.
- Chirikjian, Gregory Scott y Kyatkin, A. B. (2016). *Harmonic analysis for engineers and applied scientists: updated and expanded edition*. Courier Dover Publications.
- Daly, Edorado y Porporato, A. (2005). A review of soil moisture dynamics: from rainfall infiltration to ecosystem response. *Environmental engineering science*, 22(1):9–24.
- Donea, Jean y Huerta, A. (2003). Finite element methods for flow problems. John Wiley & Sons.
- Friedman, Shmulik P. y Gamliel, A. (2019). Wetting patterns and relative water-uptake rates from a ring-shaped water source. *Soil Science Society of America Journal*, 83(1):48–57.
- Glenn, H., Fredrickson, D., et al. (2023). *Field theoretic simulations in soft matter and quantum fluids*. OXFORD University Press.
- Gómez-Tagle, A., Geissert, D., et al. (2014). Manual de infiltrometría: Infiltrómetro de tensión. *Instituto de Ecología, AC, Xalapa, Veracruz.*
- Hansen, E. W. (2014). Fourier transforms: Principles and Applications. John Wiley & Sons.

- Hoskins, R. F. (2009). Delta functions: Introduction to generalised functions. Horwood Publishing.
- Johnson, C. (2012). *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method.* Courier Corporation.
- List, Florian y Radu, F. A. (2016). A study on iterative methods for solving richards' equation. *Computational Geosciences*, 20:341–353.
- Logsdon, S. D. y Jaynes, D. B. (1993). Methodology for determining hydraulic conductivity with tension infiltrometers. *Soil Science Society of America Journal*, 57(6):1426–1431.
- Mañas, F. M. d. S. O. (2005). Agua y agronomía. Mundi-Prensa Libros.
- Mendoza-Villa, O. N., Cambrón-Sandoval, V. H., Cerano-Paredes, J., et al. (2018). Reconstruction of historical precipitation (1877-2014) for the southwest of the sierra gorda biosphere reserve, querétaro, méxico. *Revista Chapingo serie ciencias forestales y del ambiente*, 24(3):371–386.
- Miyazaki, T. (2005). Water flow in soils. CRC Press.
- Munson, B. R., Young, D. F., et al. (2004). Fundamentos da mecânica dos fluidos. Editora Blucher.
- Pepper, Darrell W. y Heinrich, J. C. (2005). *The finite element method: basic concepts and applications*. Taylor & Francis.
- Philip, J. R. (1971). General theorem on steady infiltration from surface sources, with application to point and line sources. *Soil Science Society of America Journal*, 35(6):867–871.
- Pulido, A. Y. (2019). Ensayo de infiltración y modelación de 3 suelos con uso diferente en la Sierra Gorda de Querétaro, México. Tesis Licenciatura. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Reddy, J. N. (1993). An introduction to the finite element method mcgraw-hill. Inc., New York.
- Shukla, M. K. (2013). Soil physics: An introduction. CRC press.
- Silva Robledo, H., Silva Candia, P., Garrido Salinas, M., et al. (2015). Manual de estudio y ejercicios relacionados con el contenido de agua en el suelo y su uso por los cultivos.
- Sánchez, Judith Yareli y Sandoval, M. L. (noviembre 2020). Mixed finite elements method for singlephase flow in porous media. 4to Congreso Nacional de Investigación Interdisciplinaria, Enfrentando retos emergentes de ciencia y tecnología. Editores Mayra Antonio-Cruz, Carlos Alejandro Merlo-Zapata, Celso Márquez Sánchez. Ecoe Ediciones,pág 642.
- Warrick, A. W. (1974). Time-dependent linearized infiltration. i. point sources. *Soil Science Society* of America Journal, 38(3):383–386.
- Wooding, R. A. (1968). Steady infiltration from a shallow circular pond. *Water resources research*, 4(6):1259–1273.

ACTA DE EXAMEN DE GRADO



Matrícula: 2202800031

No. 00232

