

Resumen

Esta tesis, presenta los resultados de simulaciones numéricas de diferentes escenarios sintéticos de flujo de agua subterránea, haciendo principal énfasis en la implementación de la plataforma computacional FeniCS escrito en el lenguaje de programación Python, para resolver escenarios donde la conductividad hidráulica varia dentro del dominio.

La plataforma computacional FeniCS hace uso del método de elementos finitos para la resolución de la ecuación de flujo, consiguiendo resolver exitosamente casos de flujo en materiales homogéneos y con una heterogeneidad predefinida, además, debido a la naturaleza del FEM, permite el uso de geometrías irregulares e imposición de condiciones de frontera complejas, que representa una gran parte de las situaciones encontradas en la práctica. Además, a partir del acoplamiento con el paquete Gstat del lenguaje de programación R, permite generar simulaciones no condicionales que recrean la naturaleza aleatoria de la conductividad hidráulica en un medio poroso, siendo una herramienta de código abierto con gran potencial para el estudio de flujo de agua subterránea.

Índice general

Resumen	I
Indice General	III
Lista de figuras	V
Introducción	VI
1. Fundamentos de flujo en aguas subterráneas	1
1.1. Variables y parámetros hidráulicos	1
1.1.1. El experimento de Darcy	2
1.1.2. Carga hidráulica y potencial hidráulico	3
1.1.3. Conductividad hidráulica	6
1.2. Variabilidad espacial	8
1.2.1. Homogeneidad y heterogeneidad	8
1.2.2. Distribución geoestadística de la heterogeneidad	11
1.3. La ecuación de flujo	15
2. Metodología	18
2.1. Bibliotecas FEniCS	18
2.2. Método de elemento finito	21
2.2.1. Formulación integral	21
2.2.2. Elementos Finitos	25
2.2.3. Resolución del problema variacional	32
2.3. Implementación computacional	34
2.3.1. Implementación con FeniCS	34
2.3.2. Implementación de la heterogeneidad	36
3. Modelos y simulaciones numéricas	41
3.1. Caso homogéneo	41
3.1.1. Simulación 1: Condiciones de fronteras simples	41
3.1.2. Simulación 2: Condiciones de fronteras complejas	47
3.2. Caso heterogéneo simple	50
3.2.1. Simulación 3: Condiciones de fronteras simples	50
3.2.2. Simulación 4: Condiciones de fronteras complejas	56
3.3. Caso heterogéneo aleatorio	58

3.3.1. Simulación 5: Condiciones de frontera simples	59
Discusión	64
Conclusiones	65
Apéndices	67
A. Códigos de simulaciones numéricas	68
A.1. Códigos del caso homogéneo	68
A.2. Códigos del caso heterogéneo simple	72
A.3. Códigos del caso heterogéneo aleatorio	72
B. Códigos en R para implementación de heterogeneidad	74
B.1. Busqueda de centroides y simulación no condicional	74
Bibliografía	76

Índice de figuras

1.1. Esquematización del experimento de Darcy (Toth, 2009)	2
1.2. Valores de conductividad hidráulica para varios tipos de sedimentos y roca consolidada (De Marsily,1986)	8
1.3. Heterogeneidad en capas y en tendencia (Freeze and Cherry, 1979)	10
1.4. Distribuciones de probabilidad de la conductividad hidráulica	11
1.5. Elementos de un variograma transitivo (Gallardo, 2009)	13
1.6. Modelos de semivariogramas teóricos (Gallardo, 2006)	15
1.7. Volumen elemental en ecuación de continuidad (Toth,2009)	16
2.1. Esquema de la estructura de FEniCS (Logg et al, 2012)	19
2.2. Funciones y clases de DOLFIN (Logg et al, 2012)	20
2.3. Triángulo de Lagrange con 3 grados de libertad, (Logg et al, 2012)	26
2.4. Continuidad de la función de interpolación (Istok, 1989)	26
2.5. Arriba; elemento subparamétrico; Intermedio, elemento isoparamétrico; Abajo, elemento superparamétrico (Istok, 1989)	28
2.6. Elemento finito triángular para dimensiones $q=1,2,3,4,5,6$ (Logg et al, 2012) .	31
2.7. Diferencias entre Galerkin Continuo (Derecha) y Discontinuo (Izquierda) (Logg et al, 2012)	31
2.8. Ensamblaje de elementos finitos (Logg et al, 2012)	34
2.9. Diferente refinación mallas	35
2.10. Centroides para cada elemento de una malla regular	38
2.11. Malla marcada por elemento	39
3.1. Modelo matemático y conceptual (Vista en planta)	42
3.2. Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en planta) .	43
3.3. Modelo conceptual y matemático (Vista en perfil)	44
3.4. Arriba, Gráfica de recarga y descarga; Abajo, Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en perfil)	45
3.5. Mapa de error absoluto en el dominio; solución con FeniCS vs solución analítica de Toth ($m=200$)	46
3.6. Modelo conceptual y matemático	48
3.7. Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en perfil) .	49
3.8. Modelo matemático y conceptual	51
3.9. Cambio de facies de grano fino a grueso	52
3.10. Cambio de facies de grano grueso a fino	52

3.11. Modelo matemático y conceptual	53
3.12. Estratificación grano grueso a fino	54
3.13. Estratificación grano fino a grueso	55
3.14. Modelo matemático conceptual	56
3.15. Estratificación grano fino a grueso	57
3.16. Estratificación grano grueso a fino	58
3.17. Distribución de conductividad hidráulica logarítmica resultado de la simulación no condicional $\ln(K)$	60
3.18. Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio isótropo	60
3.19. Distribución de la conductividad hidráulica logarítmica $\ln(K)$ para un medio anisótropo con dirección prefencial Norte	61
3.20. Distribución de la conductividad hidráulica logarítmica $\ln(K)$ para un medio anisótropo con dirección prefencial Este	62
3.21. Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio anisótropo (Dirección norte)	62
3.22. Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio anisótropo (Dirección este)	63

Introducción

El análisis del flujo de agua subterránea en medios porosos es un problema que ha sido estudiado a lo largo de varias décadas; se trata de un estudio multidisciplinario que involucra principalmente la geología, la hidrología, la física y las matemáticas. Para solucionar este problema se han diseñado numerosos modelos matemáticos que simplifican la compleja realidad del comportamiento del flujo de agua subterránea y buscan contemplar los aspectos geológicos más relevantes dependiendo del objetivo del estudio. Las ecuaciones que modelan los sistemas de flujo de agua subterránea en el subsuelo pueden ser resueltas a partir de diversos métodos numéricos para obtener la función solución en un dominio discreto que representa el área de interés donde nos interesa saber el comportamiento del flujo; entre ellos destaca el método de elemento finito que es posible implementar con cualquier lenguaje de programación.

A partir de su estudio teórico y la aplicación de las metodologías para modelar los sistemas de flujo de agua subterránea, se desarrollaron diversas plataformas que se enfocan a la resolución de este tipo de problemas, siendo el principal de ellos MODFLOW (USGS, 1983), que resuelve las ecuaciones a partir del método de diferencias finitas; debido a la popularidad de esta plataforma y la necesidad de modelar el agua subterránea para usos prácticos y científicos, se crearon softwares comerciales a partir de las plataformas ya existentes; sin embargo, la limitación de Modflow debido a los principios de los cuales depende el método de diferencias finitas, hizo que otras opciones fueran atractivas como la implementación del método de elemento finito partir de plataformas computacionales, uno de ellos es el proyecto FeniCS que resulta de principal interés en este trabajo.

La variabilidad espacial es uno de los principales problemas a los que se han afrontado los hidrogeólogos al momento de realizar la modelación de los sistemas de aguas subterráneas debido a la necesidad de conocer las propiedades del subsuelo para determinar los patrones de flujo; estudios previos realizados por Gelhar et al. (1992) muestran a partir de la recolección y análisis de varios experimentos de campo, que los diferentes grados de heterogeneidad de un acuífero afectan la fiabilidad en la medición de la dispersividad; Boggs et al. (1992) por otro lado, indican en su trabajo una alta asímetría en la distribución de la concentración en un experimento de trazador debido a las variaciones de hasta 2 órdenes de la conductividad hidráulica entre los sitios de medición, mientras que W. Huang et al. (2003) afirma la importancia del tratamiento de la heterogeneidad a escalas menores (sedimentos y granos) para el transporte de solutos [8] [7] [3].

El problema de la heterogeneidad en la modelación se ha vuelto fundamental para obtener patrones de flujo más cercanos a la realidad y hacer una correcta evaluación de los recursos hídricos, por lo que se han propuesto diversas formas de tratar este problema, recreando una imagen de la distribución de conductividades en el subsuelo buscando minimizar la incertidumbre entre los datos medidos, la información geológica disponible y la distribución real de los parámetros del subsuelo (Koltermann and Gorelick, 1996) [12].

El objetivo principal de este trabajo es el análisis de un conjunto de simulaciones que permitan describir el comportamiento del flujo de agua subterráneo en medios porosos, haciendo énfasis en los medios porosos heterogéneos; para ello se consideraron dos posibilidades de un medio heterogéneo. El primer caso corresponde a un medio compuesto por dos formaciones, donde cada formación tiene parámetros (conductividad hidráulica) uniformes, pero ambos parámetros difieren entre sí. El segundo caso corresponde a una sola formación geológica pero que es heterogénea en sus propiedades. Este segundo caso se acerca más a lo que se encuentra en las formaciones geológicas reales (Gelhar et al. 1992; Boggs et al. 1992; Koltermann y Gorelick 1996; Huang et al. 2003; de Marsily et al 2005; Vrionis et al. 2005).

Estos modelos se resolvieron a partir del método de elemento finito implementado con FeniCS; plataforma computacional gratuito y libre, que provee herramientas para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales (ecuación de flujo de agua subterránea) mediante el método de elemento finito. El desarrollo de códigos computacionales para la modelación de agua subterránea a partir de software libre y abierto, proporciona un potencial para la elaboración de herramientas más completas y personalizables para la resolución de problemas de modelación más complejos que se encuentran en la práctica.

La estructura de esta tesis consiste en tres capítulos que abarcan todos los aspectos del problema de flujo en medios porosos heterogéneos, una de conclusiones en el que se compara el análisis de resultados con el objetivo propuesto, un apéndice en el que se describe detalladamente las técnicas empleadas para la resolución del problema y uno con las referencias bibliográficas usadas para el desarrollo de esta tesis.

El **primer capítulo** de esta tesis explica los fundamentos teóricos del flujo de agua subterránea, las características de los parámetros que rigen su comportamiento y los principios de su variabilidad espacial, pasando a la formulación de la ecuación de flujo que integra los conceptos anteriores.

El **segundo capítulo** consiste en la descripción de la metodología empleada para generar las simulaciones numéricas, explicando los conceptos elementales del método de elemento finito, su aplicación con las bibliotecas FeniCS para el problema de flujo de agua subterránea y la descripción de los pasos realizados para generar los modelos numéricos.

El **tercer capítulo** presenta los resultados de las simulaciones y el análisis para cada simulación realizada.

Capítulo 1

Fundamentos de flujo en aguas subterráneas

En este capítulo se abordan los principios básicos de la dinámica del agua subterránea en medios porosos, se hace una revisión de los parámetros y variables que condicionan el movimiento del flujo de agua subterránea, principalmente la carga hidráulica y la conductividad hidráulica que son con los que se trabajara en esta tesis; posteriormente, se describirán a profundidad, se discutirá el significado físico de la carga hidráulica y la distribución geoestadística de la conductividad como una forma de caracterizar la heterogeneidad. Finalmente, se deduce la ecuación de flujo a partir de los conceptos anteriormente desarrollados y la ecuación de continuidad.

1.1. Variables y parámetros hidráulicos

El movimiento del flujo se ve condicionado tanto por las propiedades del medio como las del fluido, la interacción de estas propiedades y su distribución espacial por toda la zona de estudio nos permiten entender la dinámica del flujo en un medio poroso. El estudio de estas propiedades resulta ser de importancia para conocer aspectos relevantes del medio, que es el resultado de un conjunto de procesos geológicos como las zonas de recarga y descarga de un acuífero dentro de una cuenca sedimentaria. Esta información nos permite conocer las características necesarias de un pozo o la trayectoria de un contaminante para un proyecto de remediación.

Para comprender la dinámica de fluidos en un medio poroso, es necesario describir principalmente dos elementos que conforman este sistema físico; la carga hidráulica, variable cuya distribución determina la dirección y magnitud del flujo, y la conductividad hidráulica, parámetro que depende de las propiedades del medio. Ambos elementos son posibles de obtener de forma directa a partir de instrumentos de medición o indirectamente con leyes experimentales que las relacionan entre sí. En esta tesis se hablará en particular del movimiento de flujo con agua como fluido de trabajo, aunque tanto la carga hidráulica como la conductividad hidráulica, son conceptos que pueden generalizarse para todo tipo de fluido.

1.1.1. El experimento de Darcy

El primer experimento sobre el comportamiento de fluidos en medios porosos se registró por primera vez en 1856 por el hidráulico francés Henry Darcy, su estudio sobre medios porosos llevó al descubrimiento de una ley empírica que relaciona la cantidad de flujo con las propiedades del medio, el área donde el campo de flujo intercepta de forma normal y las diferencias en las medidas de posición del flujo respecto a la longitud del tramo medido, esta ley es también conocida como la ecuación de Darcy que describe el fenómeno físico del movimiento de agua en cualquier medio poroso.

El experimento consiste en la adquisición de un tubo cilíndrico cuyo interior fue llenado con arena representando el material poroso y un par de manómetros colocados en la entrada y la salida del cilindro, posteriormente se introdujo un líquido en la entrada y se midieron los cambios del flujo volúmetrico en la salida donde se observaron los parámetros dentro del medio que afectan su comportamiento. Este experimento se repitió en distintas ocasiones cambiando el tamaño de grano de la arena, el tipo de fluido y variando la orientación y posición del cilindro, obteniendo diferentes resultados en cada uno de los experimentos (Toth, 2009) [21].

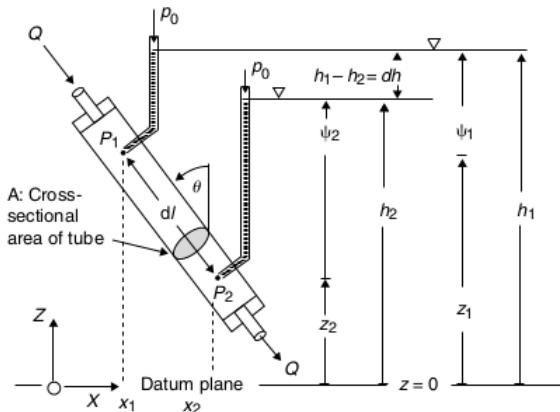


Figura 1.1: Esquematización del experimento de Darcy (Toth, 2009).

A partir del esquema del experimento (figura 1.1) podemos observar la presencia de manómetros que miden la presión en la entrada y salida del cilindro (P_1 y P_2) que conectan con la presión atmosférica P_0 , la presión que existe en esos puntos es proporcional a altura de la columna de fluido representada por ψ (presión de carga), mientras que la altura de los puntos de medición P_1 y P_2 desde un dato de referencia $z = 0$ se representa con z_1 y z_2 ; Darcy con este experimento encontró que el flujo volumétrico era directamente proporcional al área transversal del cilindro y a partir del estudio de los manómetros instalados, se dio cuenta que el flujo también era directamente proporcional a la diferencia de la altura de los puntos de medición más la altura de la columna del fluido en el manómetro medida a partir de un datum de referencia respecto a la longitud entre la posición del fluido en el medio poroso, esta suma le llamó carga hidráulica donde tanto en la Figura 1.1 como en la literatura se ve representada como h . En casos prácticos se toma como nivel de referencia el nivel del mar

aunque puede asumir cualquier valor. La influencia de las propiedades del medio y del fluido, se concentran en la constante de proporcionalidad K también conocida como conductividad hidráulica, que supone valores bajos para sedimentos finos como arcillas y valores altos para arenas y gravas. Las ideas anteriores se pueden resumir en la siguiente expresión, llamada ecuación de Darcy:

$$Q = -KA \frac{dh}{dl} \quad (1.1)$$

El signo negativo es debido a que la dirección del flujo es contraria a la dirección del gradiente hidráulico (mayor a menor carga hidráulica). La ecuación 1.1 puede reducirse a una expresión más simple dividiendo el flujo volumétrico entre el área, llamada velocidad de Darcy debido a sus unidades a pesar de que no representa la velocidad del flujo sino la cantidad de flujo que descarga por unidad de tiempo y por unidad de área, por lo que su nombre correcto sería descarga específica. De la misma forma, la conductividad hidráulica a pesar de tener unidades de velocidad, representa la cantidad de flujo específico que ocurre por cada unidad de gradiente hidráulico por lo que significa la facilidad del flujo en atravesar un medio permeable.

$$q = Q/A \quad (1.2)$$

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad (1.3)$$

A partir de lo analizado por Darcy, el flujo por unidad de área q estará determinado por la conductividad hidráulica, que tiene unidades de longitud sobre tiempo [L/T] y el gradiente de cargas hidráulicas con unidades adimensionales. Es necesario mencionar que el concepto de descarga específica es una cantidad que se deriva del análisis macroscópico del medio poroso aunque el fenómeno existe a nivel microscópico para cada dirección que toma el flujo; esta simplificación toma un valor promedio de la descarga específica en la ecuación de Darcy, la cual es válida para cualquier tipo de fluido en un medio poroso por lo que es útil no solo en el área de hidrogeología sino también para describir el movimiento de hidrocarburos y contaminantes [5] [21].

1.1.2. Carga hidráulica y potencial hidráulico

A partir del experimento de Darcy podemos entender que el movimiento del flujo no se ve determinado por la variación de la presión en el fluido; para entender esto, se realiza el mismo experimento introduciendo el flujo volumétrico en la parte baja en vez de la parte alta, donde en ambos experimentos se tienen diferentes valores de presión para cada punto. En el caso donde el flujo se introduce desde arriba, la presión del flujo en P_1 es menor que en P_2 , como el descrito en la figura 1.1, cuando el movimiento del flujo se dirige de abajo hacia arriba aún si la presión en P_2 es mayor que en P_1 , por lo que la única forma de determinar la dirección del flujo es con la carga hidráulica; de esto se concluye que la presión de carga /psi es una componente de la carga hidráulica y su valor no determina la dirección del flujo.

El flujo en medios porosos es un fenómeno físico análogo a otros determinados de forma experimental como la ley de Ohm para la corriente eléctrica y la ley de Fourier para el flujo

de calor; ambas leyes físicas tienen la característica de contar con un potencial teórico cuya variación respecto a su posición provoca el flujo cuando existe una disminución de energía (J. Tóth., 2009); de la misma forma podemos hacer un análisis de la carga hidráulica para determinar su naturaleza física haciendo un balance de energía a través de un parámetro que llamaremos potencial hidráulico (Φ), para definir este parámetro haremos uso de un sistema inicial que consiste en un fluido de masa elemental m en un punto P_1 de un medio poroso que tiene las siguientes propiedades iniciales: un volumen $V = V_0$, una presión $p = p_0$, una elevación $z = z_0$, una densidad $\rho = \rho_1$ y una velocidad $v = v_0$. Este sistema representa un estado inicial donde se aplicará un cambio de estado a un punto P_2 a partir del trabajo realizado provocando la ganancia o perdida de energía, Hubbert(1940) define la energía como "el trabajo total requerido para realizar una transformación de un estado inicial arbitrario a un estado final". A partir de esta definición podemos obtener el trabajo realizado por la masa elemental de fluido m al pasar al estado final P_2 ; definiendo sus propiedades en el estado final: V_1 , p_1 , z_1 , ρ_1 y v_1 , podemos definir tres formas en las que la energía aporta en el cálculo del trabajo total. La primer forma es el trabajo que requiere la masa m contra la fuerza de gravedad de una altura z_0 a z_1 . La energía potencial aumentará por cada incremento en el trabajo de la siguiente forma [9] .

$$w1 = mg(z_0 - z_1) = mgdz \quad (1.4)$$

La segunda forma es la energía cinética que el trabajo requiere para mover la masa m de una velocidad v_0 a una velocidad v_1 . El incremento de la energía cinética se ve reflejado por el trabajo de la siguiente forma:

$$w2 = \frac{m}{2}(v_1^2 - v_0^2) \quad (1.5)$$

$$w2 = \frac{mdv^2}{2} \quad (1.6)$$

La última forma del trabajo es la energía debida a la relajación o expansión de los esfuerzos producidos en el interior del fluido debido a los cambios de presión ($\rho_0 a \rho_1$). Este cambio en las fuerzas internas provocan un cambio en el volumen y densidad para fluidos compresibles:

$$w3 = m \int_{p_0}^{p_1} \frac{V_0 - V_1}{m} dp \quad (1.7)$$

$$w3 = m \int_{p_0}^{p_1} \frac{dp}{\rho} \quad (1.8)$$

La suma de estas tres componentes es el trabajo requerido para mover la masa elemental m del punto P0 a P1.

$$W = w1 + w2 + w3 \quad (1.9)$$

$$W = mgdz + \frac{mdv^2}{2} + m \int_{p_0}^{p_1} \frac{dp}{\rho} \quad (1.10)$$

El potencial hidráulico lo podemos definir como la cantidad de trabajo por unidad de masa, es decir, la cantidad de energía que se debe proporcionar al sistema para que una unidad de masa se mueva de un punto a otro, esto es:

$$\Phi = \frac{W}{m} = gdz + \frac{dv^2}{2} + \int_{p0}^{p1} \frac{dp}{\rho} \quad (1.11)$$

Para simplificar la expresión anterior, podemos definir el estado inicial a partir de datos de referencia comunes, para el caso de z_0 la altitud al nivel del mar ($z_0 = 0$), la velocidad parte de un estado de reposo ($v_0 = 0$) y la presión inicial es igual a la atmosférica ($p_0 = p_{atm}$). Por lo que la ecuación 1.11 queda expresada de la siguiente manera:

$$\Phi = \frac{W}{m} = gz + \frac{v^2}{2} + \int_{p0}^{p1} \frac{dp}{\rho} \quad (1.12)$$

Considerando que los principales fluidos en el subsuelo (como el agua) solo son ligeramente compresibles, podemos suponer que la densidad del fluido es aproximadamente constante y que por lo tanto no es una función de la presión; además, la velocidad del flujo en medios porosos es tan pequeña que se supone que el aporte de energía cinética al trabajo es casi nula ($w_2 = 0$), con estas consideraciones, el potencial hidráulico queda expresado como:

$$\Phi = \frac{W}{m} = gz + \frac{p_0 - p_1}{\rho} \quad (1.13)$$

Con el potencial hidráulico definido es necesario determinar si existe una relación con la carga hidráulica que nos permita entender su significado físico, partiendo del experimento de Darcy, tomamos en cuenta que la carga hidráulica es la suma de la altura de la columna de agua más la del punto de medición respecto a un dato de referencia (en este caso el nivel del mar $z_0 = 0$), quedando definida de la siguiente forma:

$$h = \Psi + z \quad (1.14)$$

El experimento de Darcy maneja dos manómetros que miden la presión en dos posiciones distintas del flujo, suponiendo que en el estado final de nuestro sistema podemos hacer la medición de la presión con un manómetro y suponiendo que la presión que se maneja es absoluta, la presión estará expresada por la siguiente ecuación:

$$p = g\rho\psi + p_0 \quad (1.15)$$

Para introducir el concepto de carga hidráulica en el trabajo realizado al mover la masa elemental de fluido, despejamos la ecuación 1.14 en términos de la altura de la columna de fluido Ψ , y sustituimos en la ecuación 1.15 para obtener la presión en términos de la carga hidráulica h y la elevación del punto de medición z (ecuación 1.16), esta presión se sustituye en la ecuación de potencial hidráulico obteniendo la ecuación 1.19.

$$p = g\rho(h - z) + p_0 \quad (1.16)$$

$$\Phi = gz + \frac{p_0 - (g\rho(h - z) + p_0)}{\rho} \quad (1.17)$$

$$\Phi = gz + g(h - z) \quad (1.18)$$

$$\Phi = gh \quad (1.19)$$

La ecuación 1.18 es la conclusión que necesitamos para afirmar que la carga hidráulica es entonces una medida de la energía del sistema que se requiere para el movimiento de un fluido, donde h es proporcional a Φ y g es la constante de proporcionalidad. Esta misma conclusión puede obtenerse de forma inversa si tomamos en cuenta que las presiones que trabajamos son manómetricas y por lo tanto $p_0 = 0$, sustituimos el nuevo valor inicial de la presión en la ecuación 1.13 e igualamos con la ecuación 1.18 [5] [21].

$$\Phi = gh = gz + \frac{p}{\rho} \quad (1.20)$$

$$h = z + \frac{p}{g\rho} = z + \Psi \quad (1.21)$$

donde la ecuación 1.21 es la expresión obtenida del experimento de Darcy. De esta ecuación hay algunos puntos importantes de aclarar:

1. La carga hidráulica esta compuesta por tres componentes, la elevación de la posición z , la carga de presión en el punto Ψ y la expresión de energía cinética que para efectos de un medio poroso es insignificante.
2. Al suponer que la densidad del fluido es constante, la ecuación 1.21 se refiere solo a fluidos homogéneos, que en nuestro caso será agua.
3. El nivel de referencia para el cálculo de la carga hidráulica se toma generalmente como $z = 0$, en el caso que el punto de medición de carga hidráulica sea menor al dato de referencia, el valor negativo compensa el valor real de la carga hidráulica.

1.1.3. Conductividad hidráulica

Es más fácil conocer el significado físico de la conductividad hidráulica debido a que se encuentra asociado principalmente al medio donde circula el flujo y las características del fluido. En el experimento de Darcy para concluir la forma en que la descarga específica era afectada por el medio y el tipo de fluido, se realizaron varias pruebas donde el gradiente hidráulico se mantenía constante y se cambiaba el tamaño del grano, dando paso a una descarga específica (q) distinta para cada prueba; sin embargo, para determinar que el medio y su constitución eran insuficientes para caracterizar la conductividad hidráulica, se realizaron otros experimentos donde se hizo la construcción de un medio poroso ideal con partículas hechas de vidrio y manteniendo el gradiente hidráulico constante, se hicieron pruebas para diferentes tipos de fluidos. El resultado de estos experimentos permitió obtener que la descarga específica era proporcional al cuadrado del tamaño de grano del medio poroso (d) y a la densidad del fluido (ρ) e inversamente proporcional a la viscosidad del fluido (μ); estos términos en conjunto con las observaciones del gradiente hidráulico nos permiten construir la ecuación de Darcy de la siguiente forma.

$$q = -M \frac{d^2 \rho}{\mu} \frac{dh}{dl} \quad (1.22)$$

Donde el valor M de la ecuación 1.22 es la constante de proporcionalidad. Hubbert(1940) descubrió esta relaciones y las demostró a partir de estudios de esfuerzos intersticiales del flujo a través del medio poroso donde las dimensiones de las propiedades nos dan a entender que la constante M tiene unidades de aceleración que corresponden a la constante gravitacional y tienen una relación directa con el medio poroso, quedando que la constante $M = gc$ donde c es una función exclusiva de las propiedades del medio diferentes al tamaño de grano, tales como su esfericidad, redondez o empaquetamiento, además de que tiene unidades adimensionales [9]; sustituyendo esta nueva relación en la ecuación 1.22 obtenemos:

$$q = -\frac{cd^2 g \rho}{\mu} \frac{dh}{dl} \quad (1.23)$$

Como podemos observar, la conductividad hidráulica es un fenómeno que depende tanto del medio como del fluido. Una forma de encontrar un término similar a K pero independiente del tipo de fluido, es asociando el cuadrado del tamaño de grano d^2 con la constante c , obteniendo un nuevo valor llamado permeabilidad específica k cuyas unidades son de longitud al cuadrado L^2 ; este parámetro se ve afectado principalmente por los siguientes fenómenos [20] .

1. Características texturales como tamaño de grano, empaquetamiento, espacios vacíos, distribución y forma
2. Tipo de sedimento, dsitribución y cantidad
3. Porosidad secundaria

La permeabilidad k es de gran utilidad en el campo de la hidrogeología cuando se trata de medios porosos no saturados, representar un sistema bifásico aire-agua o un sistema trifásico para el estudio de transporte de contaminantes. Generalmente tanto la conductividad hidráulica como la permeabilidad suelen tener valores muy bajos en las unidades básicas del SI por lo que usualmente se representan en m/da en el caso de K y se define el Darcy para k ,que es aproximadamente igual a $10^{-8}cm^2$.

Estudios sobre las características de la conductividad hidráulica (K) han provisto de valores para diferentes tipos de materiales geológicos, por lo que es posible notar que para cada material existe una variación de conductividad hidráulica de varios ordenes, un ejemplo de estos valores es dado por De Marsily(1986) en la figura 1.2, donde podemos observar como la conductividad hidráulica de las arcillas varian con la arena hasta en tres ordenes [5] [15].

Medium	K (m/day)
UNCONSOLIDATED DEPOSITS	
Clay	1–5
Fine sand	5–20
Medium sand	$20\text{--}10^2$
Coarse sand	$10^2\text{--}10^3$
Gravel	$5\text{--}10^2$
Gravel and gravel mixes	$10^3\text{--}10^{-1}$
HARD ROCKS	
Chalk (very variable according to fissures if not soft)	30.0
Sandstone	3.1
Granite, weathered	1.4
Limestone	0.94
Dolomite	0.001

Figura 1.2: Valores de conductividad hidráulica para varios tipos de sedimentos y roca consolidada (De Marsily, 1986).

1.2. Variabilidad espacial

Los parámetros estudiados en la sección anterior se distribuyen de diferente forma en las formaciones geológicas, la carga hidráulica es un valor que se rige de forma determinística a partir una ley física, mientras que la distribución de la conductividad hidráulica (suponiendo que el fluido de trabajo es el agua) depende principalmente de las propiedades del medio y de la geología de la zona por lo que el estudio de la variación de este parámetro se da esencialmente en términos estadísticos que son de vital importancia para conocer las rutas en las que viaja el flujo de agua.

1.2.1. Homogeneidad y heterogeneidad

La distribución de la conductividad hidráulica puede ser definida con un medio homogéneo, es decir, que el medio poroso esta configurado de tal forma que la conductividad hidráulica no varia en cada punto del mismo. La expresión que se ocupa para describir la homogeneidad, es la siguiente:

$$K(x, y, z) = C \quad (1.24)$$

Donde K es una función de la posición del dominio (medio poroso) y C es una constante. En dado caso que K sea diferente a una constante y sea una función de la posición, nos encontramos con un material heterogéneo cuya conductividad esta espacialmente distribuida por $K(x, y, z)$.

La heterogeneidad describe con mayor exactitud la complejidad de las formaciones geológicas que nos enfrentamos en la realidad. En el sentido estricto de la definición de homogeneidad, no existe formación alguna que tenga esas características debido a que las formaciones geológicas son resultado de un conjunto de procesos geológicos que hacen imposible una homogeneización de sus componentes, por lo que para describir la heterogeneidad hay que tener en cuenta el ambiente geológico y cualquier combinación de estos. El tratamiento de la heterogeneidad en modelos de agua subterránea se pueden clasificar a partir del tipo de distribución de sus valores de conductividad y ajustar a modelos geológicos existentes.

El primer tipo de distribución de la heterogeneidad, es observada en el depósito intermitente de sedimentos que generan la estratificación en cuencas sedimentarias. En este tipo de estructuras geológicas existe una intercalación vertical de material geológico con diferentes valores de conductividad hidráulica, en cada capa se puede asumir un valor constante de conductividad hidráulica, sin embargo, el conjunto de bloques es un sistema heterogéneo. Un ambiente sedimentario donde existe una combinación de depósitos de alta energía con depósitos de baja energía, generaría una secuencia de arcillas con arenas cuya composición genera una alta variación en la conductividad hidráulica, por lo que, combinado a la porosidad, la unidad de arenas es un potencial acuífero con barreras impermeables que representan las capas de arcillas. Un caso distinto es el causado debido a discontinuidades dentro de la formación debido a depósito reciente de sedimentos; en ambos casos, la configuración de la heterogeneidad es el punto de partida para definir la forma en la que se va a comportar el fluido en las formaciones geológicas.

En el caso de ambientes sedimentarios donde existe una variación gradual del material a lo largo del espacio, se define otro tipo de distribución, una tendencia de heterogeneidad donde la conductividad hidráulica disminuye o aumenta dependiendo del proceso geológico que generó el ambiente sedimentario. Un ejemplo de esto ocurre en los depósitos deltaicos, cuyo proceso de formación se basa en el transporte de sedimentos en las desembocaduras fluviales donde se distribuye todo el sedimento en grandes áreas cerca y sobre el mar (Arche, 2010). Al ser el agua del río el medio de transporte del sedimento, existe una mayor selección a lo largo de grandes tramos de viaje (mayor energía), por lo que las zonas más alejadas tienden a tener una conductividad más baja debido a los tamaños de grano más pequeños y mejor empaquetamiento, mientras que las zonas cercanas tienden a estar constituidas de gravas y arenas que tienden a tener una mayor conductividad hidráulica. Con esta distribución de materiales, la conductividad hidráulica puede variar en varios ordenes en cada dirección del delta. Otros ambientes geológicos que cuentan con una configuración de tendencia de heterogeneidad son ambientes de depósito glaciar o abanicos aluviales. También este tipo de heterogeneidad se puede encontrar en formaciones donde el movimiento del flujo se ve condicionado por fracturas y diaclasas [1].

La heterogeneidad en capas se ve representada en la figura 1.3a, mientras que en la figura 1.3b observamos un ambiente en planta cuya conductividad hidráulica varía en cualquier punto, donde tomando una dirección AA' la variación de la conductividad hidráulica es de 3 ordenes que puede variar en forma lineal como en la figura 1.3b o tomar formas exponenciales o logarítmicas. Varios autores hacen la descripción de la heterogeneidad de un ambiente se-

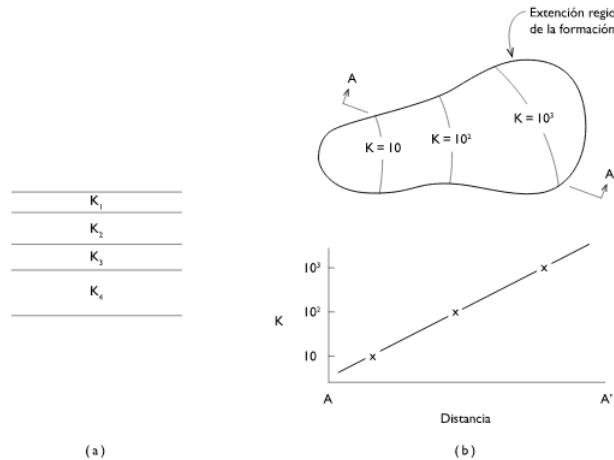


Figura 1.3: Heterogeneidad en capas y en tendencia (Freeze and Cherry, 1979).

dimentario a partir de las propiedades estadísticas del conjunto de valores de conductividad hidráulica, encontrando que la distribución de probabilidad que usualmente se encuentra en una formación geológica es log-normal (Freeze and Cherry, 1979; De Marsily, 1986), es decir, el logaritmo natural de la variable aleatoria que representa la distribución de la conductividad hidráulica nos proporciona una distribución de probabilidad normal también llamada gaussiana [5] [15].

$$X = \ln(K) \quad (1.25)$$

Freeze (1975) hace un estudio de la conductividad hidráulica a partir de esta distribución, encontrando que la varianza usualmente se encuentra entre 0.15-1.5 dentro de una misma unidad geológica, por lo que incluso dentro de una formación que se supone homogénea existe una variación de entre 1 y 2 ordenes de magnitud respecto a la media. Incluso la heterogeneidad de tendencia puede entenderse como una distribución aleatoria donde existe una tendencia en el valor medio, por lo que existe un aumento en el valor de la tendencia media para el rango observado.

Es posible definir la heterogeneidad y la homogeneidad a partir de sus características estadísticas. La homogeneidad de un medio es solo teórico, pero es posible aproximarla como homogéneo si sus conductividades hidráulicas tienen una distribución unimodal, es decir, del conjunto de medidas de conductividades hidráulicas predomina un valor moda. Cuando por el contrario la conductividad hidráulica tiene una distribución multimodal, con más de dos valores moda, entonces se puede aproximar como heterogénea; como en el caso de la heterogeneidad de tendencia cuyo número de modas es el orden de variación de la conductividad hidráulica.

La definición clásica de homogeneidad también se puede describir estadísticamente como una distribución uniforme, por lo que en un sentido más estricto, al igual que la descarga específica, la conductividad hidráulica que se maneja usualmente es una conductividad hidráulica media de la formación geológica [5].

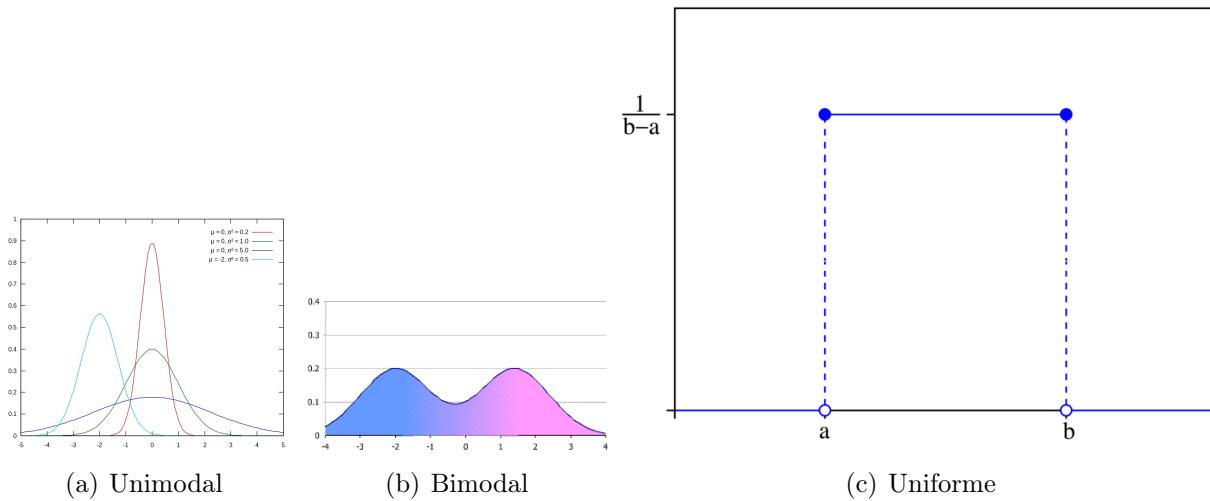


Figura 1.4: Distribuciones de probabilidad de la conductividad hidráulica

1.2.2. Distribución geoestadística de la heterogeneidad

La variación espacial de la conductividad hidráulica necesita más herramientas para su análisis de las que proporciona la estadística univariada. Los principios básicos para estudiar la correlación que existe entre los valores de conductividad hidráulica o cualquier propiedad física del subsuelo con su posición espacial fue desarrollada por Matheron (1960) donde aplica las técnicas estudiadas por Krige(1941) para lo que asocia una variable aleatoria a cada punto del espacio. La rama de la estadística que estudia un conjunto de datos a partir de su variabilidad espacial se llama *Geoestadística*, y tiene una amplia aplicación a fenómenos que se rigen por variables que son difíciles de modelar de forma determinista debido a que depende de procesos aleatorios [22] [16] [13].

Para hacer la caracterización de la conductividad hidráulica a partir de la geoestadística, es necesario hacer un análisis de datos que consiste en determinar la influencia que se tienen respecto a su posición, por lo que a diferencia de la estadística clásica, las variables aleatorias que representan al fenómeno en un punto son dependientes a la variable aleatoria en otro punto, en otras palabras, existe correlación espacial entre variables aleatorias, por lo que es trabajo de la geoestadística determinar el grado y rango de influencia entre ellas, y a partir de este análisis ser capaz de hacer una predicción sobre su valor en cualquier posición de la zona de estudio.

La geoestadística trabaja principalmente con tres conceptos que definen al fenómeno que ocurre en la zona de estudio, en nuestro caso la conductividad hidráulica. La variable regionalizada es la primera a la que Matheron hace referencia, y se define como la variable distribuida en el espacio de manera que presenta una estructura espacial de correlación (Viera,2002). En casos prácticos, una variable espacial puede ser considerada como una variable regionalizada si se siguen las siguientes características [19] [22].

- La variable espacial es continua pero no es posible de modelar de forma determinista.

- Existe variación local aleatoria.
- Existe variación local no aleatoria.

Los ultimos dos puntos significan que la variable espacial puede tener un componente aleatorio y uno deterministicos, aunque esta última es opcional pero su existencia nos da mas herramientas para su modelación

La conductividad hidráulica en formaciones geológicas cumple con esas características, donde la conductividad hidráulica para cada punto se representa por una variable aleatoria K , al conjunto de todas las variables aleatorias en cualquier punto del dominio se le conoce como función aleatoria y representa al fenómeno en todo el dominio $K(x)$, esto significa conocer la conductividad hidráulica para cada punto del espacio, al nosotros poseer la información de K sobre una zona en específico podemos obtener una muestra de $K(x)$ donde obtendríamos un fragmento de la variable regionalizada y un conjunto de valores discretos tales que $K' = K(x_i) : x_i \in \Omega$; donde esta muestra de la función aleatoria también se le conoce como **realización**.

La distribución espacial se puede estudiar a partir de un análisis estructural de los datos y obtener de esta forma los rangos de influencia que existen entre ellos, el **semivariograma** o **variograma** es la principal herramienta estadística que nos permite conocer esas características y hacer posteriormente un modelo de nuestra función aleatoria.

Partimos de nuestra función aleatoria $K(x)$, a la que se le asume una función de semivarianza y se define de la siguiente forma:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{Var}[K(x) - K(x + h)] \quad (1.26)$$

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} E[K(x) - K(x + h)^2] \quad (1.27)$$

Donde h determina la magnitud del rango entre valores en dos puntos distintos y la dirección donde se realiza la medición, también conocido como lag.

Es imposible de conocer el valor de conductividad hidráulica para cada punto, por lo que el conjunto de muestras que conforman una realización son necesarias para hacer una estimación del semivariograma real, el estimador más común que se usa en la práctica es el siguiente:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [K(x_i + h) - Z(x_i)]^2 \quad (1.28)$$

Donde $N(h)$ es el número de pares de puntos que existen en la variable regionalizada a una distancia h . El principal problema de este estimador recae en la selección de la muestra, es necesario que sea representativa de la función aleatoria para evitar semivariogramas erróneos, además, se debe de tomar los siguientes puntos a consideración para hacer una aproximación del semivariograma real [22]

- Es recomendable trabajar con variables aleatorias de distribución normal.
- No debe existir una relación entre la varianza y la magnitud del valor medio.
- Evitar concentrar el muestreo en zonas de altos o bajos valores.
- Tratar de evitar los outliers debido a problemas de medición.

Otros estimadores que se usan en la práctica son los estimadores de ponderación univariados y el estimador de Creesie y Hawkins (Viera,2002).

Los semivariogramas muestrales que se producen en cualquier estimador, se clasifican en dos tipos principalmente, el primero consiste en que la semivarianza incrementa en función del aumento del intervalo h hasta alcanzar un valor tope de semivarianza que se mantiene constante para cualquier h de mayor valor, esto se interpreta como la distancia en la que los valores dejan de tener influencia entre ellos, estos son los variogramas transitivos donde el valor máximo es llamado **sill** mientras que la distancia máxima de afectación es llamado **rango**.

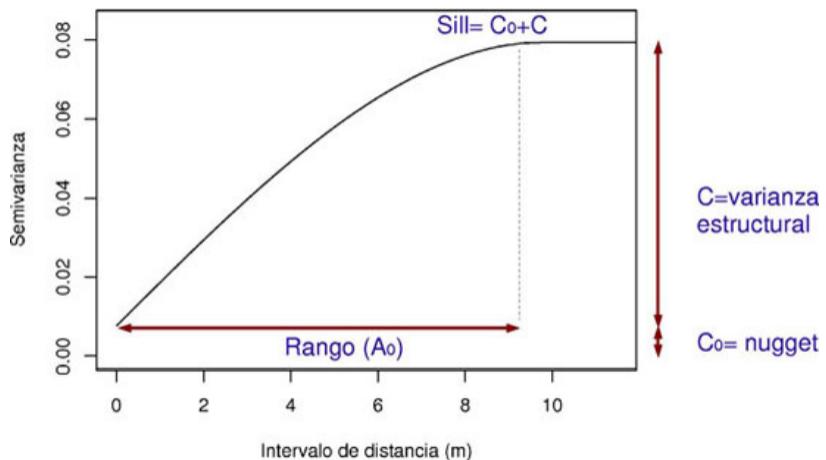


Figura 1.5: Elementos de un variograma transitivo (Gallardo, 2009)

El segundo tipo de semivariograma muestral es cuando no existe sill ni rango, es decir, la curva crece con valores de semivarianzas infinitas a rangos infinitos, por lo que un punto cualquiera se ve afectado por otro aunque la distancia $h \rightarrow \infty$, un aspecto que tienen ambos tipos de semivariogramas es la posible existencia del efecto **nugget** que se ve representado como la intersección en el eje de semivarianzas de la curva del semivariograma, contrario a la definición de semivariograma teórico donde se cumple que $\gamma(0) = 0$; matemáticamente esto simboliza una discontinuidad en la función aleatoria, pero en la práctica es debido a la escala del muestreo y a los errores comunes de medición.

Los datos que se obtienen en la práctica deben de ser ajustados a un semivariograma teórico a partir del semivariograma muestral para hacer uso de sus propiedades y poder realizar estimaciones o simulaciones de su distribución espacial, para ello se ocupan las características de

rango, sill y nugget, no todos los modelos teóricos pueden ser utilizados para este propósito, deben de cumplir ciertas especificaciones dadas por un estudio de su transformada de fourier. Los principales semivariogramas teóricos ocupados en la práctica se dividen de igual forma en transitivos y no acotados, en esta tesis, la descripción de la heterogeneidad aleatoria se hará a partir de una distribución basada en un modelo teórico transitivo, por lo que serán los estudiados en esta sección.

El modelo lineal consiste en una zona de transición donde la variación del intervalo con la semivariacia es lineal hasta el rango donde el sill se mantiene constante, la función del semivariograma lineal se expresa de la siguiente forma:

$$\gamma(h) = \begin{cases} S(h/a) & \text{para } 0 \leq h \leq a \\ S & \text{para } 2h > a \end{cases} \quad (1.29)$$

El modelo esférico consiste en la zona de transición como la intersección de dos esferas de diámetro a y distancia de sus centros d . Es un método apropiado principalmente para el caso de tres dimensiones aunque es posible usarse para una o dos, la expresión que determina su variograma es el siguiente:

$$\gamma(h) = \begin{cases} \frac{S}{2} \left(3\left(\frac{h}{a}\right) - \frac{h^3}{a} \right) & \text{para } 0 \leq h \leq a \\ S & \text{para } 2h > a \end{cases} \quad (1.30)$$

El modelo exponencial es más ocupado debido a la gran cantidad de fenómenos físicos que se rigen de esta forma, su zona de transición crece de forma exponencial mientras que la semivariancia tiende al sill cuando $h \rightarrow \infty$, la función queda determinada de la siguiente forma:

$$\gamma(h) = 1 - e^{-\frac{-3h}{a}} \quad \text{para } h \geq 0 \quad (1.31)$$

El modelo gaussiano, al igual que el exponencial, alcanza el sill de forma asintótica por lo que el rango es definido cuando el intervalo h alcanza hasta un 95 por ciento del sill.

$$\gamma(h) = 1 - e^{-\frac{-3h^2}{a^2}} \quad \text{para } h \geq 0 \quad (1.32)$$

Los datos que obtenemos en el semivariograma muestral se ajustan a un modelo teórico a partir de métodos de ajuste, tales como mínimos cuadrados, mínimos cuadrados generalizados o mínimos cuadrados ponderados, de esta forma tenemos una representación de nuestra variable regionalizada caracterizada por un variograma teórico que busca representar con mejor exactitud la variabilidad espacial de nuestro fenómeno. Este paso es fundamental para distribuir espacialmente nuestra conductividad hidráulica conociendo la estructura de nuestros datos [6].

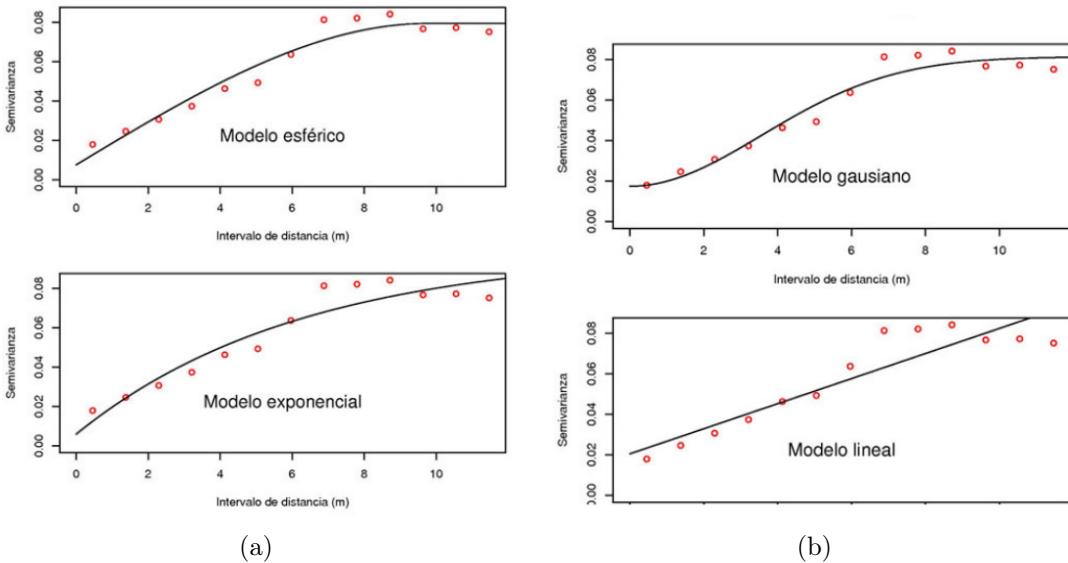


Figura 1.6: Modelos de semivariogramas teóricos (Gallardo, 2006).

1.3. La ecuación de flujo

Según lo visto en secciones anteriores, el flujo de agua subterránea ocurre debido a procesos físicos que pueden ser modelados a partir de una ecuación matemática y así definir la carga hidráulica en cada punto del dominio. Para poder definir la red de flujo es necesario combinar la ecuación de Darcy, ley empírica resultado de un balance de fuerzas, con la ecuación de continuidad, un balance de masa que garantiza la existencia del flujo másico a través de una porción elemental de medio poroso; el resultado de esta combinación da como resultado una ecuación diferencial parcial cuya solución es la carga hidráulica y su gradiente los patrones de flujo.

Para obtener la ecuación de continuidad para medios porosos, tomaremos un volumen elemental de dimensiones Δx , Δy y Δz donde el flujo másico se introduce de forma normal a cada una de las caras del volumen elemental, por lo que el flujo másico antes de atravesar la porción de medio poroso queda expresada como $\rho \mathbf{q} \Delta n$, donde ρ es la densidad del fluido con unidades (m/v), \mathbf{q} es el vector de descarga específica con unidades (l/t) y n representa el área de la cara donde el flujo incide normalmente en la dirección de \mathbf{q} , el flujo másico después de atravesar el medio poroso debe permanecer invariable según la ley de conservación de masa, por lo que el flujo másico en la salida se ve expresada por la expresión inicial más la variación del flujo de masa por unidad de área del volumen elemental ($\rho \mathbf{q}$) respecto a la dirección de \mathbf{q} por la longitud del tramo de viaje. La ecuación de continuidad se ve expresada en la figura 1.7 en un sistema coordenado xyz .

El balance de flujo másico en cada dirección se ve expresada de la siguiente forma:

$$\rho q_x \Delta y \Delta z - (pq_x + \frac{\partial \rho q_x}{\partial x}) \Delta x) \Delta z \Delta y \quad (1.33)$$

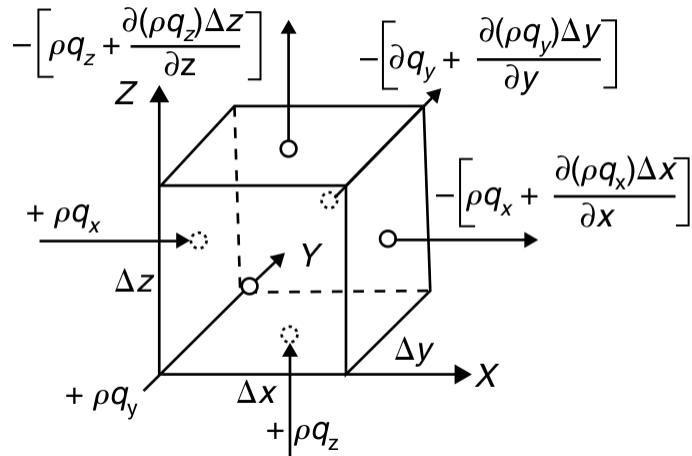


Figura 1.7: Volumen elemental en ecuación de continuidad (Toth,2009).

$$\rho q_y \Delta z \Delta x - (pq_y + \frac{\partial(pq_y)}{\partial y}) \Delta y \Delta z \Delta x \quad (1.34)$$

$$\rho q_z \Delta y \Delta x - (pq_z + \frac{\partial(pq_z)}{\partial z}) \Delta z \Delta x \Delta y \quad (1.35)$$

Cancelando los términos similares y suponiendo que no existen fuentes externas que aporten al flujo másico, la variación del flujo sera igual a cero $\Delta\dot{m} = 0$ y quedará expresada en función de la varación del flujo másico, por lo que la ecuación de continuidad queda de la siguiente forma:

$$\Delta x \Delta y \Delta z [\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z}] = 0 \quad (1.36)$$

$$\nabla (\rho \mathbf{q}) = 0 \quad (1.37)$$

La parte interna del lado derecho de la ecuación 1.36 se puede desarrollar a partir de la regla para derivación de productos, suponiendo que el agua es el fluido de trabajo y tiene la característica de tener una densidad constante ($\rho = cte$), la ecuación final queda de la siguiente forma:

$$\rho [\frac{\partial(q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(q_z)}{\partial z}] + \mathbf{q} [\frac{\partial\rho}{\partial x} + \frac{\partial\rho}{\partial y} + \frac{\partial\rho}{\partial z}] = 0 \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial(q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(q_z)}{\partial z} = 0 \quad (1.39)$$

$$\nabla (q) = 0 \quad (1.40)$$

Donde la ecuación 1.39 es la ecuación de continuidad para fluidos ligeramente compresibles, para concluir el modelo matemático es necesario introducir la ley de Darcy que representa el comportamiento del fluido cuando viaja en un medio poroso.

$$q_x = -K_x \frac{\partial h}{\partial z} \quad (1.41)$$

$$q_y = -K_y \frac{\partial h}{\partial y} \quad (1.42)$$

$$q_z = -K_z \frac{\partial h}{\partial z} \quad (1.43)$$

Combinando las ecuaciones de Darcy y de continuidad, obtenemos la ecuación diferencial que representa al fenoméno del flujo de agua subterránea en medios porosos en función de la carga hidráulica.

$$\frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K_z \frac{\partial h}{\partial z}) = 0 \quad (1.44)$$

La expresión 1.44 es llamada ecuación de Laplace para medios anisotrópicos y heterogéneos, para casos donde el dominio es homogéneo e isotrópico, la expresión se reduce de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (1.45)$$

$$\nabla^2(h) = 0 \quad (1.46)$$

La ecuación 1.46 también se puede definir para un medio isotrópico pero heterogéneo, donde la conductividad hidráulica es una función aleatoria que reproduce en exactitud la variación espacial en todo el dominio.

$$\frac{\partial}{\partial x}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial z}) = 0 \quad (1.47)$$

Donde \mathbf{x} es una variable aleatoria para cada punto de coordenadas x, y, z . En dado caso que exista alguna fuente como la existencia de un pozo de extracción o absorción, se puede expresar con una función $f(x, y, z)$ en el lado derecho de la ecuación 1.39, la ecuación modificada es llamada ecuación de poisson:

$$\frac{\partial}{\partial x}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial z}) = f(x, y, z) \quad (1.48)$$

Existen dos formas diferentes de resolver ecuaciones diferenciales, la primera es obtener una solución analítica que se cumpla para todo dominio y que cumpla las condiciones de frontera, sin embargo, estas soluciones de h obligan a simplificar el problema hasta un modelo que dista mucho de la complejidad del medio poroso, por lo que generalmente se ocupan métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas que puedan acercarse lo más posible a la solución exacta [21] [5].

Capítulo 2

Metodología

En el presente capítulo se explicará la teoría y práctica detrás de los métodos que se ocuparon en esta tesis para realizar el análisis de los medios porosos heterogéneos. En primera instancia se estudia el conjunto de bibliotecas FEniCS usadas para implementar el método de elemento finito, las funcionalidades de cada módulo y el uso de otras herramientas para definir la heterogeneidad del sistema. Posteriormente, se aborda el método de elemento finito para resolver la ecuación de flujo, su teoría y su aplicación a partir de la formulación tradicional.

2.1. Bibliotecas FEniCS

El conjunto de bibliotecas FEniCS es el resultado de un esfuerzo en conjunto de varios investigadores y programadores que buscan aumentar la eficiencia en la resolución mediante el método de elemento finito de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) que modelan fenómenos físicos a partir de la implementación de funciones en los lenguajes de programación *python* y *C++* [14].

El proyecto FEniCS surge en el año 2003 como una colaboración de la Universidad Tecnológica de Chalmers y la Universidad de Chicago; sin embargo , su utilidad y eficacia produjo que varias universidades e institutos alrededor del mundo colaboraran para aportar más herramientas y funcionalidades al proyecto. Inicialmente, FEniCS consistía de dos bibliotecas, DOLFIN y FIAT, que realizaban el trabajo de automatizar la resolución de las EDP. Debido al crecimiento del proyecto las bibliotecas centrales que ocupa la plataforma FEniCS son DOLFIN, FFC, FIAT, Instant, UFC y UFL. Otros componentes de FEniCS ocupados en el proyecto son SyFi/SFC, FErari, ASCoT, Unicorn, CBC.block, CBC.RANS, CBC.Solve y DOLFWAVE. Los componentes principales de FEniCS serán descritos a continuación:

DOLFIN es la interfaz principal de usuario de FEniCS. La implementación de las otras bibliotecas de FEniCS se realiza a través de DOLFIN, esta nos provee un ambiente para resolver las ecuaciones diferenciales parciales e implementa partes del núcleo principal de FEniCS, como las estructuras de datos y algoritmos para las mallas y el ensamblado de los elementos finitos. El interfaz de usuario de DOLFIN resulta simple y consistente de usar, además funciona para usar junto a otros componentes externos y realizar la comunicación entre ellos.

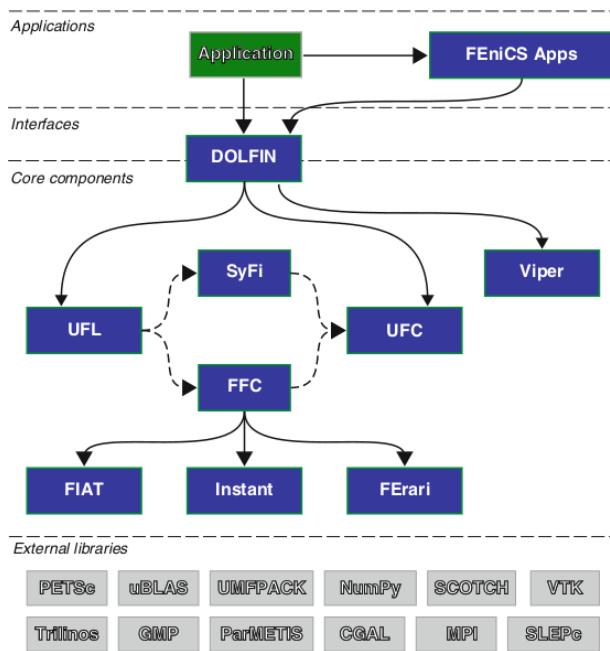


Figura 2.1: Esquema de la estructura de FEniCS (Logg et al, 2012)

En la figura 2.1 podemos observar cómo interactúa DOLFIN con las demás componentes de FEniCS; DOLFIN se comporta como la interfaz donde se realiza la comunicación a partir de un lenguaje de programación que puede ser tanto Python como C++. Además, también funciona como núcleo de FEniCS ya que permite la comunicación con otros componentes fundamentales. Por ejemplo, la formulación variacional de nuestra ecuación diferencial parcial se expresa a partir de DOLFIN, donde se comunica con la biblioteca UFL que la codifica y realiza la compilación con las bibliotecas FFC o SFC, donde se genera un código UFC que DOLFIN ocupa para ensamblar los sistemas de ecuaciones lineales para cada elemento finito. Por lo anteriormente descrito, DOLFIN también necesita de bibliotecas externas ajena al proyecto FEniCS como las que nos ayudan a resolver problemas de álgebra lineal como PETSc y Trilinos, además de bibliotecas generadoras de mallas como ParMETIS y SCOTCH.

FEniCS maneja dos tipos de interfaces a partir del lenguaje de programación que se prefiere ocupar: Python y C++. En esta tesis se usará la interfaz implementada como modulo de Python debido a que se trata de un lenguaje práctico, interpretado y que permite una programación orientada a objetos al que se puede sacar mayor provecho que un paradigma estructurado. En la figura 2.2 podemos observar las principales funciones y clases en FEniCS que podemos ocupar para resolver nuestras ecuaciones diferenciales, desde funciones que nos ayudan a generar un espacio de funciones hasta la creación de mallas que representan nuestro dominio de estudio.

Otros componentes de FEniCS son **UFL** (Unified Form Language) que implementa a partir de un lenguaje abstracto, las formulaciones variacionales de ecuaciones diferenciales para cada elemento finito y el espacio de elementos finitos hacia una notación cercana a la matemática y **UFC**(Unified Assembly-Code) que evalúa y ensambla formas variacionales de elementos

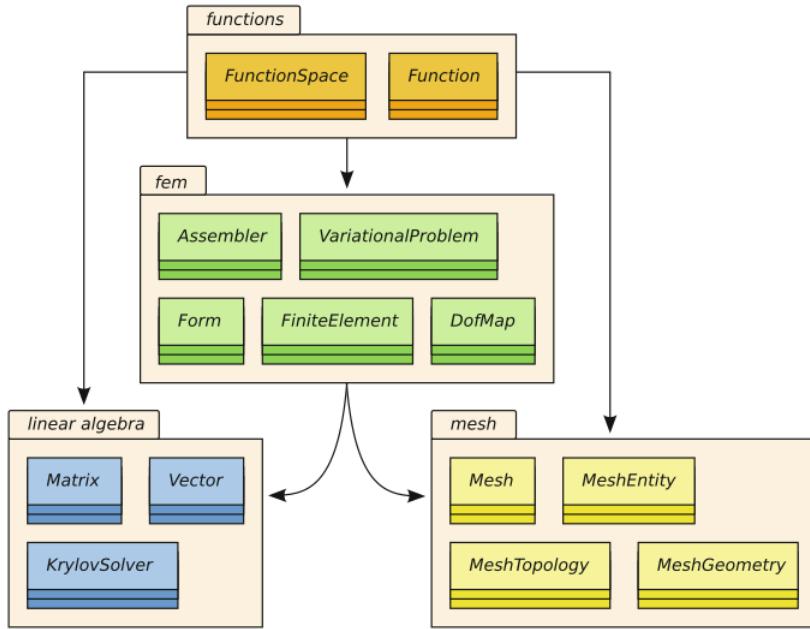


Figura 2.2: Funciones y clases de DOLFIN (Logg et al, 2012).

finitos, escrita en C++ esta componente define la estructura y firma de código generados por algún compilador del sistema (FFC y SFC) para DOLFIN, la versatilidad de UFC debido a su estructura en C++ permite que pueda usarse con múltiples bibliotecas y en una amplia gama de problemas de elementos finitos. En la figura 2.1 podemos observar como DOLFIN interactúa con UFL donde se realiza la implementación del problema, se codifica para posteriormente ser compilado y ensamblado por UFC, también es posible hacer el ensamblado de forma directa en UFC sin necesidad de pasar por UFL si la implementación se realiza a partir de una biblioteca externa.

Entre el proceso de codificación y ensamblaje, tenemos el proceso de compilación que en FEniCS se aplica a partir de **FFC**(FEniCS Form Compiler) o **SyFi**(Symbolic Finite Elements) en conjunto con su compilador **SFC**(SyFi Form Compiler). La componente FFC es el motor principal de FEniCS que genera un código C++ eficiente a partir del lenguaje abstracto proporcionado por UFL y genera la salida UFC. Este compilador se apoya principalmente de otros componentes como **FIAT**(Finite Element Automatic Tabulador) que a partir de la biblioteca externa NumPy, construye numéricamente las funciones base de elementos finitos, la componente **Instant** que es un pequeño modulo en Python para la compilación de código "Just-in-timez la componente **FErari**(Finite Element ReARRangements of Integrals) que permite la opción de aplicar optimizaciones basados en el estudio de graficos en tiempo de compilación para reducir el tiempo de ejecución sin afectar en el resultado final.

Las componentes SyFi y SFC son ocupadas para definir simbólicamente elementos finitos para ser compilado después, funcionan de forma análoga a las bibliotecas FFC y FIAT donde

a partir de un código UFL se obtiene la salida para UFC y ser ensamblado por DOLFIN. La implementación de SyFi y SFC resulta ser más útil para lenguaje C++, mientras que para Python que es el lenguaje con el que se trabajara, resulta más eficiente usar el compilador FFC [17]

2.2. Método de elemento finito

Las ecuación de flujo es una ecuación diferencial parcial que es posible resolver de forma analítica (tomando ciertas restricciones) o utilizando métodos numéricos, donde tipicamente se implementa el método de diferencias finitas que resulta el más fácil e intuitivo de utilizar. El principal problema de emplear diferencias finitas es la poca disposición que tiene el método para resolver la ecuación en un dominio con geometría compleja; esto es importante ya que generalmente queremos obtener resultados en cuencas o estructuras geológicas que no es posible modelar con formas rectangulares. El método que se empleará en esta tesis es el método de elemento finito cuyo empleo resulta muy atractiva debido a su enfoque en sus elementos individuales, que pueden tener geometrías muy complejas, además de proporcionar diferentes variaciones del método para cada situación en particular.

El método de elementos finitos, remonta hacia 1915 con los estudios sobre EDP's del matemático ruso Boris Galerkin, donde anteriormente un estudio similar había sido desarrollado por el ingeniero también ruso Buvnov. El método de Bubnov-Galerkin consistía en convertir un problema analítico como lo es una ecuación diferencial en un problema discreto a partir de polinomios globales y los principios variaciones dados por Leibniz, Euler, Lagrange, Ritz y Rayleigh. El método de Galerkin evolucionó hasta el uso de espacios polinomiales, que es el método al que actualmente se le conoce como Elementos Finitos. El método fue ocupado principalmente en los años 50's para el análisis estructural principalmente por el matemático alemán Richard Courant. Posteriormente, debido a la flexibilidad del método, matemáticos e ingenieros comenzaron a desarrollar diferentes variaciones del método y a desarrollar un amplio marco teórico sobre el mismo, creando un refinado marco de referencia para la resolución de ecuaciones diferenciales a partir de su análisis numérico. En la actualidad aún se sigue profundizando en el desarrollo del método, donde se busca la eficiencia en la discretización de problemas variacionales mixtos para el cálculo simultaneo del flujo [14].

2.2.1. Formulación integral

Al igual que el método de diferencias finitas, el objetivo es obtener la solución del problema en cada punto de la malla definida, lo cuál logramos al obtener un sistema de ecuaciones algebraicas cuyo número de soluciones sea igual al número de incógnitas dentro de nuestro dominio de estudio. Para lograr esto, el primer paso de cualquier método de elementos finitos es reeplantear la ecuación diferencial para obtener una formulación integral a partir de diferentes métodos, los más conocidos son el método de residuos ponderados y el método variacional [10].

Para abordar el método de residuos ponderados y variacional, plantearemos una ecuación

diferencial general como un operador L aplicado a una función u que es la solución del problema de la siguiente forma:

$$L^p(u(x, y, z)) = F(x, y, z) \quad (2.1)$$

Donde el operador L representa un polinomio diferencial y p el orden de la EDP ($L = (D^p + D^{p-1} + D^{p-2} \dots + D + C)$) y la solución u es una función de las coordenadas (x, y, z) y la función $F(x, y, z)$ es el término no homogéneo de la ecuación. El método de residuos ponderados consiste en plantear una solución aproximada \hat{u} cuya sustitución en la ecuación genere un residuo $R(x, y, z)$ de la siguiente forma:

$$L^p(\hat{u}(x, y, z)) - F(x, y, z) = R(x, y, z) \quad (2.2)$$

Para minimizar el residuo mostrado en la ecuación 2.2, obtendremos una función $v(x, y, z)$ cuya característica principal sea que la integral de su producto con el residuo sobre todo el dominio sea igual a cero, como lo muestra la ecuación 2.3.

$$\int_{\Omega} R(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.3)$$

La función $v(x, y, z)$ es también llamada función de peso, y tiene que cumplir ciertas características, que serán explicadas más adelante, para poder minimizar el residual. Recordando que el residual es igual a la ecuación diferencial donde la solución general es sustituida por la aproximada, entonces, sustituyendo la ecuación 2.2 en 2.3, obtenemos el siguiente resultado:

$$\int_{\Omega} [L^p(\hat{u}(x, y, z)) - F(x, y, z)]v(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.4)$$

Uno de los puntos escenciales para obtener la formulación integral de la ecuación diferencial, es la definición de la función solución aproximada $\hat{u}(x, y, z)$, este punto es crucial para el método y es el que le da sentido a su nombre, ya que la solución aproximada en cada punto del dominio es una combinación lineal de su valor en otros puntos (definida por una malla) y funciones de interpolación, como se muestra en la ecuación 2.5.

$$\hat{u} = \sum_{i=1}^m N_i(x, y, z)\hat{u}_i \quad (2.5)$$

Donde m es el número de nodos, $N(x, y, z)$ es la función de interpolación para cada punto y \hat{u}_i es el valor desconocido de la función solución en cualquier punto del dominio. La resolución de la ecuación pasa de ser un problema analítico a un problema numérico cuando hacemos la discretización del dominio a partir de una malla, donde a diferencia de otros métodos numéricos para EDP, la discretización se realiza a partir de elementos que pueden adquirir diferentes formas y tamaños, por lo que la ecuación 2.5 que determina la solución del problema, la adaptamos para obtener la solución por cada elemento donde el dominio fue discretizado.

$$\hat{u}^e = \sum_{i=1}^n N_i^e(x, y, z)\hat{u}_i \quad (2.6)$$

A partir de la ecuación 2.6 podemos obtener la solución en cada punto dentro del dominio donde el problema se ve definido a partir de la formulación integral planteada en la ecuación 2.4.

Habiendo definido entonces la solución aproximada \hat{u} , y siendo conocido el operador diferencial D y la función independiente $F(x, y, z)$, queda definir la función de peso; la más ocupada en términos generales es el descrito por el método de Galerkin que como se comentó al principio del tema, ocupa un espacio de funciones polinomiales para hacer la aproximación a la solución y ocupa las mismas funciones para definir las funciones de peso, de esta forma, las funciones de peso serán iguales a la funciones de interpolación de cada punto. Obteniendo la siguiente formulación integral:

$$\int_{\Omega} [D^p(\hat{u}(x, y, z)) - F(x, y, z)] N(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.7)$$

El método de residuales ponderados es el método más intuitivo para explicar cómo se deduce la formulación integral, sin embargo, el método variacional abarca el problema desde un enfoque más general, siendo el resultado de trabajos de matemáticos como Ritz y Rayleigh, cuyo enfoque para minimizar la energía debido al trabajo en un sistema físico los llevo a replantear sus EDP a una expresión donde esas condiciones estaban dadas. Para definir el problema variacional de una EDP, es necesario primero definir todo el espacio de funciones donde podríamos encontrar nuestra solución $u(x, y, z)$; sea entonces $L^2(\Omega)$ el espacio de funciones definido en nuestro dominio Ω y $v(x, y, z) \in L^2(\Omega)$ (usaremos la misma notación que la función de peso), donde además sea posible definir la siguiente operación:

$$\int_{\Omega} (v(x, y, z))^2 d\Omega \quad (2.8)$$

El conjunto de funciones $L^2(\Omega)$ es también conocido como espacio de Hilbert [4], y es en este conjunto de funciones donde se encuentra nuestra solución $u(x, y, z)$.

$$L^2(\Omega) = \left[v(x, y, z) : \int_{\Omega} (v(x, y, z))^2 d\Omega < \infty \right] \quad (2.9)$$

Los espacios de funciones de Hilbert tienen elementos infinitos, por lo que es necesario definir otra operación donde sea posible acotar las funciones y ayudarnos a plantear la formulación integral de la EDP. El nuevo espacio de funciones $H^1(\Omega)$ se define de la misma forma que el espacio $L^2(\Omega)$, solo agregando que las derivadas de $v(x, y, z)$ pertenezcan al espacio $L^2(\Omega)$, dicho de otra forma, se define la operación dada en la ecuación 2.8 para las derivadas de la función $v(x, y, z)$, este nuevo espacio de funciones, también llamados espacios de Sobolev [24], se definen de la siguiente forma:

$$H^1(\Omega) = \left[v(x, y, z) : \int_{\Omega} (v(x, y, z))^2 d\Omega < \infty : \int_{\Omega} (\nabla \cdot v(x, y, z))^2 d\Omega < \infty \right] \quad (2.10)$$

$$H^1(\Omega) = [v(x, y, z) \in H^2(\Omega) : \nabla \cdot v(x, y, z) \in H^2(\Omega)] \quad (2.11)$$

Con estos espacios definidos, nosotros podemos comenzar a plantear la formulación integral de nuestra EDP. Regresando a nuestra ecuación diferencial, expresada en la ecuación 2.1,

podemos observar que la solución analítica puede ser expresada como una función que se encuentra en el espacio de Sobolev $H^1(\Omega)$, a la solución que cumple estas características es llamada solución débil, y podemos obtener la formulación integral a partir del método variacional multiplicando una función test $v(x, y, z) \in H^1$ en ambas partes de la EDP, obteniendo la siguiente ecuación:

$$L^p(u(x, y, z))v(x, y, z) = F(x, y, z)v(x, y, z) \quad (2.12)$$

A partir de la ecuación 2.12 y debido a las características de las funciones definidas en H^1 , integramos sobre el dominio en ambas partes de la ecuación, obteniendo la formulación integral (ecuación 2.13), donde si despejamos el lado derecho y factorizamos la función $v(x, y, z)$, obtenemos la ecuación 2.14.

$$\int_{\Omega} L^p(u(x, y, z))v(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega} F(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega \quad (2.13)$$

$$\int_{\Omega} L^p(u(x, y, z))v(x, y, z) d\Omega - \int_{\Omega} F(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.14)$$

$$\int_{\Omega} [L^p(u(x, y, z)) - F(x, y, z)]v(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.15)$$

Donde se puede observar, la ecuación 2.15 es la formulación integral que se obtuvo con el método de residuos ponderados (2.4). De la misma forma se define la solución aproximada \hat{u} como una combinación lineal, donde las funciones de interpolación $N(x, y, z)$ se consideran una base del espacio de funciones $H^1(\Omega)$, por lo que tienen que cumplir con las condiciones especificadas en la expresión 2.11.

Para obtener la formulación integral final, es necesario tomar en consideración que la función de interpolación $N(x, y, z)$ debe de ser continua y derivable, por lo que para relajar las condiciones de derivabilidad se ocupa la integración por partes en la ecuación 2.12. En el caso de un operador derivada de segundo orden L^2 y asumiendo que el polinomio diferencial solo expresa el componente de mayor orden ($L = D^2 = \nabla^2$), integramos esta expresión y derivamos la función test $v(x, y, z)$, obteniendo las siguientes expresiones:

$$\int_{\Omega} \nabla^2(u(x, y, z))v(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega} F(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega \quad (2.16)$$

$$\int_{\Omega} \nabla^2(u(x, y, z))v(x, y, z) d\Omega = [\nabla u(x, y, z)v(x, y, z)]_{\partial\Omega} - \int_{\Omega} \nabla u(x, y, z)\nabla v(x, y, z) d\Omega \quad (2.17)$$

Como se observa en la ecuación 2.16, las condiciones de derivabilidad se relajan y el término extra consiste en la imposición de las condiciones de frontera. Finalmente, se sustituye en la ecuación 2.15 y obtenemos la formulación variacional para un operador diferencial L^2 .

$$\int_{\Omega} \nabla u(x, y, z)\nabla v(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega} F(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega - [\nabla u(x, y, z)v(x, y, z)]_{\partial\Omega} \quad (2.18)$$

Una generalización aún más amplia se puede obtener al definir la aplicación de las funciones test $v(x, y, z)$ como una forma bilineal $a : H^1 \times H^1 \rightarrow \mathbb{R}$ mientras que la parte derecha de la ecuación 2.19 es una forma lineal y continua $f : H^1 \rightarrow \mathbb{R}$. Se dice entonces que u es una solución débil del problema variacional si cumple la siguiente igualdad, para toda $v \in H^1$:

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle \quad (2.19)$$

La ecuación 2.19 es equivalente a la expresión 2.17, por lo que es necesario llegar hasta esta expresión para resolver nuestra ecuación de flujo [4].

2.2.2. Elementos Finitos

En la sección anterior, desarrollamos la metodología que se seguirá para obtener la formulación variacional de cualquier EDP, sin embargo, el principio del método de elementos finitos es la discretización del problema variacional expresado en la ecuación 2.19, para lograr esto, es necesario hacer hincapié en el hecho de que la cantidad de funciones que habitan el espacio $H^1(\Omega)$ son infinitas, por lo que es necesario definir un subconjunto discreto que podemos construir con espacios de funciones locales que se definen a partir de un conjunto de elementos finitos, este subconjunto lo denominaremos $\hat{H}^1(\Omega)$ [14] [24].

Dado la discretización de nuestro dominio Ω en celdas que pueden asumir geometrías diversas, nosotros podemos definir un espacio de funciones locales que denominaremos $H^1(\Omega)$ para cada una de sus celdas, y en conjunto formar el subconjunto $\hat{H}(\Omega)$ que buscamos. Por lo que llamamos **elemento finito**, no solo a la celda que discretiza al dominio sino un conjunto que incluye el espacio de funciones locales y las reglas que lo definen. Esta definición es formalizada por Ciarlet(1976), donde define un elemento finito como una tripleta (V, T, L) , donde:

- V es un espacio de funciones definido sobre cada elemento del dominio T
- T es el dominio que representa un subconjunto de \mathbb{R}^d que se encuentra acotado, cerrado y con fronteras suaves.
- L es el conjunto de nodos que conforman el elemento finito, también llamados grados de libertad, son los puntos donde se realiza la evaluación del problema ; cada elemento de L es una base para el espacio de funciones V .

Un ejemplo de un elemento finito se puede realizar sobre un triángulo de la figura 2.3, donde el elemento T es representado por el triángulo, el espacio de funciones V puede ser dado por un espacio de polinomios de primer orden sobre el triángulo y los grados de libertad L son una función de V donde se obtienen las coordenadas de los puntos de evaluación, en el caso de la 2.3 los grados de libertad son 3 y se encuentran en los vértices del triángulo además de estar en función de su posición global.

Además de cumplir con la condición de que las funciones base deben pertenecer al espacio $\hat{H}(\Omega)$, también es necesario que cumplan ciertos requisitos para que u pueda ser una solución del problema variacional [10]. El primero de ellos es la continuidad en sus fronteras, donde

como se observa en la formulación variacional (2.19), la solución se deriva y posteriormente se integra lo que hace necesario que la función base (o interpolación) sea continua para realizar esas operaciones, mientras que las derivadas de la función interpolación $v(x, y, z)$ y por lo tanto su combinación lineal para obtener la solución $u(x, y, z)$ no necesitan ser continuas para garantizar su existencia (2.4).

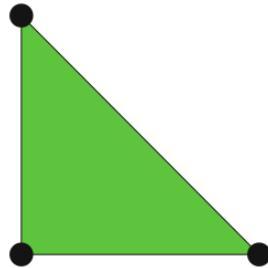


Figura 2.3: Triángulo de Lagrange con 3 grados de libertad, (Logg et al, 2012)

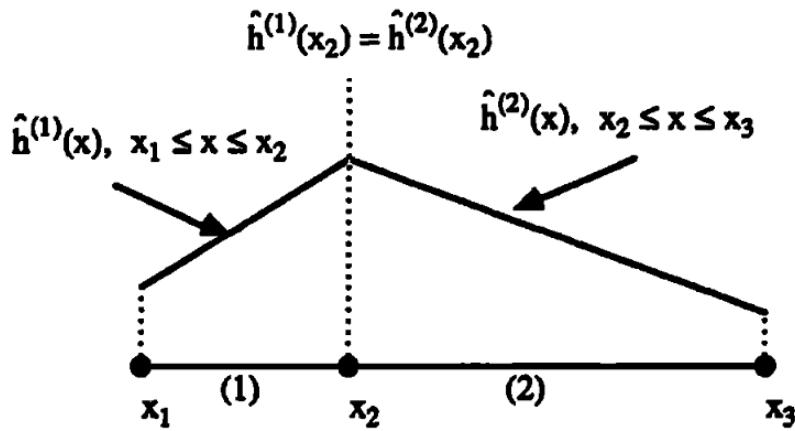


Figura 2.4: Continuidad de la función de interpolación (Istok, 1989)

Entonces, para garantizar la existencia de la solución $u(x, y, z)$ es necesario que la función de interpolación sea derivable p veces, donde p es el orden de la derivada (y también de la ecuación diferencial). En ocasiones podemos usar técnicas como la integración por partes, para relajar las condiciones de derivabilidad y tener una mayor disponibilidad de funciones base.

La convergencia es otra de las propiedades que deben de cumplir las funciones base para garantizar la existencia de u , esto se basa en el hecho de que la función base aproxima la solución u en cada nodo, por lo que usando una función base adecuada, un mayor número de elementos finitos dentro del dominio (mayor número de grados de libertad y menor tamaño de elemento) se aproxima mejor a la solución real u , o en otras palabras, la solución converge a la solución real cuando el número de elementos y grados de libertad aumenta. Para encontrar las funciones base que cumplen esta propiedad de convergencia, supongamos

que la ecuación 2.6 que determina la solución u , tiene un valor constante u_0 durante todo el dominio, en términos de flujo, la carga hidráulica es constante dentro de ese elemento, por lo que la ecuación 2.6 queda de la siguiente forma:

$$u_0 = \hat{u}^e = \sum_{i=1}^n v_i^e(x, y, z) u_0 \quad (2.20)$$

Despejando la ecuación 2.20 podemos obtener la regla que modela la carga hidráulica cuando es constante en todo un dominio, y también garantizar la convergencia de la solución para una función base v .

$$\sum_{i=1}^n v_i^e(x, y, z) = 1 \quad (2.21)$$

Con lo anteriormente descrito, sabemos las características que deben de tener los componentes de un elemento finito al momento de resolver un problema variacional, y es a partir de las combinaciones de diferentes características de los componentes de la tripleta (V, T, L) , que podemos clasificar nuestros elementos finitos. La primer clasificación se realiza sobre la relación entre la forma de la malla T y las funciones base.

Para tener una mayor comprensión sobre las formas que puede adquirir una malla, podemos definir la geometría de cada elemento como una combinación lineal de una función de interpolación con las coordenadas en cada grado de libertad (nodos), de igual forma como definimos la solución u (ecuación 2.6), obteniendo una ecuación del siguiente estilo:

$$x(P) = \sum_{i=1}^n S_i^e(x, y, z) x_i \quad (2.22)$$

Donde P es un punto cualquiera dentro del elemento y S_i es una función de interpolación, que en este caso es llamado función forma y determina la malla T de la misma forma que las funciones de interpolación V a la solución. De igual forma que con las funciones base, las funciones de forma asumen generalmente funciones lineales aunque pueden también ser de orden cuadráticos o más. El orden de las funciones de interpolación y forma, deben de ser elegidos conforme al tipo de problema que se pretende resolver, por ejemplo, un problema cuyo dominio se puede representar por líneas rectas pero su solución corresponde a valores que asumen por elemento una forma cuadrática; esta combinación de ordenes entre las funciones base y de forma, dan como resultado una clasificación de elementos finitos en tres grupos.

El primer grupo son los **elementos subparamétricos**, y consisten en el uso de funciones base de mayor orden que sus funciones de forma; en los **elementos isoparamétricos** el orden de las funciones base y de forma son las mismas; y los **elementos superparamétricos**, las funciones de forma tienen un mayor orden que las funciones base. Un aspecto importante de esta clasificación es que si ocupamos elementos subparamétricos y superparamétricos, no todos los grados podrán ser evaluados, por lo que es necesario definir bien el tipo de elemento que queremos ocupar. Para efectos de esta tesis, ocuparemos principalmente funciones isoparamétricas y subparamétricas para resolver las simulaciones de flujo de agua subterránea.

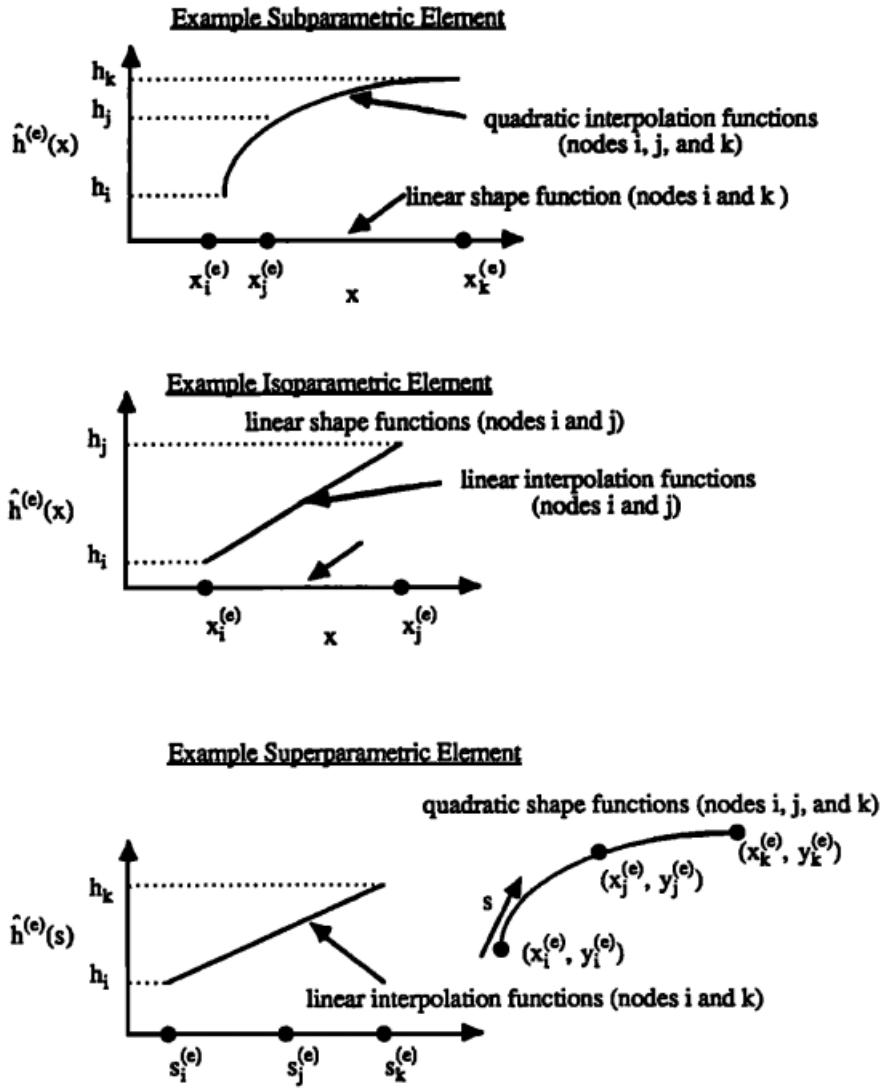


Figura 2.5: Arriba; elemento subparamétrico; Intermedio, elemento isoparamétrico; Abajo, elemento superparamétrico (Istok, 1989).

Habiendo tratado la geometría de la malla T y las funciones base V , los grados de libertad L se representan de forma esquematizada para cada familia de elementos finitos. Los grados de libertad de cada familia nos permiten hacer una evaluación correcta y una aproximación más cercana al resultado real de la función u , además, no solo podemos determinar los grados de libertad como un punto dentro de una malla, sino que podemos ampliarlo hasta un punto de evaluación en las derivadas, segundas derivadas, componentes direccionales y otros conceptos asociados a la geometría del elemento T como función.

Para manejar el concepto anterior, podemos tomar en cuenta que L es un conjunto de valores que representan los grados de libertad $L = \{l_1, l_2, \dots, l_n\}$, donde $v(x_i)$ es una función de las coordenadas donde se encuentran los grados de libertad y que garantiza que v es una base del espacio de funciones V . Las formas de definir un grado de libertad son las siguientes [14].

Punto de evaluación. Es la forma más común de definir los grados de libertad, consiste esencialmente en asignar el grado de libertad en una punto ubicado por su coordenada $\mathbf{x} = (x, y, z)$:

$$l(v) = v(x_i), i = 1, \dots, d \quad (2.23)$$

donde d es el número de grados de libertad del elemento finito.

Evaluación de primeras derivadas.. Consiste en la evaluación de todas las primeras derivadas de la función v sobre la coordenada de cada grado de libertad:

$$l(v) = \frac{\partial v(x_i)}{\partial x_i}, i = 1, \dots, d \quad (2.24)$$

Evaluación sobre la componente direccional.. Es la evaluación sobre un punto definido en \mathbf{x} en una dirección n :

$$l(v) = v(x) \cdot n \quad (2.25)$$

Evaluación sobre la derivada direccional.. Es la evaluación sobre la derivada de un punto definido en \mathbf{x} en una dirección n :

$$l(v) = \nabla v(x) \cdot n \quad (2.26)$$

Existen otras formas de evaluación de $l(v)$, como en los momentos de $v(x)$ o las derivadas superiores de este, aunque generalmente en la práctica se ocupan sólo la evaluación en un punto y la componente direccional para una formulación mixta.

Las familias de elementos finitos se caracterizan a partir del espacio de funciones en el que se encuentran definidos las funciones base v ; además, dentro de una misma familia de elementos finitos, existen elementos que no pertenecen al espacio donde se definen sus funciones base v , que se conocen como elementos no conformes, mientras que en el caso de pertenecer al mismo espacio de funciones, se denominan elementos conformes.

La familia de elementos más usada en la práctica se encuentran sobre el espacio H^1 que se ocupa para resolver un problema variacional de una ecuación diferencial cuyo resultado es un campo escalar u , este espacio se utiliza principalmente en problemas elípticos de segundo orden como la ecuación de flujo, donde subespacios discretos de H^1 son ocupados para cada elemento finito. Tipicamente, cada elemento usa espacios de polinomios a partir de funciones suaves por partes sobre las fronteras del dominio, que debe ser continuo sobre el espacio H^1 , un ejemplo conforme de estos espacios, son los tradicionales elementos de Lagrange, mientras que un ejemplo no conforme son los espacios de Crouzeix-Raviart, otros espacios que se pueden usar para discretizar y construir H^1 , son los elementos de Hermite y Argyris, aunque son poco comunes en la práctica.

Los elementos de Langrage son los más usados para discretizar H^1 , los polinomios que representan la base del espacio se expresan con la notación P_i , donde i es el grado del polinomio,

y la notación general para cualquier elemento de Lagrange es CG_q , donde q representa la dimensión del elemento. Existe todo una familia de elementos del tipo language por cada grado polinomial, que generalizan la interpolación polinómica de Lagrange. Generalmente, se ocupan polinomios de grado 1 para resolver una ecuación diferencial debido a su fácil implementación computacional, sin embargo, polinomios de mayor orden proveen mayor exactitud en el resultado, además, proveen mayor estabilidad en sus propiedades que los elementos lineales.

Un elemento Lagrange (CG_q) de dimensión q esta definido por su tripleta de la siguiente manera:

$$T \in \{\text{intervalo, triangulo, tetraedro}\} \quad (2.27)$$

$$V = P_q(T) \quad (2.28)$$

$$l_i = V(x_i), \quad i = 1, \dots, n(q) \quad (2.29)$$

La dimensión del elemento finito de Lagrange es definido por el grado del polinomio ocupado para definir las funciones base sobre T , y el número de grados de libertad $n(q)$ se define de la siguiente forma para cada tipo de geometría:

$$n(q) = \begin{cases} q + 1 & \text{Intervalo} \\ \frac{1}{2}(q + 1)(q + 2) & \text{Triangulo} \\ \frac{1}{6}(q + 1)(q + 2)(q + 3) & \text{Tetraedro} \end{cases} \quad (2.30)$$

Mientras que las coordenadas de los puntos x_i , correspondientes a los grados de libertad, se pueden obtener a partir de la siguiente fórmula:

$$x = \begin{cases} \frac{i}{q} & 0 \leq i \leq q \quad \text{Intervalo} \\ \left(\frac{i}{q}, \frac{j}{q}\right) & 0 \leq i + j \leq q \quad \text{Triangulo} \\ \left(\frac{i}{q}, \frac{j}{q}, \frac{k}{q}\right) & 0 \leq i + j + k \leq q \quad \text{Tetraedro} \end{cases} \quad (2.31)$$

Esta forma de asociar los puntos x_i , no es única, y se puede tomar en consideración otras formas de acotar los grados de libertad. En general, solo es necesario que los puntos que se encuentren en la frontera puedan ser acoplados con las funciones polinómicas. La 2.9 muestra elementos de diferentes dimensiones, con sus respectivos grados de libertad.

Otra familia de elementos finitos muy usados en la práctica, corresponde a los usados para discretizar el espacio de funciones L^2 referidos a elementos finitos donde sus elementos no se

encuentran en C^0 . Este tipo de elementos son útiles al momento de una formulación mixta donde se pretende encontrar la solución de las cargas hidráulicas a partir del acoplamiento del flujo entre las fronteras de los elementos finitos. El elemento finito más utilizado para discretizar este espacio son los elementos discontinuos de Galerkin (DG), donde el flujo numérico entre las fronteras de los elementos son ensamblados en su formulación integral. Los métodos de Galerkin Discontinuos fueron originalmente desarrollados para EDP's hiperbolicos aunque también son muy útiles en EDP's elípticas y parabólicas.

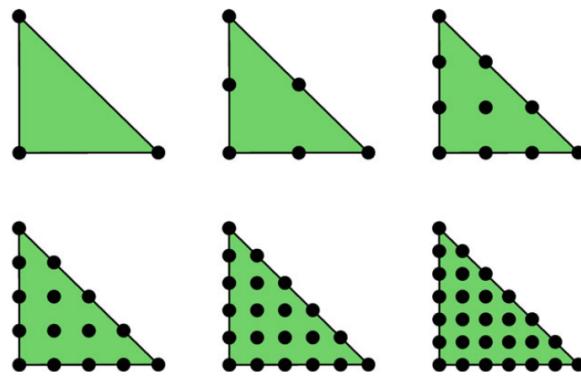


Figura 2.6: Elemento finito triángular para dimensiones $q=1,2,3,4,5,6$ (Logg et al, 2012) .

Los elementos de Lagrange Discontinuos (DG_q) están definidas por el grado de los polinomios $q=0,1,2,\dots$, donde la dimensión del elemento se ve definido por la ecuación 2.30 y la posición de los grados libertad por la ecuación 2.31. La diferencia clave de estos elementos con Langrange Continuo, es que no existe continuidad global, sino que el ensamble se hace elemento a elemento desde el problema variacional.

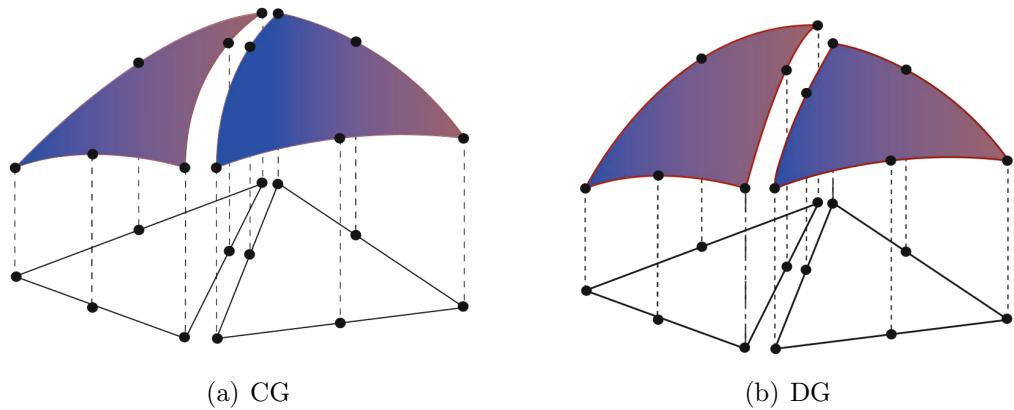


Figura 2.7: Diferencias entre Galerkin Continuo (Derecha) y Discontinuo (Izquierda) (Logg et al, 2012).

2.2.3. Resolución del problema variacional

Para obtener el campo escalar asociado a la ecuación diferencial parcial, debemos pasar de un planteamiento complejo y abstracto como resulta la ecuación 2.19 a un problema discreto definido por el tipo de elemento finito que queremos ocupar para resolver el problema. Partiendo de la formulación integral propuesta en la ecuación 2.18 y la discretización en un elemento finito de Lagrange (2.27). La discretización para obtener la solución $u(x, y, z)$, consiste en definir la función base $v(x)$ a partir de la combinación lineal de funciones interpoladoras $\phi(x)$, que resulta ser una base vectorial para el espacio H y que se extiende sobre los grados de libertad del elemento finito $l(j)$ de la siguiente forma:

$$\sum_{j=1}^n l_j(v) \phi_j \quad j = 1, 2, \dots, n(q) \quad (2.32)$$

El espacio de funciones que discretiza el espacio (2.9) se ve definida por los grados de libertad y la geometría del elemento.

$$\hat{H}^1 = \left[u(x, y, z) : \sum_{j=1}^n u_j \phi_j(x, y, z) \quad j = 1, 2, \dots, n(q) \right] \quad (2.33)$$

Habiendo definido la discretización de nuestro problema en un elemento finito del dominio, la obtención de nuestra solución en los nodos de evaluación se obtiene al sustituir los elementos del espacio S^H en nuestra formulación integral 2.18.

$$\int_{\Omega} \nabla u(x, y, z) \nabla \phi_i(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega} F(x, y, z) \phi_i(x, y, z) d\Omega - \nabla u(x, y, z) \phi_i(x, y, z)]_{\partial\Omega} \quad (2.34)$$

Donde la función solución $u(x, y, z)$ se incluye como elemento del espacio de funciones S^H al igual que su derivada $\nabla u(x, y, z)$ de la siguiente forma:

$$\sum_{j=1}^{n(q)} u_j \nabla \phi_j(x, y, z) \quad j = 1, 2, \dots, n(q) \quad (2.35)$$

En la ecuación 2.35, u_j es el valor desconocido de $u(x, y, z)$, definida en la malla por el grado de libertad $l(x_j)$ del elemento finito. Sustituyendo la ecuación 2.35 en la ecuación 2.34, obtenemos la siguiente expresión:

$$\sum_{j=1}^{n(q)} u_j \int_{\Omega} \nabla \phi_j(x, y, z) \nabla \phi_i(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega} F(x, y, z) \phi_i(x, y, z) d\Omega - \nabla u(x, y, z) \phi_i(x, y, z)]_{\partial\Omega} \quad (2.36)$$

La ecuación anterior es el problema variacional discretizado en un elemento finito del dominio, donde su desarrollo nos lleva a la resolución de un sistema de ecuaciones lineales que se puede representar en forma matricial:

$$A\mathbf{U} = \mathbf{b} \quad (2.37)$$

Donde la matriz de coeficientes A (también llamada matriz de rigidez), es el resultado del lado izquierdo de la ecuación 2.35; \mathbf{U} es el vector de incognitas y \mathbf{b} es el vector de términos independiente que caracteriza a la fuente del fenómeno físico y las condiciones de frontera.

En cualquier problema que se trate con ecuaciones diferenciales, es necesario definir las condiciones de frontera para garantizar la unicidad de la solución, por lo general, se manejan dos tipos de condiciones de frontera que se implementan de diferente forma dependiendo de la formulación del problema variacional. Las condiciones de Dirichlet (ecuación 2.38) tienen la característica de tener un valor constante en las fronteras del dominio del problema, mientras que las condiciones de Neumann (ecuación 2.39) definen la frontera a partir del cambio de la función u sobre su frontera.

$$u(x_0, y_0, z_0) = f(x, y, z) \quad (2.38)$$

$$\nabla u(x_0, y_0, z_0) = g(x, y, z) \quad (2.39)$$

En la formulación integral de la EDP (ecuación 2.18), podemos observar que aparte del término fuente, al momento de relajar las condiciones de derivabilidad obtenemos una expresión que corresponde a las condiciones de frontera y se ve reflejado en el vector \mathbf{b} , esta implementación se le conoce como **condición natural** y dependiendo de la forma en la que se haga la formulación se puede tratar de una condición de Dirichlet o Neumann, en caso que la condición de frontera no se defina dentro del problema variacional, se define dentro del espacio de funciones S^h como un subconjunto del mismo, donde la frontera se define por la función $f(x, y, z)$ y se le conoce como **condiciones esenciales**.

La solución del sistema definido en la ecuación 2.39, es también llamada solución local debido a que se resuelve sobre un elemento del dominio Ω . La solución global consiste en el ensamblaje de todos los elementos que conforman al dominio para conseguir una matriz de rigidez global de dimensiones $n \times n$, donde n sería el número de incognitas a resolver. El ensamblaje de los elementos finitos es posible a partir de la definición de coordenadas locales y globales que garanticen la continuidad de la solución en la frontera con cada elemento, donde finalmente se obtiene la solución de problema a partir de algún método numérico para sistemas de ecuaciones lineales, como Gauss-Seidel o SOR.

En términos generales, los pasos necesarios para resolver una ecuación diferencial parcial a partir del método de elementos finitos, son los siguientes:

1. Dada la EDP que modela el fenómeno físico, discretizar el dominio Ω en una malla que puede ser definida por las funciones forma.
2. Deducir la formulación integral de la EDP a partir del método de residuos ponderados o el método variacional.
3. Considerando la discretización del dominio, elegir el espacio de funciones para construir la solución del problema variacional. Definiendo la tripleta que caracteriza el tipo de elemento finito.

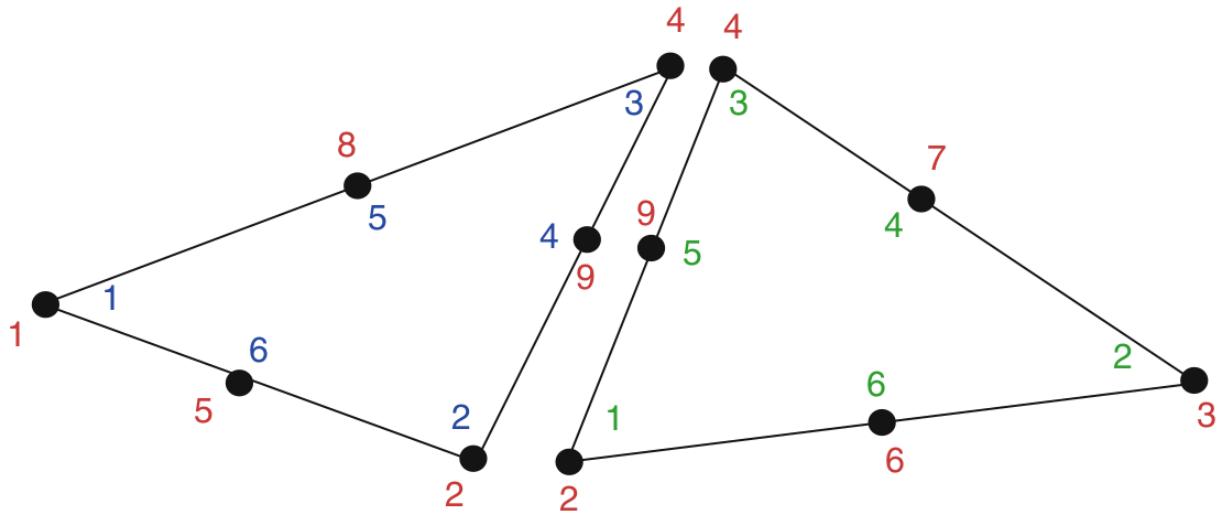


Figura 2.8: Ensamblaje de elementos finitos (Logg et al, 2012)

4. Definir el sistema de ecuaciones lineales a partir de la discretización del problema y el espacio de funciones elegido. Resolver las derivadas e integrales de las funciones de interpolación (función peso) y el sistema de ecuaciones a partir de método numéricos [14] [10] [24].

2.3. Implementación computacional

La ecuación de flujo estacionaria es una ecuación diferencial parcial elíptica, cuyo campo de cargas hidráulicas y de flujo serán tratados como objetos en *Python* y obtenidos a partir de DOLFIN, la interfaz gráfica de FeniCS.

2.3.1. Implementación con FeniCS

La resolución de una EDP con FeniCS requiere de tres objetos principales: la formulación integral (con el espacio discreto implementado), las condiciones de frontera esenciales y el campo de cargas hidráulicas donde se obtendrán los resultados.

El elemento finito queda definido por su tripleta, la cual consiste en la discretización del dominio Ω con las celdas T , en FeniCS crearemos la malla con la forma de los elementos como un objeto de tipo *Mesh*, donde definimos las dimensiones de nuestra malla, así como la refinación de la misma. Para las simulaciones realizadas, haremos la resolución del problema en dos mallas, una de $[20 \times 10]$ elementos triángulares, y otra más refinada de $[40 \times 20]$ elementos.

Posteriormente, se define el espacio de funciones que se ocupará para obtener el campo de cargas hidráulicas, como se vio en la sección anterior, el más usado para este tipo de

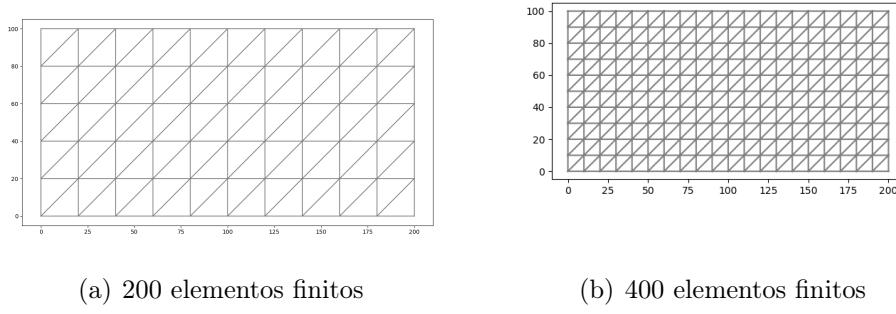


Figura 2.9: Diferente refinación mallas

ecuaciones son los elementos de Lagrange, cuyo incremento en el orden de los polinomios de interpolación aumenta la dificultad del cálculo pero incrementa la exactitud de la solución. El elemento finito se crea a partir de la función *FunctionSpace* cuyos argumentos de entrada son el objeto malla (que incluye los grados de libertad), el tipo de funciones de interpolación y el grado de las funciones.

```
mesh= RectangleMesh (Point (0 ,0) ,Point (200 ,100) ,10 ,5)
EF = FunctionSpace (mesh , 'P' , 1)
```

Las fronteras esenciales para el caso de una formulación tradicional son las condiciones de Dirichlet, que se definen a partir de la función *DirichletBC*, cuyos argumentos de entrada son el elemento finito (espacio de funciones) creado anteriormente, la función que determina los valores en la frontera (ecuación 2.38) y una función que indique la posición donde se encuentra la frontera en la malla.

```
Frontera = DirichletBC (EF, f (x) , Marcador_Frontera)
```

La función $f(x)$ puede ser constante o una expresión en función de las coordenadas de la malla, mientras que el marcador de la frontera se define a partir de una condicional que asigna en la malla el valor de 1 en la zona de frontera y 0 en el resto de los puntos de la malla, un ejemplo de un marcador de frontera en el lado izquierdo de una malla es el siguiente:

```
def frontera_I (x ,frontera) :
    tol=1E-14
    if frontera:
        if abs(x [0])<=tol:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False
```

La definición de las condiciones esenciales es de vital importancia, ya que una mala delimitación podría llevarnos a errores de cálculo. Después de generar las condiciones esenciales para toda la frontera, es necesario obtener la formulación integral de nuestra EDP. FeniCS permite la creación de términos matemáticos abstractos apartir del componente UFL, por lo que solo es necesario definir un objeto en el espacio de funciones de Lagrange como la función solución u , y un objeto definido en el mismo espacio v que sirva como función test (o base) para finalmente definir nuestra formulación integral.

```
u=TrialFunction(V)
v=TestFunction(V)
f=Constant(0)
a=dot(grad(u),grad(v))*dx
g=Constant(0)
L=f*v*dx-g*v*ds
```

De esta forma obtenemos la formulación integral con el espacio de funciones discretizado en función del elemento finito. La solución del problema se obtiene de forma automática con la función *solve*, donde los argumentos son las condiciones esenciales obtenidas con la función *DirichletBC*, la formulación integral, y un campo de cargas hidráulicas inicial de ceros que se obtiene a partir de la malla con el comando *Function*.

```
u= Function(V)
solve(a==L, u, Frontera)
```

El resultado final de la tesis es obtener no solo la distribución del campo de cargas hidráulicas, sino también la distribución del flujo o descarga específica del agua por cada elemento finito, dada por la ecuación de darcy (ecuación 1.4). El gradiente de las cargas hidráulicas se obtiene a partir de la aplicación del operador *grad()* al campo u , donde conseguimos el valor del flujo al multiplicar el vector gradiente de cargas hidráulicas del centroide en cada elemento por su conductividad hidráulica. La gráfica de los resultados se realizó con la biblioteca *Matplotlib*.

2.3.2. Implementación de la heterogeneidad

Obtener las cargas hidráulicas de la ecuación de flujo es un proceso simple con FeniCS que se complica dependiendo del grado de complejidad de nuestro problema. La implementación de la heterogeneidad se aborda en esta tesis desde dos enfoques; la heterogeneidad simple, que consiste en un dominio fraccionado en partes con diferentes conductividades hidráulicas, que geológicamente representa un cambio brusco lateral de facies o un cambio de litología de un estrato a otro, donde la asignación de la conductividad hidráulica será dependiendo del modelo geológico que se trabaje. El otro tipo es la heterogeneidad aleatoria, donde el campo de conductividades hidráulicas en cada elemento finito es representado por una función aleatoria; que geológicamente representa la variación de conductividad hidráulica en un material a pequeña escala.

La implementación del primer tipo de heterogeneidad se realiza de forma similar que la

creación de las condiciones de Dirichlet, creando un marcador del dominio para cada tipo de material para posteriormente asignar a cada punto marcado la conductividad hidráulica que le corresponde, una forma simple de implementar el marcado y la asignación de conductividades es creando una clase de objetos que definan la heterogeneidad a partir de dos funciones; la primer función consiste en la lectura de los valores de conductividad hidráulica como atributos y la segunda en la asignación de la conductividad hidráulica en una zona determinada por condicionales.

```
class K(Expression):
    def set_k_values(self, k_0, k_1):
        self.k_0, self.k_1 = k_0, k_1
    def eval(self, value, x):
        tol = 1E-14
        if tol + 100 <= x[0] <= 150 + tol:
            value[0] = self.k_0
        else:
            value[0] = self.k_1
```

Posteriormente se crea un objeto de esta clase y se le asignan como atributos las conductividades hidráulicas.

```
Conductividad = K(degree=1)
Conductividad.set_k_values(10,1)
```

Esta definición de heterogeneidad tiene la dificultad de estar definida por reglas matemáticas simples, por lo que si se requieren formas más complejas dentro del dominio, es necesario primero realizar el marcado del dominio para cada material (puede generarse la malla con herramientas externas y luego importarse) y después hacer la asignación de conductividades. Para obtener los valores de carga hidráulica en medios heterogéneos simples, se realiza la multiplicación del objeto donde están definidas nuestras conductividades y su distribución por su formulación integral. Finalmente se hace la resolución de forma usual y se sigue el procedimiento descrito al final de la sección anterior.

La heterogeneidad aleatoria se fundamenta en la teoría de la geoestadística, donde para obtener el campo de conductividades hidráulicas en cada elemento, buscaremos reproducir la función aleatoria $K(x)$ caracterizado por un semivariograma teórico $\gamma(h)$ en el centroide de cada elemento, este procedimiento es conocido como **simulación no condicional** [18].

La implementación de la simulación no condicional se realiza a través del lenguaje *R*, que se ocupa principalmente para cálculos estadísticos a partir de las bibliotecas de análisis geostadístico *Gstat*. Para calcular el campo de conductividades hidráulicas primero es necesario hacer el cálculo del centroide de cada elemento finito, esta va a depender de la forma en la que se halla definido la geometría del elemento (triangular o rectangular) y del número de elementos finitos en la malla, para efectos de esta tesis, se ocupó un algoritmo de cálculo de centroides para una malla regular de elementos triangulares (Apéndice B.2) [2].

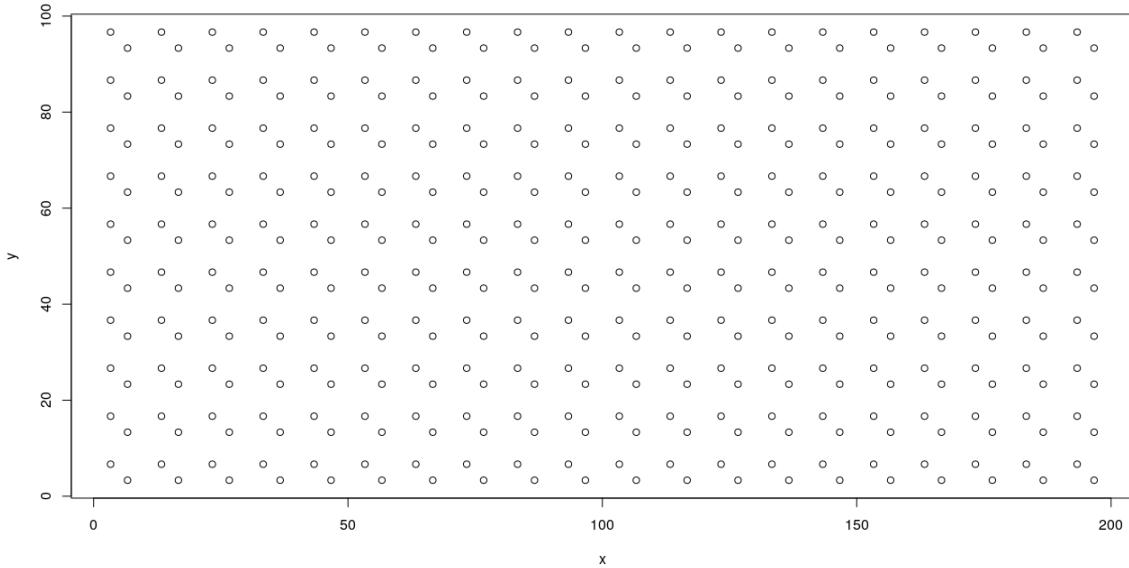


Figura 2.10: Centroides para cada elemento de una malla regular

Después de obtener la posición de los centroides, se obtiene el semivariograma a utilizar a partir del comando *vgm* que se define a partir de tres valores de entrada, el sill, el tipo de variograma teórico y el rango (veáse sección 1.2.2). A partir del variograma teórico y la posición de los centroides obtendremos el campo de conductividades con los comandos *gstat()* y *predict()* [25] [11].

```
vgm1=vgm(1 , "Exp" , 15)
g .dummy <- gstat(formula = z~1, locations = ~x+y, dummy = TRUE, beta = 0, model
                   = vgm1, nmax = 20)
yy <- predict(g.dummy, newdata = xy, nsim = 4)
```

Como se trato en la sección 1.2.1, las conductividades hidráulicas en una misma formación tienden a tener una distribución log-normal y de la misma forma *gstat* maneja la aplicación $X = \ln(K)$ a sus datos, por lo que los resultados se presentan con una distribución normal presentandones valores negativos que no tienen significado físico, por lo que es necesario aplicar la transformación inversa $K = \exp(X)$ a los datos obtenidos de la simulación no condicional.

Con las conductividades calculadas para cada elemento, la implementación en FeniCS puede hacerse de forma similar que la heterogeneidad simple, aunque es necesario agilizar el proceso de marcado debido a que se tendría que trabajar con un archivo por cada elemento, lo que resulta ineficiente y tardado, para evitar esto, se ocupa un ciclo dentro del código de marcaje, que en conjunto con el comando de FeniCS *cells(mesh)*, marca cada elemento finito con un número distintivo.

Con la malla marcada, el siguiente paso es hacer la asignación para cada elemento con las conductividades obtenidas en *Gstat*. Esto se realiza definiendo un objeto "*k*" como una

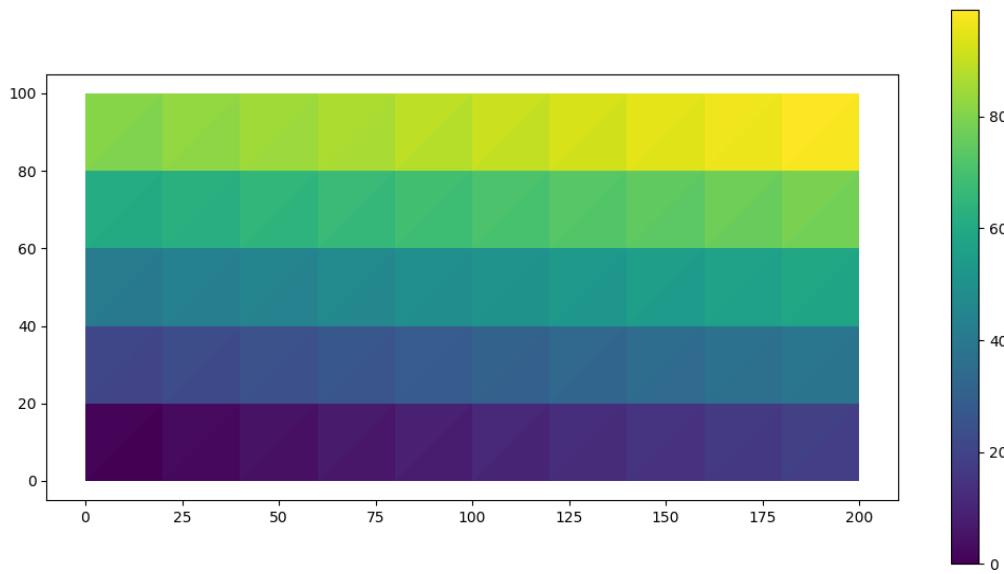


Figura 2.11: Malla marcada por elemento

función en un espacio de funciones del tipo Galerkin Discontinuo, que es el más apropiado para definir la heterogeneidad debido al tratamiento individual que hace sobre cada elemento [23], y después, con un ciclo, hacer la asignación de los valores de conductividad hidráulica para cada elemento finito en el objeto "k".

```
# Se realiza el marcado de la malla
k=range(0,400,1)
subdomains=CellFunction('size_t',mesh,0)
cont=0
for cell in cells(mesh):
    subdomains[cell]=k[cont]
    cont=cont+1

plt.figure()
im1=plot(subdomains)
print(subdomains)
plt.colorbar(im1)

# Se crea un espacio de funciones que simbolizan la conductividad hidráulica
V0= FunctionSpace(mesh,"P",0)
k=Function(V0)

cont=cont+1
```

```
# Se asigna para cada valor del marcado un valor del conjunto de
# conductividades
ka = np.loadtxt("Pruebayy.txt", delimiter=',', skiprows=1, usecols=[6])
k_values=np.exp(ka)
cont=0
for cell_no in cells(mesh):
    subdomain_no=subdomains[cell_no]
    k.vector()[:][cont]=k_values[subdomain_no]
    cont=cont+1
```

Finalmente, de igual forma que en la heterogeneidad simple, la conductividad se implementa en la formulación integral y se obtiene la solución con el comando *solve*. Para obtener el valor del flujo, se aplica la ecuación de Darcy para el centroide de cada elemento.

Capítulo 3

Modelos y simulaciones númericas

Este capítulo aborda el marco teórico previo y la metodología descrita para generar simulaciones de flujo de agua subterránea a partir de la ecuación de flujo. Las simulaciones se generaran a partir de la resolución del modelo que representa al fenómeno, donde se realizaran observaciones sobre el comportamiento del flujo y la utilidad de la implementación computacional. Cada conjunto de simulaciones corresponden a un caso en específico, donde se planteará el modelo conceptual, matemático y computacional para crear las simulaciones requeridas.

3.1. Caso homogéneo

El modelo que explica la dinámica del flujo en medios porosos es la ecuación diferencial descrita en la ecuación 1.48, su tratamiento se hará en forma bidimensional en los ejes x-y, en el caso de una vista en planta (ecuación 3.1), y sobre los ejes x-z en el caso de una vista en perfil (ecuación 3.2). El caso homogéneo es el más simple, ya que la función de conductividades hidráulicas adquieren un valor constante $K(x, y, z) = C$, por lo que la ecuación de flujo a resolver es similar a la ecuación 1.45 pero sin la componente y o z, dependiendo del plano donde obtendremos la solución del problema.

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (3.2)$$

3.1.1. Simulación 1: Condiciones de fronteras simples

El modelo conceptual-teórico consiste en una porción de acuífero rectangular de 200 m en dirección E-O y 100 m en dirección N-S que se extiende sobre un plano de ladera con echado en dirección este. Las mediciones de la carga hidráulica indican valores de $h = 100m$ en la frontera izquierda (Oeste) y $h = 10m$ en la frontera derecha (Este), mientras que tanto la frontera superior (Norte) como la inferior (Sur) colindan con formaciones no permeables. El modelo conceptual para la vista en planta se puede ver representado en la figura 3.1.

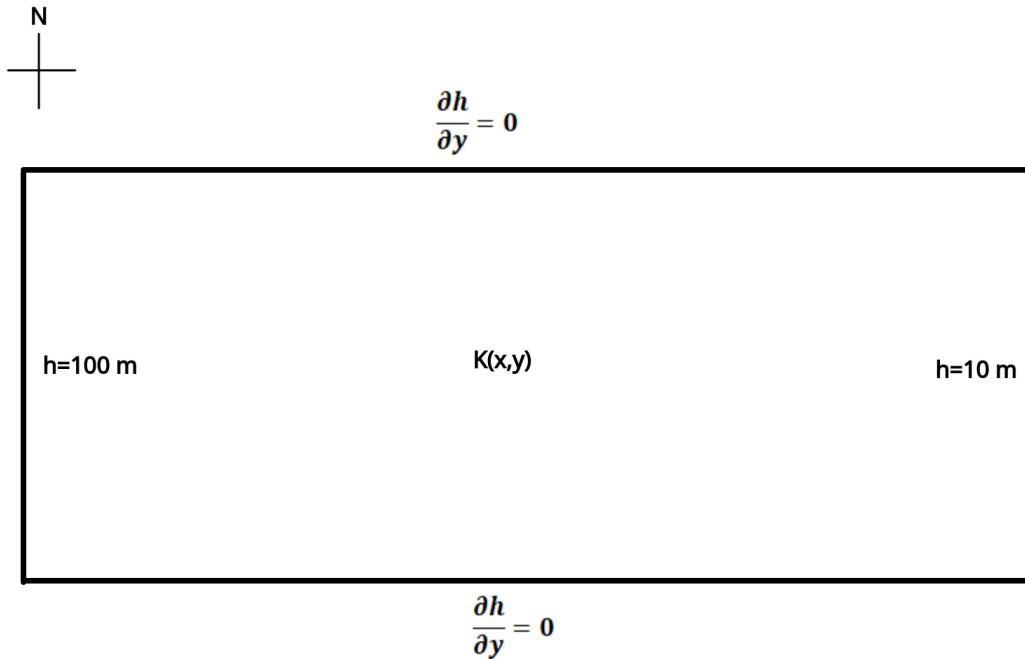


Figura 3.1: Modelo matemático y conceptual (Vista en planta)

Para la vista en planta, el modelo matemático que representa al modelo conceptual es la ecuación 3.1 , donde las condiciones de frontera son representadas por condiciones de Dirichlet en las fronteras Este-Oeste y condiciones de Neumann en las fronteras Norte-Sur.

$$\nabla^2 h(x, y) = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (3.3)$$

$$h(x, y) = 100 \quad \text{en } \partial\Omega_{D1} \quad (3.4)$$

$$h(x, y) = 10 \quad \text{en } \partial\Omega_{D2} \quad (3.5)$$

$$\nabla h \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_N \quad (3.6)$$

Donde $\nabla^2 h$ representa la ecuación 3.1; \mathbf{n} es el vector normal a la frontera $\partial\Omega$ y la frontera del problema se define como $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$ y $\partial\Omega_D = \partial\Omega_{D1} \cup \partial\Omega_{D2}$. Según las características del modelo conceptual, el domino y sus fronteras se plantean de la siguiente forma:

- $\Omega = [0, 100] \times [0, 200]$ Dominio rectangular
- $\partial\Omega_D = (0, y) \cup (200, y)$ Condiciones de Dirichlet
- $\partial\Omega_N = (x, 0) \cup (x, 100)$ Condiciones de Neumann

El espacio discreto de aproximación \hat{H}^1 de H^1 , se construirá a partir de elementos finitos triángulares del tipo galerkin continuo, con tres grados de libertad ($n(q) = 3$), ϕ serán polinomios de grado 1 que sirven como base del espacio de funciones e imponiendo las condiciones de frontera esenciales del tipo dirichlet dentro del espacio \hat{H}^1 . El espacio que discretiza nuestro problema es el siguiente.

$$\hat{H}^1 = \left[\hat{h}(x, y) : \sum_{j=1}^3 h_j \phi_j(x, y) \quad j = 1, 2, 3, \quad h = 100 \quad \text{en} \quad \partial\Omega_{D1}, \quad h = 10 \quad \text{en} \quad \partial\Omega_{D2} \right] \quad (3.7)$$

El modelo numérico consiste en sustituir la solución $h(x, y)$ por el resultado discretizado a partir de las funciones de interpolación $\hat{h}(x, y)$ en sus grados de libertad, que se implementa de forma semiautomática a partir de las componentes de FeniCS: UFL y FFC, mientras que la construcción del espacio de funciones se realiza a través de la componente *FIAT*.

A partir del modelo matemático, la implementación computacional se realiza según lo planteado en la sección 2.3. Los resultados consisten en el campo de cargas hidráulicas en todo el dominio establecido (Vista en planta) y la descarga específica para cada elemento finito, donde la conductividad hidráulica es igual 1 en todo el dominio.

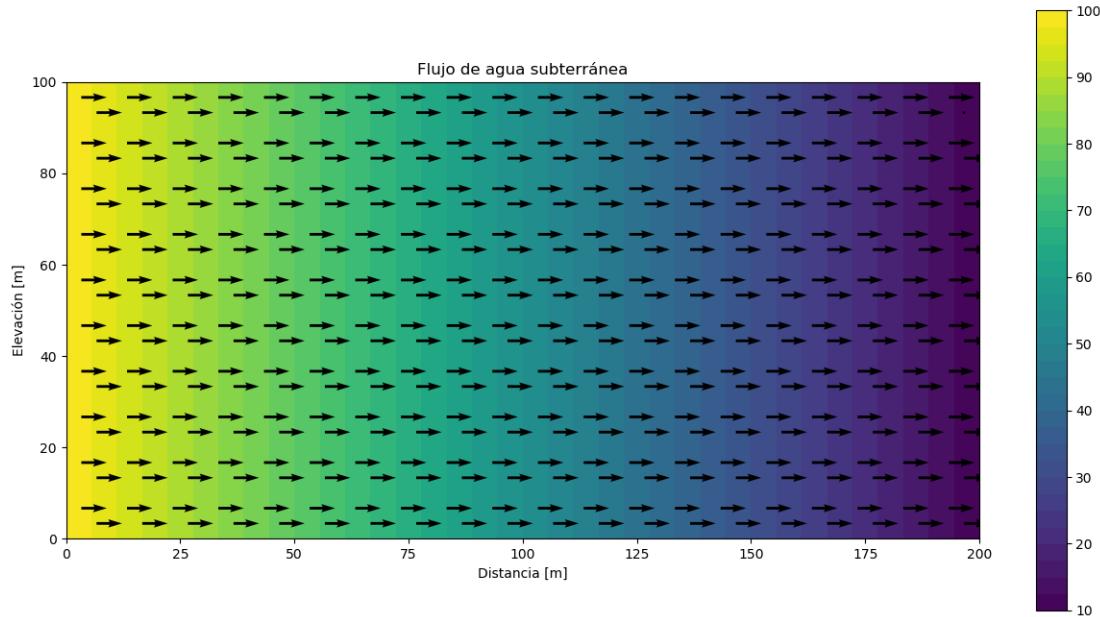


Figura 3.2: Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en planta)

Al ser un medio homogéneo, con valores constantes en las fronteras laterales y las fronteras superior e inferior impermeables, la teoría nos indica que el flujo se mueve de la zona de ma-

yor carga hidráulica a la zona de menor carga hidráulica, debido a esto, el vector de descarga específica solo contiene componentes horizontales (dirección x), que es la dirección donde se mueve el flujo, de oeste a este.

Dado el caso de la vista en perfil, se realizará un corte del modelo anterior de oeste a este a una profundidad de 100m. La representación del modelo conceptual y matemática se observa en la figura 3.3.

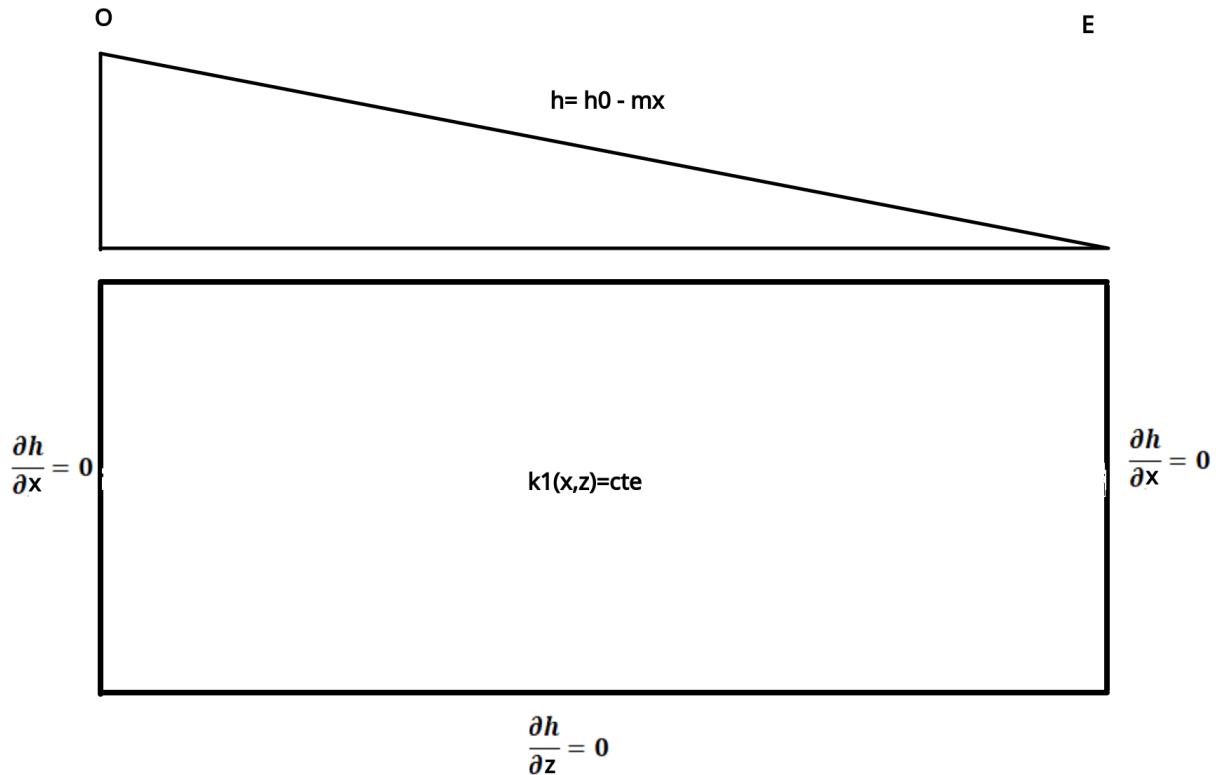


Figura 3.3: Modelo conceptual y matemático (Vista en perfil)

La ecuación que modela este problema es la ecuación 3.2, donde la formulación integral y el espacio de funciones que discretiza nuestro problema es el mismo que el anterior (ecuación ?? y ecuación 3.7). El cambio radica principalmente en la delimitación de las condiciones de frontera; las fronteras laterales y la frontera inferior se supondrán barreras impermeables, mientras que la frontera superior se expresa como una función lineal donde la carga hidráulica varía en su valor máximo (100 m) hasta su valor mínimo (10 m). Las condiciones de frontera para este problema son los siguientes:

$$h = 100 - 0,45x \quad \text{en} \quad \partial\Omega_D \quad (3.8)$$

$$\nabla h \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{en} \quad \partial\Omega_N \quad (3.9)$$

- $\Omega = [0, 200] \times [0, 100]$ Dominio rectangular

- $\partial\Omega_D = (x, 100)$ Condiciones de Dirichlet
- $\partial\Omega_N = (x, 0) \cup (0, y) \cup (200, y)$ Condiciones de Neumann

A partir de estas nuevas condiciones de frontera, obtenemos el siguiente campo de cargas hidráulicas.

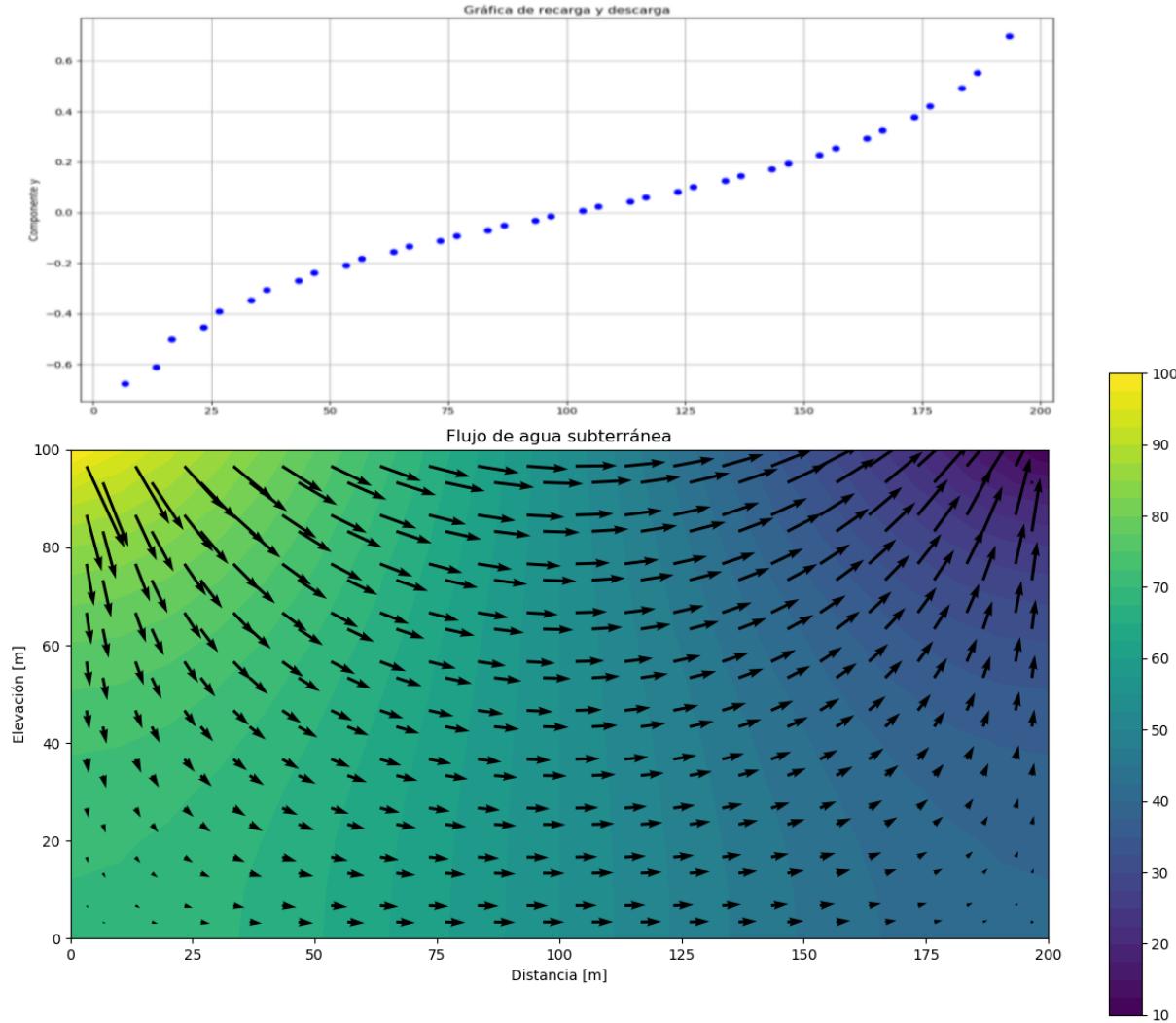


Figura 3.4: Arriba, Gráfica de recarga y descarga; Abajo, Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en perfil)

Según lo previsto de la sección en planta, las cargas hidráulicas decrecen de oeste a este, por lo que el flujo se mueve en esa dirección. Los valores del vector de descarga específica en este caso si tienen componentes tanto en dirección x como en dirección z, la componente en x se mantiene positiva en todo el modelo debido a que toma una dirección positiva de oeste a este, mientras que la componente en z se mantiene negativa hasta los 100 metros, donde la descarga específica solo tiene componente en x, para después de rebasar los 100 metros

donde la componente se vuelve positiva e incrementa su valor conforme aumenta la distancia. Para observar mejor la zona de recarga y descarga, se elaboró una gráfica que muestra la variación de la componente z del vector de flujo en la superficie respecto a la distancia en x , siendo negativo la recarga y positivo la descarga, siendo nulo a la mitad de la distancia total.

El anterior problema fue planteado de forma analítica por Josef Toth en 1962 para entender la forma en que se comportaba el flujo en pequeñas cuencas de drenaje. La ecuación que define el campo de carga hidráulica para el problema anterior, se define de la siguiente forma (Toth,1962):

$$h = \left(z_0 + \frac{cs}{2}\right) - \frac{4cs}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos[(2m+1)\pi x/s] \cosh[2m+1]\pi z/s}{(2m+1)^2 \cosh[(2m+1)\pi z_0/s]} \quad (3.10)$$

Donde en la ecuación 3.10, z_0 es la condición de frontera izquierda igual a $100m$; s es la longitud de la cuenca, que en esta simulación es $s = 200m$; c es la pendiente de la ecuación que define la condición de Dirichlet en la parte superior de la cuenca (45°); x y z son las coordenadas donde se requiere encontrar la carga hidráulica h ; mientras que m es una constante en una sumatoria que mientras tienda a ∞ obtendremos la solución completa. El campo de cargas hidráulicas para las condiciones anteriormente establecidas y con $m = 200$ se graficó y se comparó con la solución obtenida a partir del método de elemento finito con FEniCS, obteniendo el siguiente mapa de error absoluto.

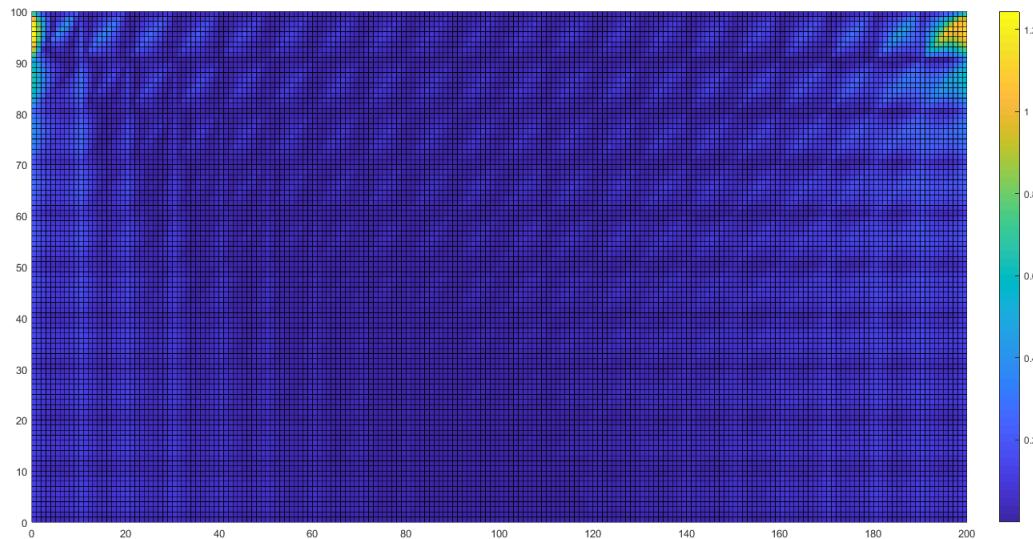


Figura 3.5: Mapa de error absoluto en el dominio; solución con FeniCS vs solución analítica de Toth ($m=200$)

En la figura 3.5 podemos observar como el error es mínimo en la mayor parte del dominio, especialmente en el centro, siendo los extremos de las fronteras que fueron definidas por las

condiciones de Dirichlet, las zonas de mayor error, esto se debe a que la solución analítica de Toth se evaluó con una sumatoria $m = 200$ que mantiene cierto error al no poder evaluarse con m tendiendo al infinito. De esta forma, se valida la solución obtenida con FEniCS y se nota la ventaja del método de elemento finito al mantener los valores de la condición de Dirichlet de la forma en que se definieron en un principio.

3.1.2. Simulación 2: Condiciones de fronteras complejas

Las condiciones de frontera se pueden complicar para aproximarse a condiciones más exactas a la realidad. Siguiendo el caso del modelo anterior, el flujo viaja de este a oeste para una carga hidráulica descendiente, sin embargo, el movimiento del flujo cambia dependiendo de la geometría de frontera, donde usualmente la forma de la carga hidráulica en la superficie recrea su topografía.

Para la siguiente simulación se recrearon las condiciones de la misma forma que en la simulación anterior, cambiando la condición de frontera superior para obtener una mayor aproximación a un caso real, en este caso se simuló el perfil topográfico de un valle intermontano, cuyas laderas se extienden en el lado izquierdo de 0 a 40 metros con un valor de carga hidráulica inicial $h = 500m$, el valle se encuentra de 40 a 160 metros con un valor de carga hidráulica al ras del valle intermontano $h = 100m$, y una ladera correspondiente a otra montaña que colinda de 160 a 200 metros con $h = 500m$ en el extremo de la ladera. Para obtener un mayor acercamiento a la realidad, tanto las laderas como el valle tendrán una variación senoidal simulando la irregularidad del subsuelo. El modelo conceptual se muestra en la figura 3.6, donde las conductividades $K1$ y $K2$ son iguales para el caso homogéneo.

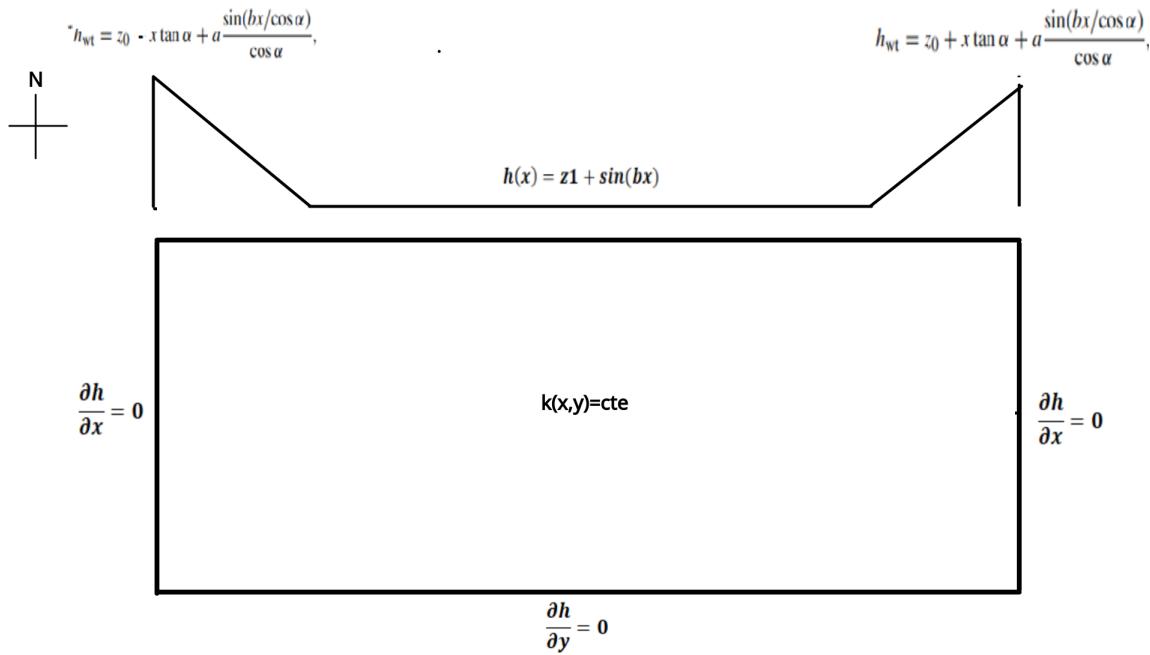


Figura 3.6: Modelo conceptual y matemático

El modelo matemático es el mismo que en la ecuación 3.7, con las mismas condiciones de Neumann (ecuación 3.9), pero variando en las condiciones de frontera de Dirichlet (ecuación 3.8) de la siguiente forma:

- $\partial\Omega_{D_{Izquierda}} = ([0, 40], 100)$
- $\partial\Omega_{D_{Central}} = ([40, 160], 100)$
- $\partial\Omega_{D_{Derecha}} = ([160, 200], 100)$

$$h = 150 - x \cdot \tan(0,896) + \left(\frac{\cos(100 \cdot x / \cos(0,896))}{\cos(0,896)} \right) \quad \text{en } \partial\Omega_{D_{Izquierda}} \quad (3.11)$$

$$h = 100 + 4 \cdot (\sin(\cdot x)) \quad \text{en } \partial\Omega_{D_{Central}} \quad (3.12)$$

$$h = -100 + x \cdot \tan(0,896) + \left(\frac{\cos(100 \cdot x / \cos(0,896))}{\cos(0,896)} \right) \quad \text{en } \partial\Omega_{D_{Izquierda}} \quad (3.13)$$

A partir de estas condiciones de Dirichlet y aplicando la metodología para la simulación de flujo, obtenemos los siguientes resultados:

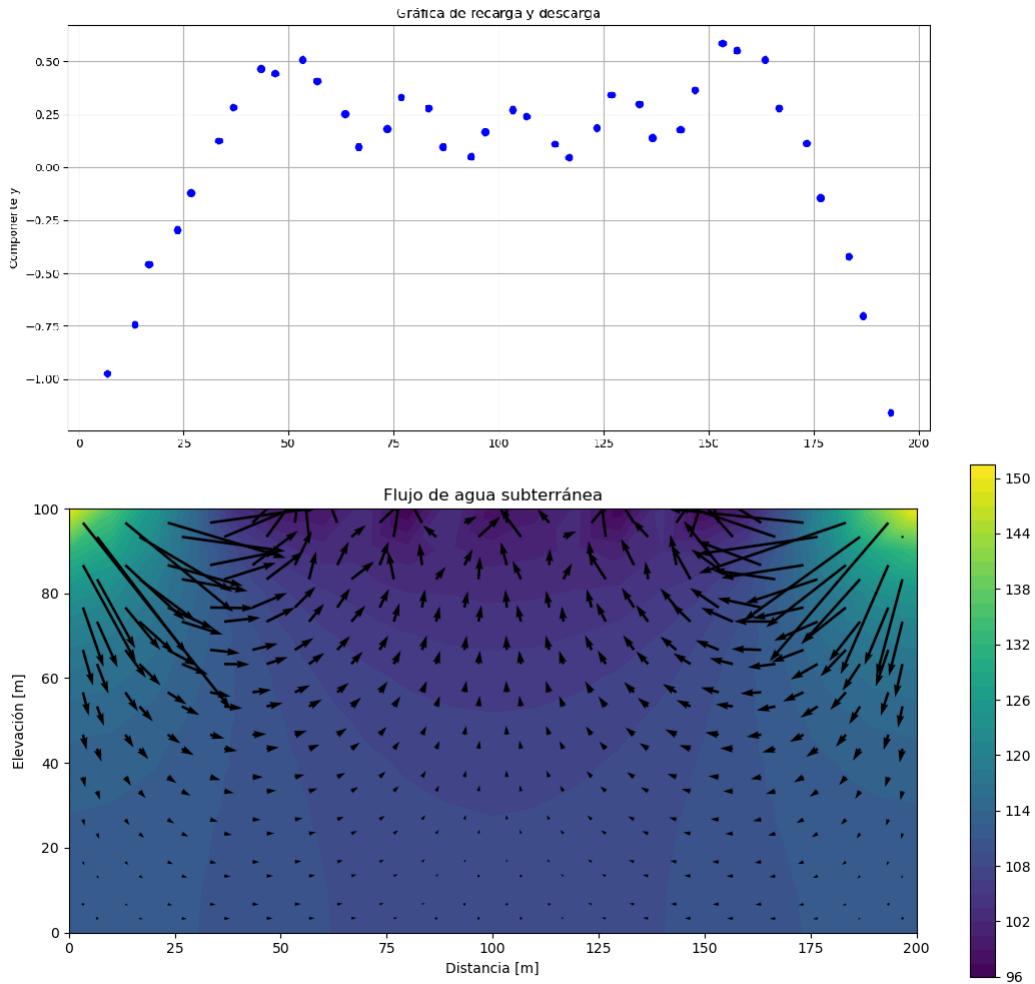


Figura 3.7: Campo de cargas hidráulicas y flujo de agua subterránea (Vista en perfil)

Con esta simulación podemos observar que las cargas hidráulicas tienen un valor máximo en los extremos y disminuyen conforme nos vamos acercando al centro del valle. Esta simulación es importante debido a que nos muestra la importancia de entender la topografía de nuestro modelo, pues una simulación de vista en planta con valores de frontera de Dirichlet constantes y fronteras impermeables, nos daria una simulación de cargas hidráulicas constantes sin movimiento de flujo en todo el dominio, cuando en realidad el flujo se concentra en la zona central que corresponde al área del valle intermontano.

El análisis de la componente z en la superficie indica como el flujo funciona como recarga en las zonas más altas, donde su valor disminuye hasta convertirse en descarga, alcanzando su punto máximo a principios del valle, posteriormente la descarga disminuye sobre el centro del valle y alcanza su máximo en el otro extremo del valle, volviendo a ser la zona montañosa el área de recarga, en esta gráfica se puede apreciar mejor la influencia de la variación senoidal, afectando principalmente la descarga en el centro del valle.

3.2. Caso heterogéneo simple

La ecuación que modela este tipo de caso es similar al anterior, solo que la conductividad hidráulica $K(x, y, z)$ tendrá diferente valor dependiendo de la zona del dominio en el que se encuentre. La asignación de la heterogeneidad se hará dependiendo del modelo conceptual que se trabaje; las ecuaciones que modelan estos casos son los siguientes:

$$\frac{\partial}{\partial x}(K(x, y)\frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K(x, y)\frac{\partial h}{\partial y}) = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(K(x, z)\frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial z}(K(x, z)\frac{\partial h}{\partial z}) = 0 \quad (3.15)$$

3.2.1. Simulación 3: Condiciones de fronteras simples

El modelo conceptual-teórico consiste en el mismo modelo de la simulación 1 (sección 3.2), donde vamos a definir una sección con diferente material. La asignación de la conductividad hidráulica que caracteriza al material se realiza con base en los resultados presentados por De Marsily (1986) (Figura 1.2). En este caso se tomará en cuenta dos modelos donde el medio geológico corresponde a un cambio de facies de un material de grano grueso, de valor promedio $K = 100\text{m/día}$ a un material de grano más fino con valor promedio $K = 10\text{m/día}$, y el otro modelo donde el cambio va de un material fino a un material más grueso. El cambio de facies se hace a partir de una linea diagonal en dirección Este-Oeste, a partir de estos valores construimos la ecuación que representa la conductividad hidráulica en todo el dominio de la siguiente forma:

$$k(x, y) = \begin{cases} 100 & \text{en } \Omega_1 \\ 10 & \text{en } \Omega_2 \end{cases} \quad (3.16)$$

Para el caso contrario se invierten los valores de conductividad hidráulica, además, la ecuación 3.16 representa la distribución de la conductividad tanto para la vista en planta como en la vista en perfil.

Las condiciones de frontera que se ocupan son las mismas que en la ecuación 3.4, 3.5 y 3.6; mientras que la ecuación que modela el problema es la siguiente:

$$\nabla k(x, y)\nabla h(x, y) = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (3.17)$$

La formulación integral se plantea a partir de la división del dominio Ω en subdominios con su propia conductividad hidráulica. Los subdominios y las fronteras del dominio quedan definidos de la siguiente manera:

- $\Omega_1 = [0, 100] \times [0, 100]$ Subdominio 1
- $\Omega_2 = [100, 200] \times [0, 100]$ Subdominio 2
- $\partial\Omega_D = (0, y) \cup (200, y)$ Condiciones de Dirichlet

- $\partial\Omega_N = (x, 0) \cup (x, 100)$ Condiciones de Neumann

La formulación integral del problema se obtiene sobre los dos subdominios, obteniendo la siguiente forma bilineal:

$$a(h, v) = \int_{\Omega_1} k_1 \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds + \int_{\Omega_2} k_2 \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds \quad (3.18)$$

Mientras que la forma lineal de la formulación integral del problema al tener las mismas condiciones de fronteras es $L(v) = 0$. La discretización del problema se realiza con el espacio de funciones planteado en la ecuación 3.7 tanto para la vista en planta como para la vista en perfil; la simulación en planta para un cambio de facies de grano grueso a grano fino se observa en la figura 3.9, mientras que el cambio de una facies de grano fino a grueso se observa en la figura 3.10

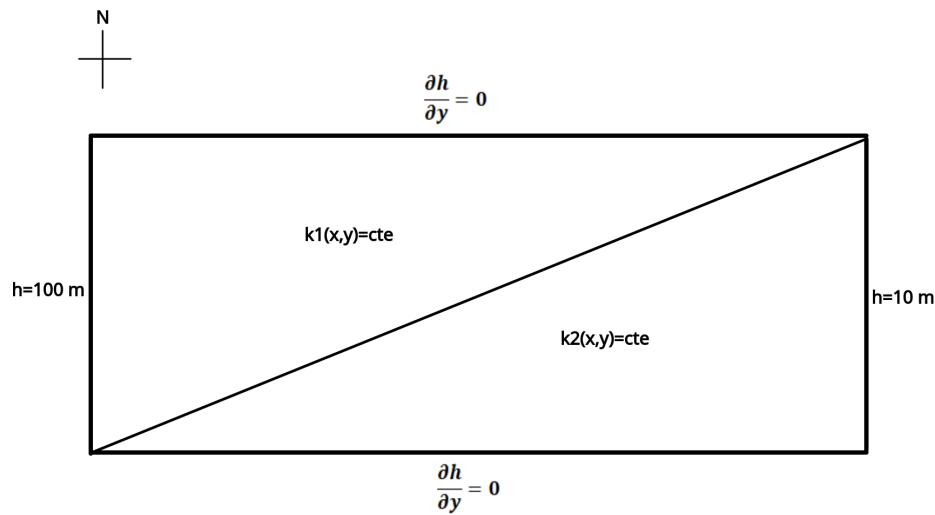


Figura 3.8: Modelo matemático y conceptual

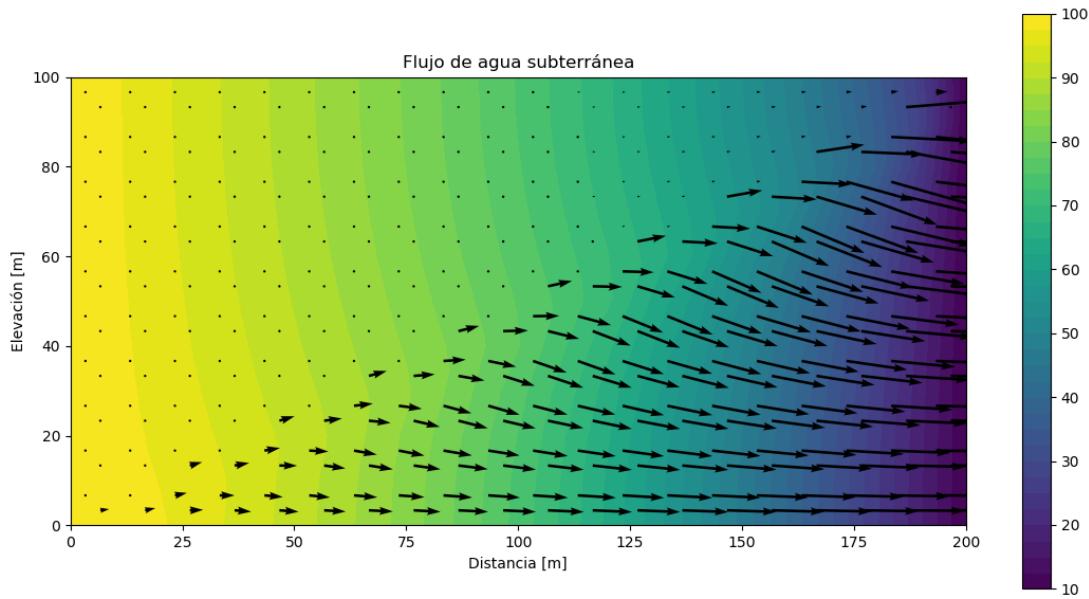


Figura 3.9: Cambio de facies de grano fino a grueso

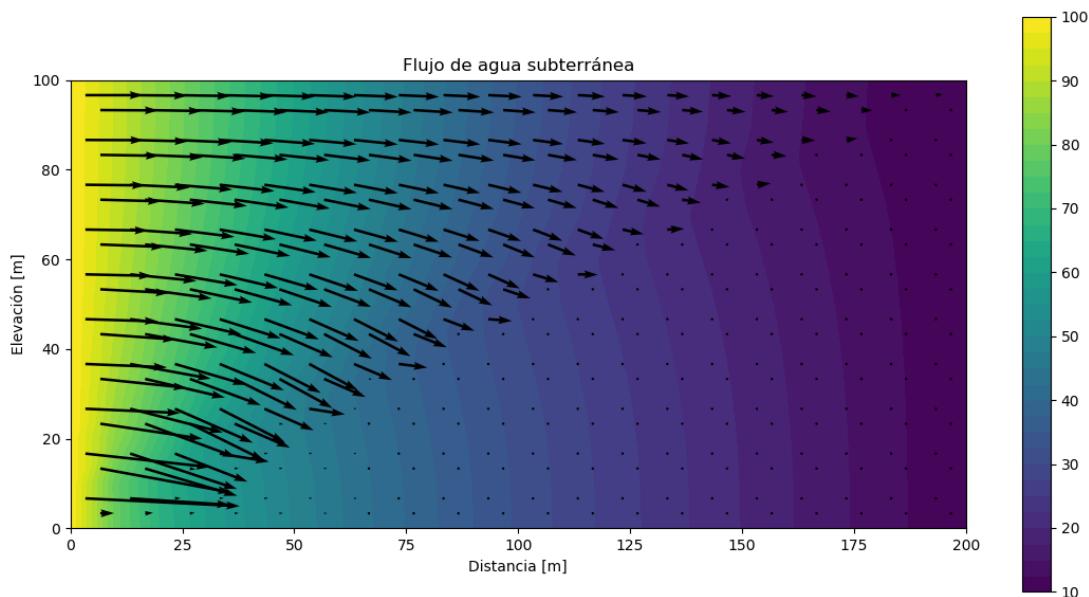


Figura 3.10: Cambio de facies de grano grueso a fino

A partir de los resultados anteriores, podemos observar en la figura 3.9 que el cambio de facies provoca que las isolíneas de cargas hidráulicas se expandan en la zona de baja conductividad hidráulica, mientras que las isolíneas en las zonas de alta conductividad hidráulica se contraen, esto indica que la descarga específica tiene un valor pequeño respecto a la zona de alta conductividad. Lo anterior se exemplifica en la longitud de las flechas, donde se observa la dificultad del movimiento del flujo hasta la zona de transición, donde gradualmente aumenta el valor del flujo hasta el extremo del modelo; además, estas simulaciones nos comprueban la validez de ley tangente, al cambiar la dirección del flujo al momento de pasar a un estrato de diferente composición.

Como en el caso homogéneo, la vista en perfil nos permite tener una visión más clara del movimiento del flujo en el subsuelo, y en conjunto con la vista en planta, nos ayuda a tener un mejor panorama de la dirección y sentido del flujo. La simulación de la vista en perfil tendrá las mismas características que la homogénea, solo que en esta ocasión en el modelo teórico-conceptual los subdominios con diferente conductividad se encuentran a profundidad, en este caso representan dos estratos con diferente conductividad hidráulica que corresponden a un sedimento de grano fino y un sedimento de grano grueso. La ecuación que representa la conductividad hidráulica es igual a la ecuación 3.16, donde los subdominios Ω_1 y Ω_2 son los siguientes:

- $\Omega_1 = [0, 200] \times [0, 100]$ Subdominio 1
- $\Omega_2 = [0, 200] \times [100, 200]$ Subdominio 2

El espacio de funciones que discretizan el dominio en elementos finitos y las condiciones de frontera serán iguales que en el caso homogéneo. Los resultados para este planteamiento de la heterogeneidad son las siguientes:

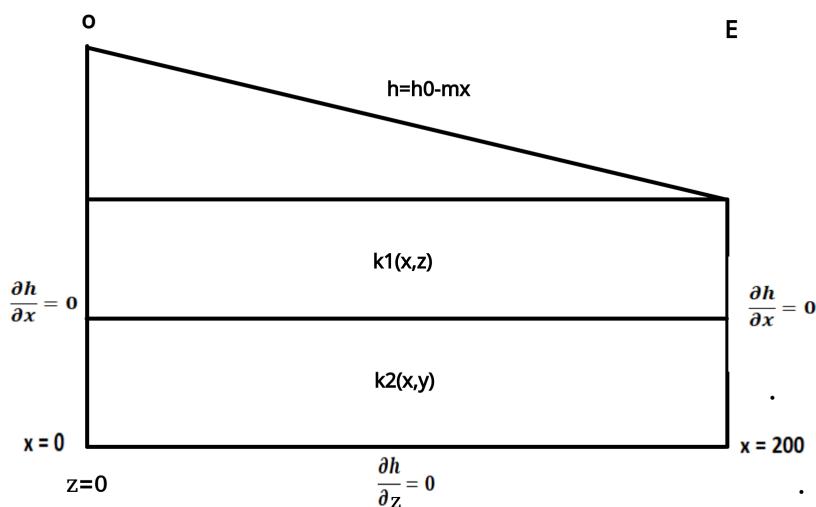


Figura 3.11: Modelo matemático y conceptual

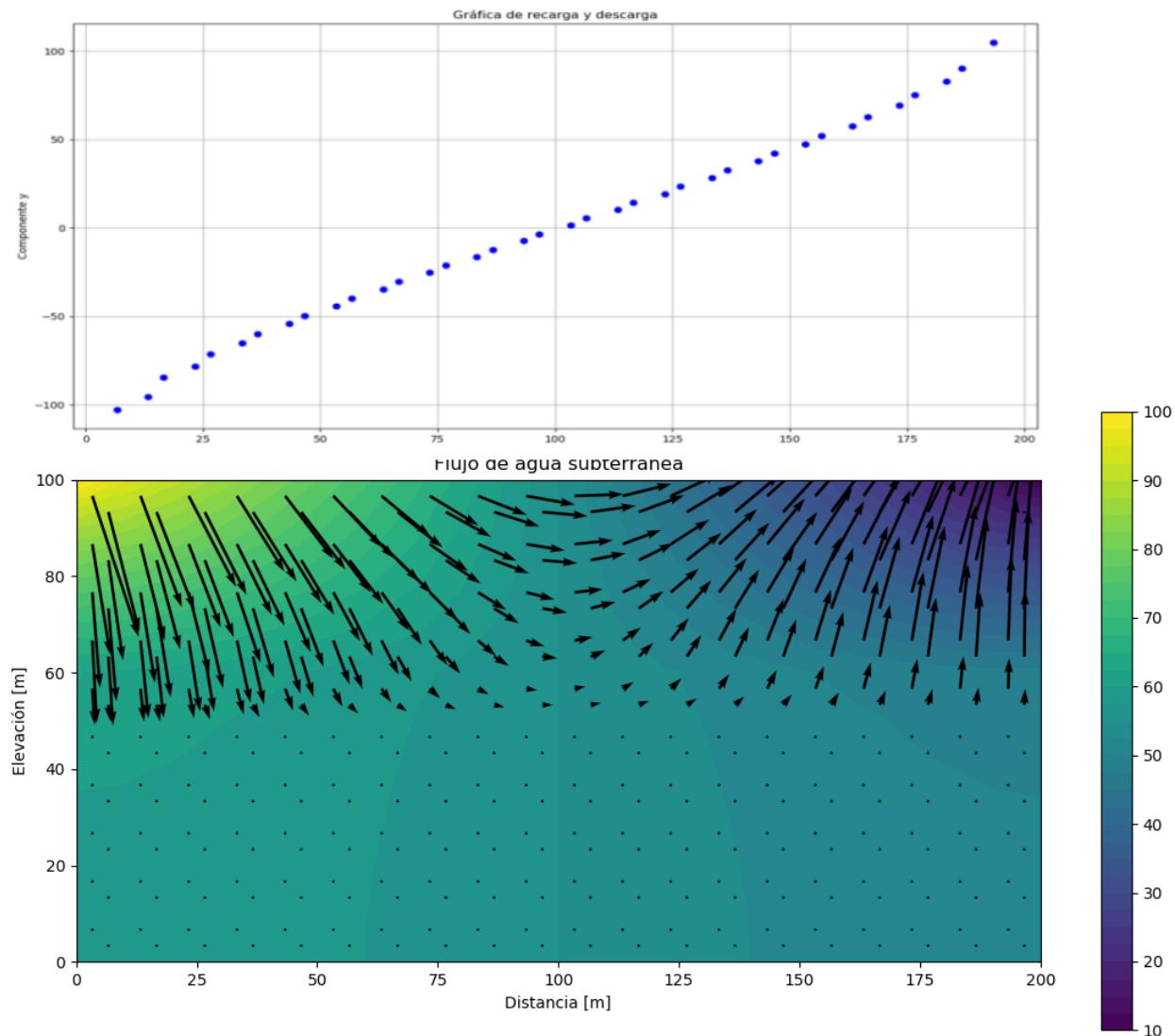


Figura 3.12: Estratificación grano grueso a fino

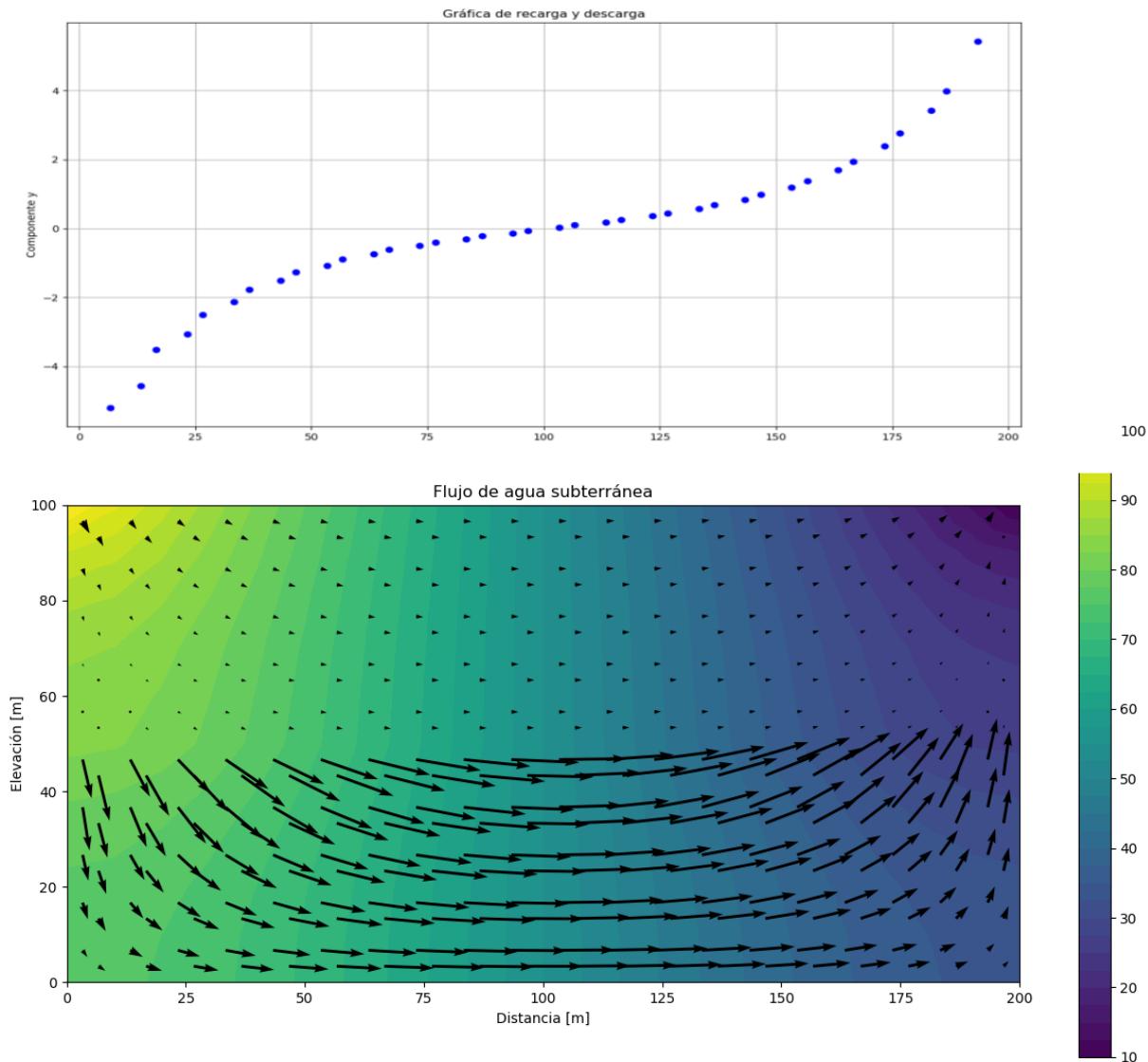


Figura 3.13: Estratificación grano fino a grueso

En este caso, en la figura 3.12 se puede observar que la zona superior de alta conductividad, tiene un parecido al campo de cargas hidráulicas en un material homogéneo, sin embargo, en la zona de transición el flujo disminuye y se vuelve casi vertical con magnitudes muy pequeñas debido a la oposición que ofrece el material al paso del agua, una particularidad de esta simulación es que las líneas de flujo en la superficie convergen a una distancia más corta, por lo que las zonas de flujo local, intermedio y regional son más evidentes.

En el caso de la figura 3.13 las zonas de flujo se amplian, mostrando una mayor distancia de recorrido antes de converger en la superficie, una observación importante de esta simulación es que el flujo es más rápido en la superficie y converge tanto en magnitud como en dirección en las zonas más profundas y cercanas al basamento (frontera impermeable), la

anterior observación se comprueba al hacer la comparación con la figura 3.4 correspondiente a la simulación de material homogéneo.

En el caso del material homogéneo, la magnitud y la dirección del flujo alcanza gradualmente un equilibrio hasta el basamento, mientras que en la figura 3.13 se observa que debido a que el flujo entra en una zona de alta conductividad hidráulica, el flujo mantiene su magnitud y variación en su dirección, y alcanza un equilibrio a una profundidad mayor; el mismo análisis se puede realizar en los resultados mostrados en la figura 3.14, donde las líneas de flujo se estabilizan de forma abrupta en el cambio de material debido a su baja conductividad hidráulica.

3.2.2. Simulación 4: Condiciones de fronteras complejas

A partir del modelo-conceptual mostrado en la simulación 2, impondremos los mismos subdominios de diferente conductividad para observar su comportamiento en condiciones de frontera más complejas (valle intermonano). Esta simulación es una combinación de las condiciones de frontera propuestos en la simulación 2 y la partición del dominio en subdominios de la simulación 4 de la siguiente forma:

- $\Omega_1 = [0, 200] \times [0, 100]$ Subdominio 1
- $\Omega_2 = [0, 200] \times [100, 200]$ Subdominio 2
- $\partial\Omega_D = (0, y) \cup (200, y)$ Condiciones de Dirichlet
- $\partial\Omega_N = (x, 0) \cup (x, 100)$ Condiciones de Neumann

Mientras que las condiciones de frontera están delimitadas por la ecuación 3.11, 3.12 y 3.13, y la función de conductividades hidráulicas está dada por la ecuación 3.16. Los resultados de las simulaciones son las siguientes:

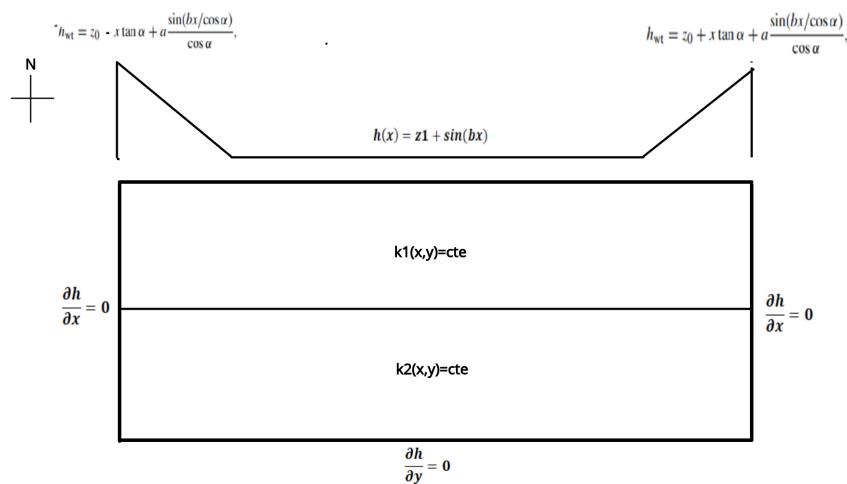


Figura 3.14: Modelo matemático conceptual

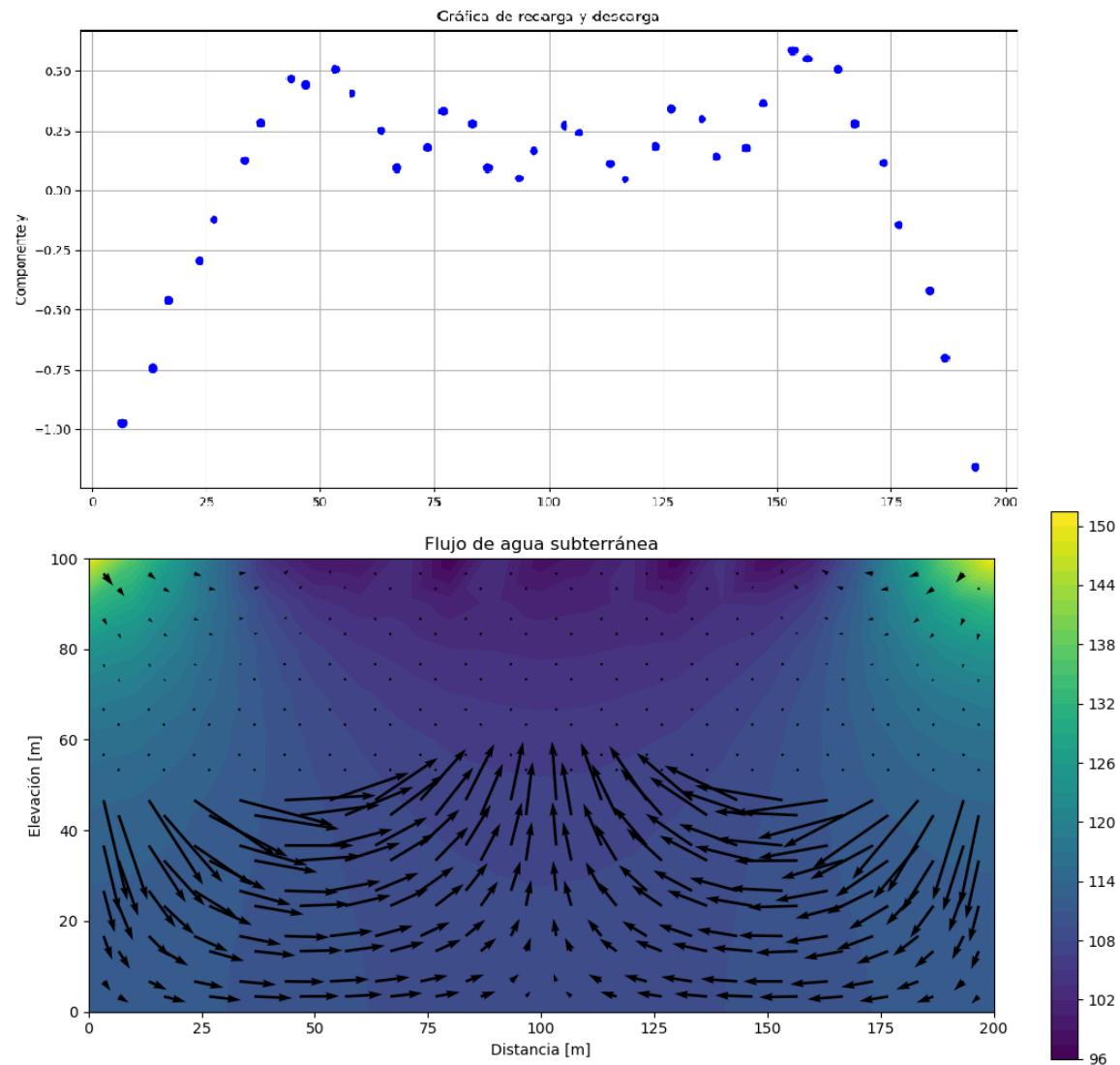


Figura 3.15: Estratificación grano fino a grueso

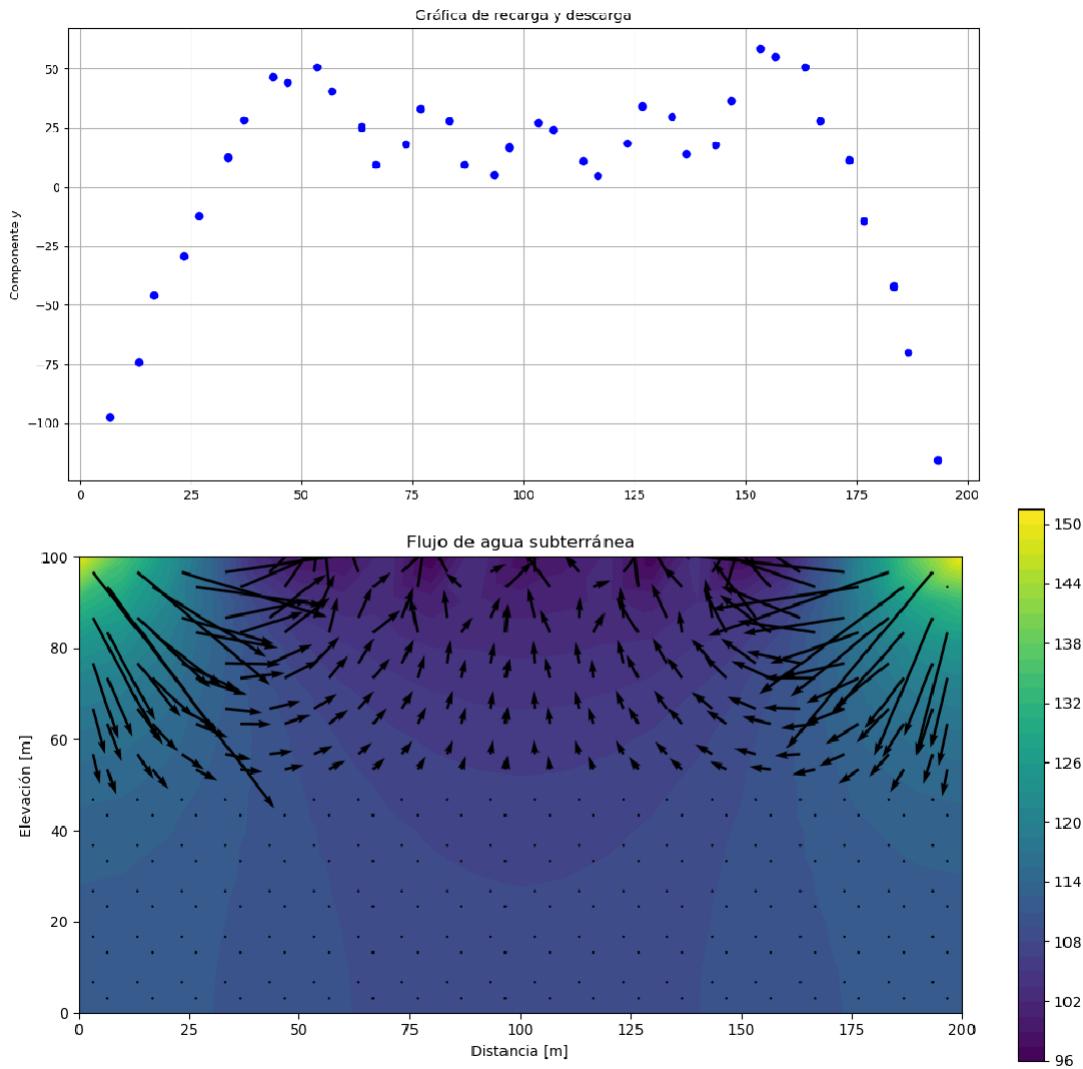


Figura 3.16: Estratificación grano grueso a fino

De acuerdo al análisis de la simulación anterior para condiciones de Dirichlet simples. El flujo al momento de atravesar un material con una conductividad hidráulica más alta provoca una deformación en las isolíneas de carga hidráulica, por lo que el flujo atraviesa rápidamente el material y de la misma forma asciende hacia el centro del valle; en el caso del estrato de menor conductividad en la zona inferior del modelo (figura 3.16), las líneas de flujo son incapaces de penetrar la capa impermeable y las líneas de flujo ascienden de forma casi vertical en el centro del valle.

3.3. Caso heterogéneo aleatorio

En las simulaciones anteriores, la conductividad hidráulica se asignaba según el modelo geológico propuesto y a partir de este se determinaban los patrones de flujo y las zonas de almacenamiento, sin embargo, según lo escrito en la sección 1.2.1, en realidad la conductivi-

dad dentro de una formación de una misma composición, varia según la distribución de una variable aleatoria, es decir, la conductividad se distribuye según una función de distribución en cada punto, lo que llamaremos heterogeneidad aleatoria. Para este caso, donde las simulaciones están determinadas en cada punto del dominio por una función aleatoria $K(\mathbf{x})$, la ecuación que modela el problema es el siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial x}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial z}(K(\mathbf{x}) \frac{\partial h}{\partial z}) = 0 \quad (3.19)$$

Donde la función aleatoria $K(\mathbf{x})$ representa su variación espacial y esta caracterizada por un semivariograma teórico $\gamma(h)$.

3.3.1. Simulación 5: Condiciones de frontera simples

El modelo conceptual-teórico consiste en el estudio de una zona con material poroso cuya composición varia según una distribución de probabilidad, donde el movimiento del flujo se realiza de forma similar que el modelo estudiado en las simulaciones homogéneas. La simulación se realiza en un material de la misma composición pero con tratamiento de la conductividad heterogénea para determinar las características del flujo y el campo de cargas hidráulicas.

La ecuación diferencial que modela el problema es la misma que en el caso homogéneo (ecuación 3.3), de igual forma se ocupan las mismas condiciones de frontera (ecuación 3.4, 3.5 y 3.6). La diferencia principal en este modelo es la definición de los subdominios para cada conductividad hidráulica, donde cada elemento finito resulta ser un subdominio en la que se hará una asignación de cada realización de la función aleatoria $K(\mathbf{x})$.

$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \dots \Omega_i \dots \Omega_n \quad (3.20)$$

$$\Omega_i = T_i(l) \quad (3.21)$$

Donde n es el número de elementos finitos del espacio de discretización \hat{H}_1 . En la ecuación 3.20 cada subdominio es representado por el elemento finito T_i que se delimita por las coordenadas de los grados de libertad l . La formulación variacional se realiza de la misma forma que en el caso heterogéneo simple, fraccionando la forma bilineal en n planteamientos para cada elemento.

$$a(h, v) = \int_{\Omega_1} k_1 \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds + \int_{\Omega_2} k_2 \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds + \dots + \int_{\Omega_i} k_i \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds + \dots + \int_{\Omega_n} k_n \nabla h \cdot \nabla v \cdot ds \quad (3.22)$$

Para obtener los valores de la función aleatoria $K(\mathbf{x})$, se realizará un promedio de 4 simulaciones no condicionales sobre la malla de los centroides (vease sección 2.4.2) para ser asignados en cada elemento. El semivariograma teórico que se ocupó de caracterizar la función aleatoria será un semivariograma exponencial (ecuación 2.1.1) con rango=15, sill=1 y nugget=0. Para la resolución del problema se ocupará el espacio de discretización \hat{H}_1 definida en la ecuación 3.7, mientras que para la definición de la heterogeneidad en cada elemento se ocupará un espacio de funciones H^2 correspondiente a los elementos de Lagrange discontinuos. Los resultados se muestran a continuación:

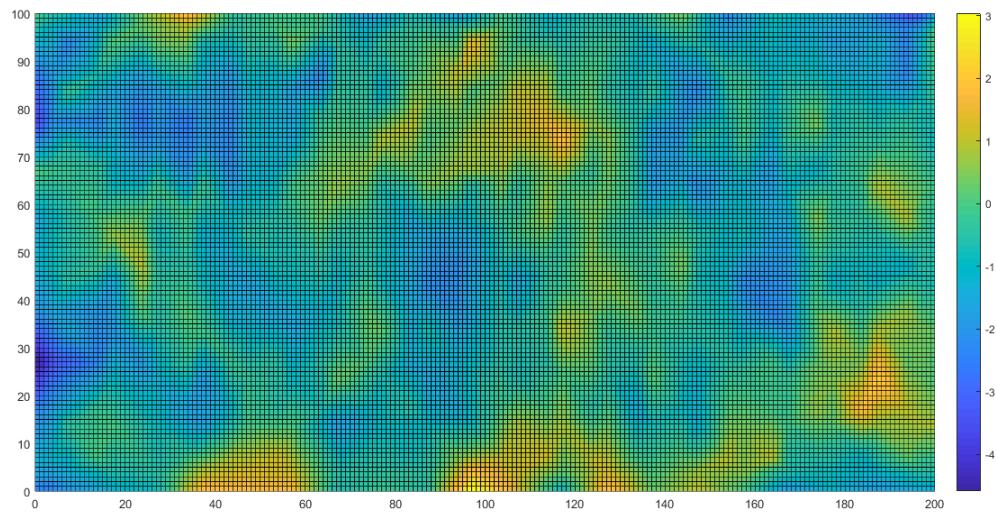


Figura 3.17: Distribución de conductividad hidráulica logarítmica resultado de la simulación no condicional $\ln(K)$

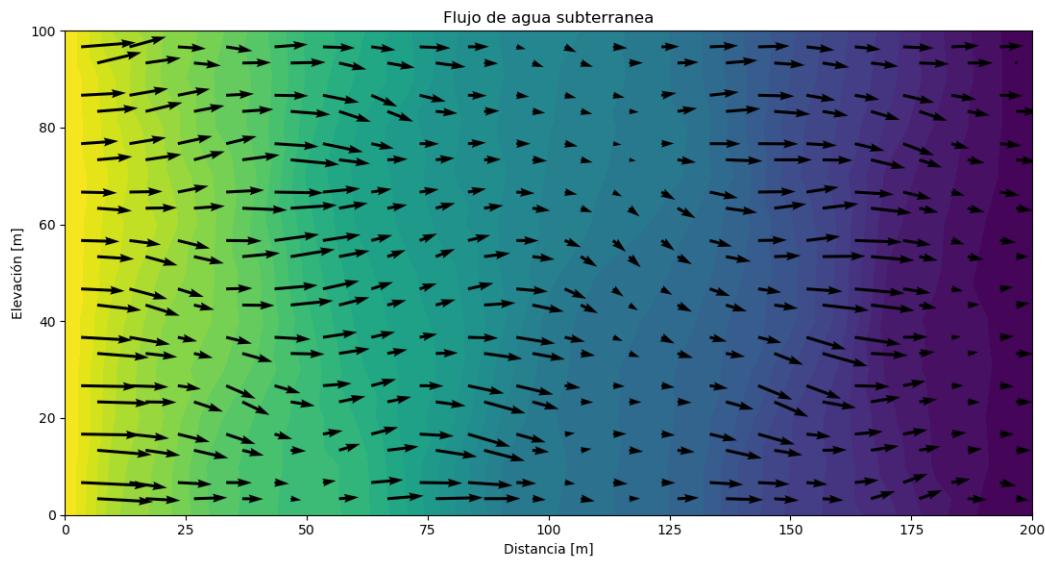


Figura 3.18: Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio isótropo

En la figura 3.17 podemos observar las estructuras que aparecen en el medio, resultado de una simulación no condicional; mientras que en la figura 3.18 podemos observar como a diferencia de la simulación en un material homogéneo mostrada en la figura 3.7, las líneas de flujo se ven modificadas según la posición en la que se encuentran debido a la variación de la conductividad del material. En ocasiones estas líneas de flujo convergen en ciertas zonas y siguen su camino hacia la frontera de baja carga hidráulica, otras buscan salir por la frontera impermeable, pero ninguna tiene una preferencia de dirección.

La anterior simulación considera que la conductividad se comporta de forma isotrópica en todo el dominio; por lo que para abarcar un concepto más amplio de heterogeneidad, se realizaron dos simulaciones bajo las mismas condiciones anteriores pero considerando un medio donde la conductividad es anisótropa; para ello, se definió un elipse de anisotropía, donde el eje mayor se define en la dirección preferencial de la conductividad hidráulica y su caracterización se realiza partir de un semivariograma teórico, mientras que el eje menor se define a partir de una proporción del semivariograma definido en la dirección preferencial.

Los elipses de anisotropía se definieron en su dirección máxima con el semivariograma del ejemplo isotrópico (rango=15, sill=1 y nugget=0) y con una proporción de 0.1 en la dirección de menor preferencia; para la primera simulación, el eje mayor fue en dirección norte, mientras que para la segunda simulación, el eje mayor fue en dirección este.

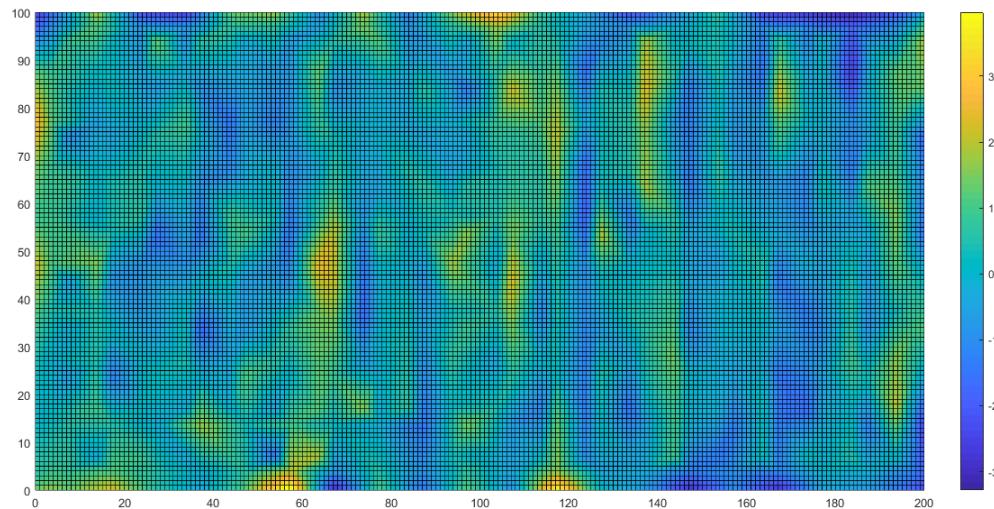


Figura 3.19: Distribución de la conductividad hidráulica logarítmica $\ln(K)$ para un medio anisótropo con dirección preferencial Norte

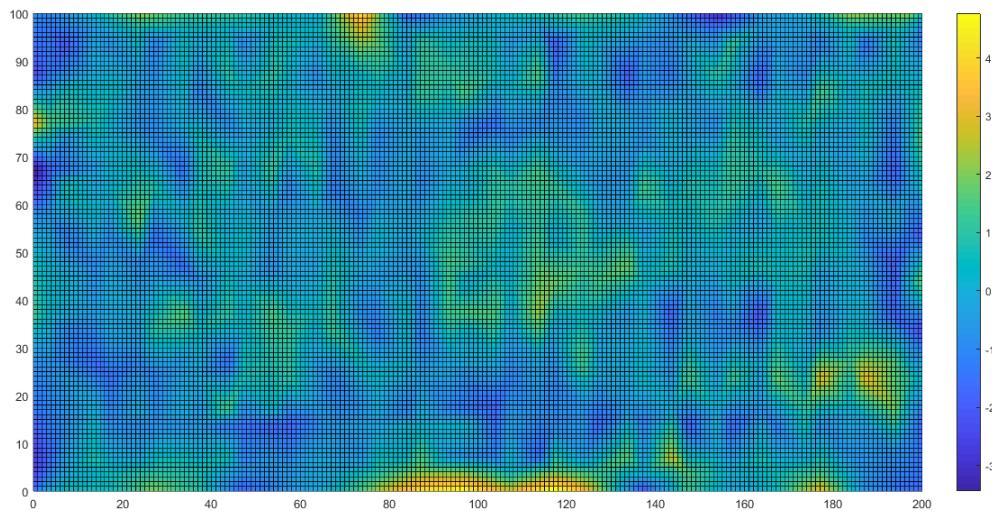


Figura 3.20: Distribución de la conductividad hidráulica logarítmica $\ln(K)$ para un medio anisótropo con dirección preferencial Este

Como se puede observar en las figuras 3.21 y 3.22, a diferencia de las estructuras resultantes de una simulación no condicional en un medio isótropo (Figura 3.17), estas aparecen alargadas en su dirección preferencial, por lo que la dirección que toma el flujo cambiaría según la forma de la estructura.

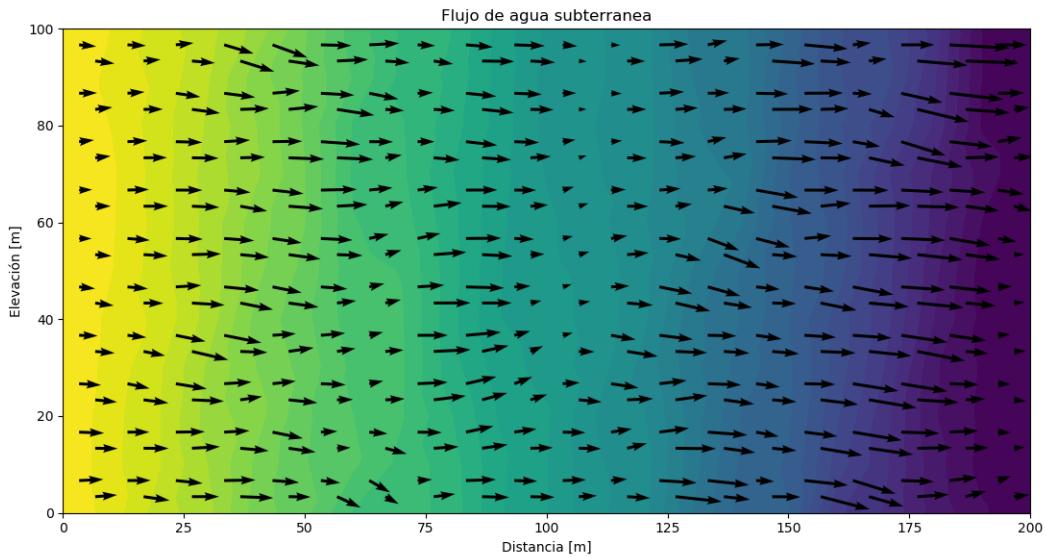


Figura 3.21: Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio anisótropo (Dirección norte)

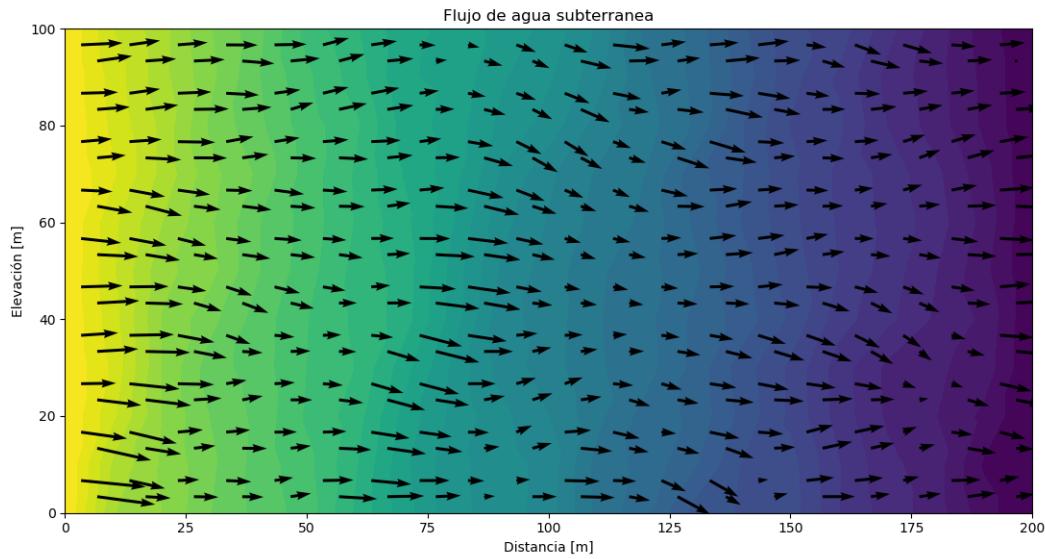


Figura 3.22: Campo de cargas hidráulicas y flujo para un medio poroso heterogéneo aleatorio anisótropo (Dirección este)

A diferencia de los resultados mostrados para un medio isótropo (Figura 3.18), se puede observar como las líneas de flujo rodean las estructuras con formas más alargadas según su dirección preferencial.

Discusión

El uso de código abierto para resolver problemas de flujo de agua subterránea es una alternativa para entender su comportamiento en diferentes modelos geológicos, la plataforma computacional FeniCS resulta ser una herramienta eficiente para modelar diferentes ámbitos geológicos donde se da el movimiento del flujo. En la sección anterior se obtuvieron resultados para diferentes escenarios; en el caso de la primer simulación, se logró describir el movimiento simple del flujo de agua de un extremo a otro suponiendo un acuífero rectangular e impermeable en los extremos, el código se simplifica al aplicar las funciones de la biblioteca FEniCS, devolviendo el campo de cargas hidráulicas tanto para el corte vertical como para el corte horizontal, los valores de flujo que se obtuvieron corresponden al mismo resultado que el propuesto por József Tóth (1960) para el mismo problema, comprobando la eficacia del mismo.

Estas simulaciones también fueron de ayuda para comprender algunos conceptos de la teoría de flujo subterráneo, en la simulación 2, se aplicó un modelo para un acuífero rectangular cuya carga hidráulica recreaba estar sobre un valle intermontano, donde fue posible definir las zonas de recarga y descarga con apoyo de las gráficas del componente vertical del flujo en la superficie, otro concepto hidrogeológico que se reforzó, fue con la simulación 3, con la ley tangente que se cumple al momento de que el flujo de agua atraviesa un material de diferente conductividad, cambiando su dirección y provocando un destino distinto al esperado en un medio homogéneo. La simulación 5 tiene la representación más cercana a la realidad del medio físico, al definir por elemento un valor distinto de conductividad hidráulica que varía según un campo log-gaussiano, como es de esperar, los vectores de flujo asumen diferentes direcciones y puntos de convergencia que son de principal interés si queremos definir las zonas de recarga y descarga.

La utilidad de la biblioteca se demuestra al momento de definir con mucha facilidad las condiciones de frontera y la heterogeneidad del medio, debido a que solo es necesario la creación de dos funciones, una que defina la estructura del medio que depende de nuestro modelo conceptual y otra función que defina nuestras fronteras. Para las simulaciones donde se ven involucradas condiciones de frontera mas complejas, es necesario alargar el código definiendo funciones por cada segmento de la frontera que queramos cambiar (simulaciones 2 y 4) mientras que en el caso de un medio heterogéneo, la principal dificultad radica en la complejidad de la estructura del medio; para el caso de una heterogeneidad simple (a mayor escala) basta con definir una función por cada zona con diferente valor de conductividad hidráulica, pero cuando aumenta la variabilidad espacial al punto en que cada elemento adquiere un valor distinto de conductividad hidráulica, se hace imposible definir una función por elemento,

la solución fue la creación de un script que recorre todo el dominio y va asignando a cada elemento su valor correspondiente de conductividad.

Los resultados de estas simulaciones nos permiten colocar la plataforma FEniCS como una adecuada herramienta no solo para hacer simulaciones númericas de flujo de agua subterránea de forma convencional, sino que en conjunto con bibliotecas de análisis geoestadístico (R o python) proveen una poderosa herramienta para resolver modelos de flujo estocástico, siendo la simulación 4 un posible escenario para un modelo estocástico donde la conductividad hidráulica es una función aleatoria que se encuentra definida espacialmente por un semivariograma teórico donde otras variables que se pueden considerar como funciones aleatorias son la fuente o las fronteras del modelo.

Los retos a futuro consisten en probar todas las capacidades de FEniCS en análisis mas complejos, el uso de métodos mixtos para obtener de forma simultánea el campo de cargas hidráulicas y el flujo númerico, la aplicación en la modelación estocástica, mejoras en la herramienta de mallado, el uso de diferentes semivariogramas teóricos, entre otros problemas de importancia en la modelación de flujo de agua subterránea.

Conclusiones

1. La plataforma computacional FEniCS resulta ser una herramienta eficiente para resolver modelos de flujo de agua subterránea de forma semiautomática.
2. El punto clave de la modelación con FEniCS es definir de forma correcta la formulación variacional de la ecuación de flujo y determinar el tipo de elemento finito que se ocupará para cada problema según nuestro modelo conceptual.
3. Es necesario poner principal atención al momento de definir las condiciones de frontera y la heterogeneidad del medio, creando una función por cada condición y subdominio del medio.
4. Para el caso de un medio heterogéneo aleatorio, es necesario la creación de un código que calcule los centroides de cada elemento y otro código que recorra cada elemento para asignar las conductividades hidráulicas.
5. El uso de otras bibliotecas como Matplotlib, nos permiten tener una mejor visualización de nuestro modelo, su campo de cargas y su campo de flujo.
6. La aplicación en conjunto de FEniCS con Gstat en R, nos permiten dar un tratamiento de la conductividad hidráulica como función aleatoria, haciendo simulaciones no condicionales de la conductividad según la posición de nuestros elementos (centroides).

Apéndices

Apéndice A

Códigos de simulaciones numéricas

Para una consulta completa del código, se recomienda consultar el repositorio en github en la siguiente dirección electrónica. <https://github.com/skypsnet/Modelaci-nPython>

A.1. Códigos del caso homogéneo

El código para la simulación 1 en materiales homogéneos es la siguiente:

```
#!/usr/bin/env python
#-*- coding: 850 -*-

from __future__ import print_function
from fenics import *
import numpy as np
import random as ra
import matplotlib.pyplot as plt
import sys
reload(sys)
sys.setdefaultencoding('utf-8')

# Se crea la malla donde se define el dominio

mesh= RectangleMesh(Point(0,0),Point(200,100),20,10)
V = FunctionSpace(mesh, 'P', 1)
# Se definen las condiciones de fronteras

def frontera_I(x,frontera):
    tol=1E-14
    if frontera:
        if x[0]<=tol:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False
```

```

def frontera_D(x,frontera):
    tol=1E-14
    if frontera:
        if abs(x[0]-200)<=tol:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False

F_D = DirichletBC(V, Constant(10), frontera_D)
F_I = DirichletBC(V, Constant(100), frontera_I)
bc = [F_D,F_I]

#Se define el problema variacional

u=TrialFunction(V)
v=TestFunction(V)
f=Constant(0)
a=dot(grad(u),grad(v))*dx
g=Constant(0)
L=f*v*dx-g*v*ds

# Se realiza el cálculo de la solución

u= Function(V)
solve(a==L,u,bc)
#tau=project(-grad(u))
#flujo=tau1.vector()[:]

# Ploteo de la solución
plt.figure()
ax= plt.subplot(111)
im=plot(u)
plt.colorbar(im)
lo=plot(-grad(u))
plt.title('Flujo_de_agua_subterránea')
plt.ylabel('Elevación_[m]')
plt.xlabel('Distancia_[m]')
plt.show()

```

Para la simulación en perfil, las condiciones de frontera cambian de la siguiente forma:

```

def frontera_S(x,frontera):
    tol=1E-14
    if frontera:
        if abs(x[1]-100)<=tol:

```

```

    return True
else:
    return False

F_S = DirichletBC(V, Expression('100-0.45*x[0]', degree=1), frontera_S)
bc = [F_S]

```

Las condiciones de frontera para el caso de valle intermontano fue la siguiente:

```

#!/usr/bin/env python
#-*- coding: 850 -*-

"""
Script que resuelve la ecuacion de flujo estacionario de Toth para condiciones
complejas de valle intermontano
y un medio heterogeneo (Modelo de 2) a partir del metodo de elemento (Fenics)
Por: Ricardo Balam Chagoya Morales

Condiciones de la funcion que describe la geometria del nivel freatico

Amplitud de la ecuacion senoidal de pie de montaña = 1 m
Amplitud de la ecuacion senoidal de intermontana = 10 m
longitud de onda de la ecuacion senoidal = 0.01 m
Angulo de pendiente = 1.4711 rad
"""

from __future__ import print_function
from fenics import *
import numpy as np
import random as ra
import sys
reload(sys)
sys.setdefaultencoding('utf-8')

# Refinación de la malla
celx=20
cely=10
# Conductividad hidraulica central del primer y el segundo estrato
k1= 10
k2= 10
# Datos del modelo
lonx=200
lony=100
pasox=lonx/celx
pasoy=lony/cely

# Crea el malla rectangular con intervalos de 20 metros
mesh = RectangleMesh(Point(0,0), Point(200,100), celx, cely)
V = FunctionSpace(mesh, 'P', 1)

```

```

# Se definen las condiciones de frontera superior
# Condicion de pie de montaña
u_I = Expression('500-x[0]*tan(1.4711)+1*(sin((1000*x[0])/cos(1.4711))/cos(1.4711))', degree=1)

def frontera_I(x, dentro_frontera):
    tol = 1E-14
    if dentro_frontera:
        if abs(x[1]-100)<=tol and abs(x[0])<=40:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False

# Condicion de valle intermontano
u_C = Expression('100+10*(sin(1000*x[0]))', degree=1)

def frontera_C(x, dentro_frontera):
    tol = 1E-14
    if dentro_frontera:
        if abs(x[1]-100)<=tol and 40<=abs(x[0])<=160:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False

# Condicion de pie de montaña derecho
u_D = Expression('-1500+x[0]*tan(1.4711)+1*(sin((1000*x[0])/cos(1.4711))/cos(1.4711))', degree=1)

def frontera_D(x, dentro_frontera):
    tol = 1E-14
    if dentro_frontera:
        if abs(x[1]-100)<=tol and abs(x[0])>=160:
            return True
        else:
            return False
    else:
        return False

CondIzquierda = DirichletBC(V, u_I, frontera_I)
CondCentral = DirichletBC(V, u_C, frontera_C)
CondDerecha = DirichletBC(V, u_D, frontera_D)

bc = [CondIzquierda, CondCentral, CondDerecha]

```

A.2. Códigos del caso heterogéneo simple

Las secciones del código que definen la heterogeneidad para la vista en planta es la siguiente (se intercambian los valores de la conductividad para definir el tipo de estrato):

```
class K(Expression):
    def set_k_values(self, k_0, k_1):
        self.k_0, self.k_1 = k_0, k_1
    def eval(self, value, x):
        tol = 1E-14
        if x[0] <= 100 + tol:
            value[0] = self.k_0
        else:
            value[0] = self.k_1

kappa = K(degree=1)
kappa.set_k_values(10,100)
```

Para el caso de la vista en perfil:

```
class K(Expression):
    def set_k_values(self, k_0, k_1):
        self.k_0, self.k_1 = k_0, k_1
    def eval(self, value, x):
        tol = 1E-14
        if x[1] <= 200 + tol:
            value[0] = self.k_0
        else:
            value[0] = self.k_1

kappa = K(degree=1)
kappa.set_k_values(10,100)
```

A.3. Códigos del caso heterogéneo aleatorio

La sección que define la heterogeneidad aleatoria es la siguiente:

```
# Se define la heterogeneidad en el sistema
# Se realiza el marcado de la malla
k=range(0,400,1)
subdomains=CellFunction('size_t',mesh,0)
cont=0
for cell in cells(mesh):
    subdomains[cell]=k[cont]
    cont=cont+1
```

```
plt.figure()
im1=plot(subdomains)
print(subdomains)
plt.colorbar(im1)
```

```
# Se crea un espacio de funciones que simbolizan la conductividad hidráulica
V0= FunctionSpace(mesh,"DG",0)
k=Function(V0)

# Se asigna para cada valor del marcado un valor del conjunto de
# conductividades
ka = np.loadtxt("Pruebayy.txt",delimiter=',',skiprows=1,usecols=[6])
k_values=np.exp(ka)
cont=0
for cell_no in cells(mesh):
    subdomain_no=subdomains[cell_no]
    k.vector() [cont]=k_values [subdomain_no]
    cont=cont+1
```

Apéndice B

Códigos en R para implementación de heterogeneidad

B.1. Busqueda de centroides y simulación no condicional

```
# Script en R que a partir de la biblioteca gstat calcula los centroides de
# cada elemento finito y crea el conjunto de valores de simulacion no
# condicional y genera un conjunto de valores de carga hidraulica a partir de
# un variograma exponencial

library("gstat")
xy <- expand.grid(1:5, 1:5)

##### Busqueda de centroides #####
b=10
h=10
x=matrix(0,1,40)
y=matrix(0,1,20)
yy=matrix(0,1,400)
# Ciclo que obtiene la coordenada x de los centroides
contx=1
for(i in 1:20){
  for(j in 1:2){
    if (contx%%2==0)
    {
      x[contx]<-((2*b)/3)+b*(i-1)
    }
    else
    {
      x[contx]<-(b/3)+b*(i-1)
    }
    contx=contx+1
  }
}
```

```

# Ciclo que obtiene la coordenada y de los centroides
conty=1
for(m in 1:10){
  for(n in 1:2){
    if (conty %%%=0)
    {
      y[conty]<-((h)/3)+h*(m-1)
    }
    else
    {
      y[conty]<-(2*h/3)+h*(m-1)
    }
    conty=conty+1
  }
}

# Se crea el vector de coordenadas x por elemento
xx=c(x,x,x,x,x,x,x,x,x,x)
# Se crea el vector de coordenadas y por elemento
contyy=1
aux=1
for(i in 1:10){
  for(j in 1:40){
    if(contyy %% 0=0){
      yy[contyy]<-y[aux+1]
    }
    else{
      yy[contyy]<-y[aux]
    }
    contyy=contyy+1
    aux=aux+2
  }
}
yy=as.vector(yy)
# Se crea un data frame para los centroides
xy=data.frame(xx,yy)
names(xy) <- c("x","y")

#####
#####Simulacion no condicional#####
#####

# Se realizan las simulaciones no condicionales
vgm1=vgm(1,"Exp",15)
g.dummy <- gstat(formula = z~1, locations = ~x+y, dummy = TRUE, beta = 0,model = vgm1, nmax = 20)
yy <- predict(g.dummy, newdata = xy, nsim = 4)
write.csv(yy, file="Pruebayy.csv")

```

Bibliografía

- [1] ARCHE, A. *Sedimentología: Del proceso físico a la cuenca sedimentaria*. Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 2010.
- [2] BEER. *Mecánica vectorial para ingenieros: Estática*. McGraw-Hill Interamericana de España S.L., 2010.
- [3] BOGGS, ET AL. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer 1. overview and site description. *Water Resources Research* 28 (1992), 3281–3291.
- [4] ESPARZA, F. P. Fundamentos matemáticos del método de los elementos finitos.
- [5] FREEZE, A. R., AND CHERRY, J. A. *Groundwater*. Prentice-Hall, 1979.
- [6] GALLARDO, A. Geoestadística. *Ecosistemas* (2006), 11.
- [7] GELHAR, ET AL. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research* 28 (1992), 1955–1974.
- [8] HUANG, ET AL. Effects of organic matter heterogeneity on sorption and desorption of organic contaminants by soils and sediments. *Applied Geochemistry* 18 (2003), 955–972.
- [9] HUBBERT, M. The theory of groundwater motion. *Journal of geology*, 48 (1940), 785–944.
- [10] ISTOK, J. *Groundwater Modeling by the Finite Element Method (Water Resources Monograph)*. American Geophysical Union, 1989.
- [11] J.PEBESMA, E. Gstat user's manual, 2014.
- [12] KOLTERMANN, AND GORELICK. Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process imitating and descriptive approaches. *Water Resources Research* 32 (1996), 2617–2658.
- [13] KRIGE, D. A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. *J. of the Chem., Metal. and Mining Soc. of South Africa* 52 (1951), 119–139.
- [14] LOGG, A., MARDAL, K.-A., WELLS, G. N., ET AL. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.
- [15] MARSILY, D. *Quantitative hydrogeology*. Academic Press, 1986.

- [16] MATHERON, G. *Traité de géostatistique appliquée*. *Editions Technip* (1962).
- [17] PÉREZ, J. E. L. *Modelo de flujo y transporte en medios porosos en fenics usando el método de elementos finitos mixtos.*, 2018.
- [18] QUINTÍN, C. G. J., SILVERIO, A. Q., AND CRUZ, E. E. La simulación condicional en geoestadística. *Minería y Geología XVII*, 1 (2000).
- [19] RODRIGUEZ, G., AND JORGE, A. El concepto geoestadístico de variable regionalizada. *Terra Nueva Etapa [en línea]* XV, 24 (1999).
- [20] SEN, Z. *Practical and applied hydrogeology*. Elsevier, 2015.
- [21] TÓTH, J. *Gravitational system of groundwater flow*. 2009.
- [22] VIERA, M. D. *Geoestadística aplicada*. UNAM, 2002.
- [23] VÍT DOLEJSI, M. F. Discontinuous galerkin method, 2016.
- [24] WHITELEY, J. *Finite Element Methods: A Practical Guide (Mathematical Engineering)*. Springer, 2017.
- [25] Y GONZÁLEZ SILVIA, G. A. Introducción a r, 2000.