

01190
10



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO**

**FACULTAD DE INGENIERÍA
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO**

**"MODELACIÓN DE LA DINÁMICA EN GRAN
ESCALA DE FLUJO Y TRANSPORTE EN
MEDIOS POROSOS UTILIZANDO TEORIA DE
FILTRADO ESPACIAL"**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE
DOCTOR EN INGENIERÍA**

PRESENTA:

MIGUEL ÁNGEL MEJÍA GONZÁLEZ



DIRECTOR DE TESIS: DR. ALVARO ALDAMA RODRÍGUEZ



CAMPUS MORELOS, MÉXICO

2003

**TESIS CON
FOLETA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

“Entonces alzó Moisés su mano y golpeó la roca con su vara dos veces; y salieron muchas aguas...”

Números 20:11

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

DEDICATORIAS

Al Señor Jesús: *“Porque de él, y por él, y para él, son todas las cosas...” Romanos 11:36*

A Elvira: Una extraordinaria esposa y excepcional madre.

A Daniela y Andres, mi herencia de parte de Dios.

A mi familia. Su amor y dirección me dieron la fuerza interna y el carácter que me han sostenido a través de la vida.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

AGRADECIMIENTOS

A mi director de tesis, el Doctor Alvaro Aldama Rodríguez. En el encontré una clara dirección en el camino de la ciencia. Un camino que se extiende mucho más allá del mío. Para mí fue un honor que me permitiera estar a su lado un trecho del sendero.

Al Doctor Roger Daniel Beckie. Un ejemplar profesor dedicado a proveer la más fina educación.

A mi comité tutorial, el Doctor Francisco Javier Aparicio, Doctor Moises Berezowsky, Doctora Graciela Herrera, Doctor Carlos Fuentes y el Doctor Carlos Escalante.

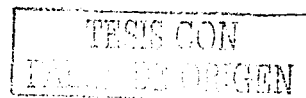
Al Instituto mexicano de Tecnología del Agua y al CONACYT.

RESUMEN

Se desarrollaron modelos para la dinámica de escala grande del flujo y transporte en medios porosos saturados. Se definieron rigurosamente las escalas grandes por medio de filtros espaciales. La dinámica de escala grande la gobiernan leyes de flujo y transporte no local. Se derivaron aproximaciones locales usando expansiones asintóticas.

Se realizaron simulaciones numéricas para investigar la precisión de las aproximaciones. Si las aproximaciones se tratan como ecuaciones de alto orden, las ecuaciones resultantes son muy difíciles de resolver. Sin embargo, si los términos de alto orden de las aproximaciones se ven como correcciones a la ley de flujo convencional, las aproximaciones del flujo y la carga se pueden calcular usando una estrategia de perturbación. Los términos de alto orden de la aproximación del transporte toman en cuenta el efecto de la advección en las escalas pequeñas, y se vieron y se trataron como si fueran los tradicionales términos de dispersión.

Existe evidencia de que los medios porosos tienen un comportamiento autosimilar, en el sentido de que el espectro asociado a la conductividad hidráulica exhibe un rango que decae siguiendo una potencia negativa del número de onda. Una representación logarítmica de este comportamiento produce una línea recta que se puede extrapolar a números de onda grandes; esto es, las escalas pequeñas. Con base en esta observación, se usó una técnica de muestreo espectral a fin de generar realizaciones de conductividad hidráulica para medios porosos muy heterogéneos, en los cuales se conoce solamente un número muy pequeño de dichos valores de conductividad.

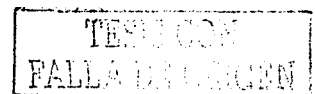


ABSTRACT

We develop models for the large scale dynamics of flow and transport in saturated porous media. We rigorously define the large scales using spatial filtering. The large scale dynamics are governed by a non-local flow and transport law. We derive local approximations to the non-local large scale laws using asymptotic expansions.

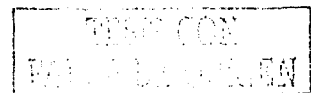
We investigate the accuracy of the approximations using numerical simulations. If treated as higher order equations, the approximations yield equations that are difficult to solve and nearly singular. If however the higher order terms of the approximations are viewed as corrections to the conventional Darcy flow law, then the approximate large scale head and flux can be calculated using a regular perturbation strategy. The higher order terms of the approximations of the transport takes in account the effect of the subgrid advection and are viewed and treated as the traditional dispersion terms.

Exists evidence that porous media often display a self-similar behavior, in the sense that the spectrum associated to hydraulic conductivity exhibits a range where it decays following a negative power of wavenumber. A log-log representation of this behavior renders a straight line which may be very easily extrapolated to large wavenumbers, i.e., small scales. On the basis of this observation, a spectral sampling technique is used to generate realizations of hydraulic conductivity for highly heterogeneous porous media, for which relatively small number of values of this parameter are known.



ÍNDICE

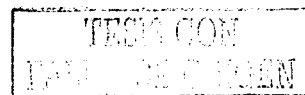
Resumen	i
Abstract	ii
Índice	iii
Índice de figuras	vi
CAPÍTULO 1 Introducción	1
1.1. General	1
1.2. Antecedentes	2
1.2.1. Flujo y transporte en medios porosos	2
1.2.1.1. Método de la conductividad efectiva	2
1.2.1.2. Métodos estocásticos	3
1.2.2. Flujo a superficie libre	4
1.2.2.1. Filtrado espacial	4
1.3. Aportaciones de la tesis	5
CAPÍTULO 2 Ecuaciones del flujo en medios porosos espacialmente filtradas: teoría	6
2.1. Introducción	6
2.2. Ecuaciones de movimiento	7
2.3. Interacción de escalas	8
2.4. Método de filtrado espacial	11
2.5. El problema de cerradura y localización	13
2.6. La metodología de filtrado espacial	14
2.7. La metodología de filtrado de Butterworth	16
CAPÍTULO 3 Ecuaciones del flujo del agua subterránea filtradas espacialmente: estrategia de solución y experimentos numéricos	21
3.1. Introducción	21
3.2. Ley de Darcy filtrada	22



3.3. Prueba a priori	23
3.3.1. Filtrado numérico	24
3.3.2 Evaluación del error	25
3.3.3. Aproximaciones discretas	25
3.3.4. Simulaciones	26
3.4. Ecuaciones de flujo filtradas	35
3.5. Prueba a posteriori: Solución de las ecuaciones del aguas subterranea en escala grande	38
3.5.1. Resultados	40
CAPÍTULO 4 Transporte de solutos en medios poros en escala grande	48
4.1. Introducción	48
4.2. Ecuación de transporte filtrada espacialmente	53
4.3. Modelos de cerradura de submallá	55
4.4. Transporte a priori	57
4.4.1. Experimentos numéricos	59
4.5. Transporte a posteriori	62
4.5.1. Experimentos numéricos	66
CAPÍTULO 5 Flujo y transporte en medios poroso autosimilares	70
5.1. Introducción	70
5.2. Geoestadística fractal	71
5.3. Caracterización geoestadística	72
5.4. Interpolación estocástica	78
5.5. Simulaciones de campos de conductividad	78
5.5.1. Simulación no condicional	78
5.5.2. Simulación condicional	80
5.6. Flujo y transporte en medios porosos autosimilares	83
CAPÍTULO 6 Conclusiones y recomendaciones	87
6.1. Conclusiones	87



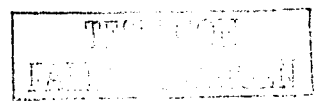
6.2. Recomendaciones	88
6.2.1. Filtros anisotrópicos	88
6.2.2. Métodos numéricos	88
6.2.3. Implementación práctica	89
BIBLIOGRAFÍA	90
APÉNDICE A FILTROS ESPACIALES	95
APÉNDICE B ANTECEDENTES MATEMÁTICOS	101
B.1. Clases de Schwartz	101
B.2. Propiedades de las clases de Schwartz	101
B.3. Teoremas	102
APÉNDICE C ANÁLISIS ESPECTRAL	105
APÉNDICE D ESPECTRO DE LA SIMULACIÓN CONDICIONAL	111



ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Interacciones no lineales	10
3.1. Dominio bidimensional	26
3.2. Campo de conductividades	27
3.3. Espectro de energía del campo de conductividad	28
3.4. Flujo primitivo y filtrado	30
3.5. Flujo de orden cero a priori	31
3.6. Flujo de orden uno a priori	32
3.7. Flujo de orden dos a priori	33
3.8. Tasa de convergencia	34
3.9. Flujo de orden cero a posteriori	41
3.10. Flujo de orden uno a posteriori	42
3.11. Flujo de orden dos a posteriori	43
3.12. Tasa de convergencia	44
3.13. Flujo aproximado con delta igual a dos	45
3.14. Flujo aproximado con delta igual a cuatro	46
3.15. Flujo aproximado con delta igual a ocho	47
4.1. Campo de velocidades primitivo	50
4.2. Campo de velocidades escalado	51
4.3. Curva de llegada con la velocidad primitiva	52
4.4. Curva de llegada con la velocidad escalada	52
4.5. Dominio bidimensional para el transporte	60
4.6.1 Flujo del contaminante exacto y aproximado	61
4.7.1 Campo de conductividad primitivo	68
4.8. Concentración exacta y aproximada del transporte a posteriori	69
5.1. Movimiento browniano con $H=0.6$	75
5.2. Movimiento browniano con $H=0.4$	76
5.3. Espectro de la conductividad de un pozo	77
5.4. Simulación fractal no condicionada	79
5.5. Campo de conductividades exacto	81

5.6. Campo de conductividades fractal condicionado	82
5.7. Solución exacta y aproximada para la prueba del flujo	85
5.8. Solución exacta y aproximada para la prueba del transporte	86
A.1. Señal de entrada para un filtro de paso bajo	95
A.2. Señal de salida de un filtro de paso bajo	96
A.3. Filtro ideal	97
A.4. Filtro ideal en el espacio de Fourier	98
A.5. Filtro Gaussiano en el espacio real	99
A.6. Filtro Gaussiano en el espacio de Fourier	99
A.7. Filtro de Butterworth	100



CAPÍTULO 1

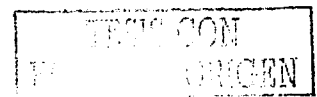
INTRODUCCIÓN

1.1. Generalidades

La dinámica de todos los sistemas físicos se desarrolla en muchas escalas de longitud. Por lo mismo, siempre hay escalas demasiado pequeñas para ser resueltas mediante un modelo o para ser observadas con los aparatos convencionales de medición. Esto es particularmente cierto para el flujo de fluidos en medios geológicos, debido a que estos medios porosos tienen variabilidad en un rango muy amplio de escalas (poros del orden de milímetros hasta pianos que tienen kilómetros de longitud). Tanto el flujo como el transporte son afectados por heterogeneidades en todas las escalas.

Un problema fundamental que se tiene cuando se trata de modelar el flujo y el transporte, es representar en el modelo el efecto de la variabilidad en las diferentes escalas. Por ejemplo, en un modelo en que se usa la ley de Darcy, las moléculas del agua no se describen explícitamente. La escala de resolución de dicha ley es mucho más grande que la escala molecular. En un modelo numérico, la variabilidad en escalas más grandes que las celdas de la malla se puede representar asignando diferentes propiedades del material en las celdas. Sin embargo, la variabilidad en escalas más pequeñas que las celdas no se puede resolver y no se representa explícitamente. De hecho, ningún modelo puede resolver explícitamente todas las escalas de variabilidad. Todos los modelos tienen una escala finita de resolución y, por lo tanto, no pueden describir la verdadera dinámica del sistema.

Aquí surge una pregunta: ¿qué tan general o robusto es un modelo que no resuelve explícitamente toda la dinámica del sistema? Aun si se conociera la dinámica en escalas muy pequeñas, ¿sería posible describir con precisión el sistema en una escala más grande de resolución, usando solamente parámetros y variables de escala grande? Por ejemplo, si se conoce un campo de conductividad definido en



PAGINACIÓN DISCONTINUA

una cierta escala de resolución, ¿es posible construir un modelo en una escala de resolución más grande, tal que el flujo verdadero se modele correctamente? ¿Es posible construir un modelo de escala grande en aquellos casos donde el campo de conductividades es incierto?

Con estas motivaciones, en esta tesis se abordan las siguientes preguntas:

¿Cuál es la influencia de la heterogeneidad de las escalas pequeñas en la dinámica de las escalas grandes?

¿Es posible construir un modelo de dinámica en escala grande, sin una representación explícita de la dinámica de la escala pequeña?

1.2. Antecedentes

Se han utilizado muchos métodos para tratar de modelar el flujo y el transporte en escalas grandes, tanto en medios porosos como a superficie libre. A continuación se presentan los más importantes.

1.2.1. Flujo y transporte en medios porosos

1.2.1.1. Método de la conductividad efectiva

Este es uno de los métodos más utilizados. Se basa en la suposición implícita de que la dinámica de las escalas grandes se puede describir por una ley de Darcy local. Esta suposición se puede justificar rigurosamente (usando la teoría de escalas múltiples, Keller, 1980), sólo si existe una separación de la dinámica de las escalas grandes y las pequeñas (Beckie *et al.*, 1994). Aun cuando existiera tal separación en un rango particular de escalas, éstas deberán ser compatibles con la escala de los bloques de la malla. Lo más probable es que los datos o los recursos computacionales definan el tamaño de los bloques de la malla, y éste no corresponderá al rango donde las escalas pequeñas y las grandes están separadas. Por ejemplo, si la conductividad hidráulica tiene un espectro de energía muy amplio,

lo que indica que muchas escalas son significantes, no existe una separación de escalas.

Beckie *et al.* (1994) demostraron que una ley de Darcy local, parametrizada con una conductividad hidráulica efectiva, no puede reproducir la dinámica del flujo de escala grande cuando la conductividad de las escalas pequeñas tiene un espectro muy amplio. Sus resultados indican que el cálculo del espectro de energía del flujo, usando conductividades efectivas, se atenúa significativamente en escalas cercanas al tamaño de los bloques de la malla. Sus resultados indican que el efecto de las heterogeneidades con escalas cercanas al tamaño del bloque de la malla no se representa adecuadamente por una conductividad hidráulica efectiva. Sin embargo, si el espectro que corresponde a las escalas grandes y el que corresponde a las escalas pequeñas están separados, entonces una conductividad efectiva es un modelo adecuado.

1.2.1.2. Métodos estocásticos

Estos usan métodos estadísticos para definir las variables de escala grande, y esencialmente lo que se hace es separar las variables en valores esperados (promedio de ensamble) y fluctuaciones (Gelhar, *et al.*, 1983):

$$A(x) = \langle A \rangle(x) + A'(x) \quad (1)$$

donde $\langle \bullet \rangle$ representa el valor esperado, $(\bullet)'$ la fluctuación y x el vector de posición.

El problema es que solamente bajo la hipótesis ergódica, el valor esperado es igual a las variables de escala grandes. Un proceso es ergódico si su valor esperado se puede reemplazar por promedios en el espacio o en el tiempo. Para el caso de una pluma de un soluto, ésta es ergódica solamente si su escala transversal es grande comparada con las escalas de heterogeneidad.

Pero cómo lo ha expresado Dagan (1994), esta condición no se cumple en muchos casos de interés práctico.

En 1995, Fitts publicó la simulación del transporte de bromuro en los acuíferos Cape Code, Massachusetts y Borden, Ontario. Para simular el transporte se utilizaron teorías estocásticas. Los resultados de las simulaciones difieren notablemente de las mediciones de campo. Se encontró que el problema es que no se cumple la condición de ergodicidad. Según este investigador, para que esta condición se cumpla la pluma de bromuro debe expandirse sobre un número muy grande de heterogeneidades, en todas las direcciones. Sin embargo, la pluma presentó dimensiones laterales muy pequeñas.

1.2.2. Flujo a superficie libre

1.2.2.1 Filtrado espacial

Este método se basa en la estrategia desarrollada para simular remolinos grandes (LES, por sus siglas en inglés) por parte de los especialistas en turbulencia (Leonard, 1974). Los investigadores que trabajan en esta área reconocen que no es posible modelar todas las escalas involucradas en un flujo turbulento, por lo que se han limitado a modelar solamente las escalas grandes.

En esencia, en este método las variables de los modelos se expresan en términos de dos componentes: uno a escala pequeña y otro a escala grande. Por medio de un filtrado espacial, se remueven las escalas pequeñas en una forma similar a como se filtran de una señal eléctrica las frecuencias altas (escalas pequeñas). Los efectos de las escalas pequeñas no se desprecian, sino que son tomados en cuenta por el modelo de gran escala filtrado.

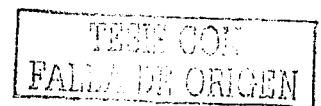
1.3. Aportaciones de la tesis

La primera consiste en el desarrollo de una herramienta para analizar sistemas físicos con múltiples escalas. Se espera que esta herramienta sea muy útil para el análisis y solución de problemas de flujo y transporte en medios porosos, dado que el carácter altamente fluctuante de las propiedades del suelo, y la no linealidad de los términos advectivos, producen una gran interacción de escalas.

Con estos modelos no solamente se podrán analizar el flujo y transporte en medios porosos, sino también muchos otros procesos que exhiben una significativa variabilidad temporal y espacial. Ejemplo de tales fenómenos son los flujos turbulentos y los procesos de evapotranspiración.

Las ecuaciones del modelo serán **completamente cerradas**. Hasta donde se tiene conocimiento, todos los modelos que se han desarrollado necesitan términos de cerradura que por lo general son empíricos.

La segunda aportación de esta tesis es la aplicación de la técnica de LES al flujo y transporte en medios porosos. A excepción de Aldama *et al.* (1996), esta técnica solamente se ha aplicado en flujos a superficie libre.



CAPÍTULO 2

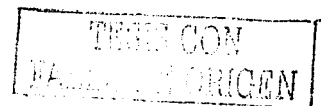
ECUACIONES DEL FLUJO EN MEDIOS POROSOS ESPACIALMENTE FILTRADAS: TEORÍA

2.1. Introducción

Como se mencionó anteriormente, uno de los tópicos que se abordan en este trabajo es la posibilidad de construir un modelo de dinámica en escala grande, sin una representación explícita de la dinámica de la escala pequeña.

La respuesta es que sí es posible. Lo que se requiere es una representación de los efectos de la dinámica de la escala pequeña en la dinámica de las escalas grandes. Por ejemplo, no se necesita caracterizar la geometría exacta de los poros para resolver un problema de flujo en una escala de cientos de metros. Solamente se requiere el efecto de los poros en el flujo.

El proceso de transformar una ecuación que tiene todas las escalas significantes en una ecuación que gobierna el comportamiento de las escalas grandes, es comúnmente conocido como *escalamiento (scaling-up)*. Las ecuaciones escaladas no deberían contener la dinámica de las escalas pequeñas explícitamente, sino solamente el efecto que las escalas pequeñas producen en la dinámica de las escalas grandes. La naturaleza de los procesos del flujo y el transporte implica que cuando se intenta determinar este efecto surge un problema de cerradura. Empleando una metodología basada en el uso de filtros espaciales, similar a la que se usa en las simulaciones de turbulencia (Aldama, 1990), en este capítulo se presenta el desarrollo de las ecuaciones que describen la dinámica del flujo y el transporte en medios porosos en escala grande. El problema de cerradura se resuelve exactamente por medio de filtros de Butterworth, los cuales son ampliamente utilizados en el análisis de señales digitales (Stearns, 1975).



2.2. Ecuaciones de movimiento

Se supone que el agua está fluyendo en un medio poroso saturado con una matriz de suelo rígido. Por lo tanto, en ausencia de fuentes o sumideros, el principio de conservación de masa toma la forma de la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial Q_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

donde Q_i representa el vector de flujo y x_j la posición del vector. Si se supone que el flujo es Darciano en las escalas de interés, y el medio se supone isotrópico, se tiene la siguiente relación constitutiva:

$$Q_i = -K \frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (2.2)$$

donde $K = K(x_i)$ representa la conductividad hidráulica y H la carga del agua subterránea. La ecuación (2.2) es una expresión de la ley de Darcy.

Combinando las ecuaciones (2.1) y (2.2) se obtiene la conocida ecuación de flujo del agua subterránea:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (2.3)$$



2.3. Interacción de escalas

La interacción de las diferentes longitudes de escala presentes en el agua subterránea, se entiende mejor en el espacio de Fourier. Por lo tanto, se introducirá la transformada al espacio de Fourier de una función espacial, $F = F(x_j)$, definida de la siguiente manera:

$$F(k_j) = \int F(x_j) \exp(ik_j x_j) dx_j \quad (2.4)$$

donde la integral representa la integración sobre un dominio tridimensional no cerrado; k_j , número de onda, y $dx \equiv dx_1 dx_2 dx_3$. Si el dominio de interés es cerrado, se supone que F y todas las variables relevantes se extienden apropiadamente fuera del dominio.

La transformada de Fourier se puede considerar como la descomposición de una función en una suma de senos con diferentes longitudes de onda.

Tomando la transformada de Fourier de la ecuación (2.2) se obtiene:

$$\hat{Q}_j(k_j) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int \hat{K}(k_j - k'_j) k'_j \hat{H}(k'_j) dk'_j \quad (2.5)$$

Por lo tanto, todas las escalas (números de onda) presentes en K interactúan con todas las de H , para producir todas las escalas que están presentes en Q_j . Esta interacción es particularmente significativa cuando K posee un espectro muy ancho, i.e., cuando el campo de conductividad es muy heterogéneo.

Estas interacciones no lineales producen nuevas escalas. Como un ejemplo, considérese dos ondas senoidales con longitudes de onda $\lambda_1 = \frac{1}{w_1}$ y $\lambda_2 = \frac{1}{w_2}$.

Su producto es igual a

$$\text{sen}(xw_1)\text{sen}(xw_2) = \frac{1}{2}[\cos(x(w_1 - w_2)) - \cos(x(w_1 + w_2))] \quad (2.6)$$

Este producto es una función con dos longitudes de onda nuevas $\frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}$ y $\frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}$, que no se encuentran en los multiplicandos (figura 2.1).

Esta interacción de escalas es muy importante cuando se intenta construir un modelo que no resuelve todas las escalas. Supóngase que se desea construir un modelo que pueda resolver características de longitud de escala mayores que $\frac{1}{f_c}$. Se pueden descomponer las variables y los parámetros del modelo, en componentes mas grandes y mas pequeñas que esta escala de longitud. Por ejemplo, la función A se puede descomponer en componentes de escala grande $A^<$ y componentes de escala pequeña $A^>$,

$$A(x) = A^<(x) + A^>(x) \quad (2.7)$$

donde

$$A^>(f) = \begin{cases} A(f) & \text{si } f > f_c \\ 0 & \text{si } f \leq f_c \end{cases} \quad (2.8)$$

$$A^<(f) = \begin{cases} A(f) & \text{si } f \leq f_c \\ 0 & \text{si } f > f_c \end{cases} \quad (2.9)$$

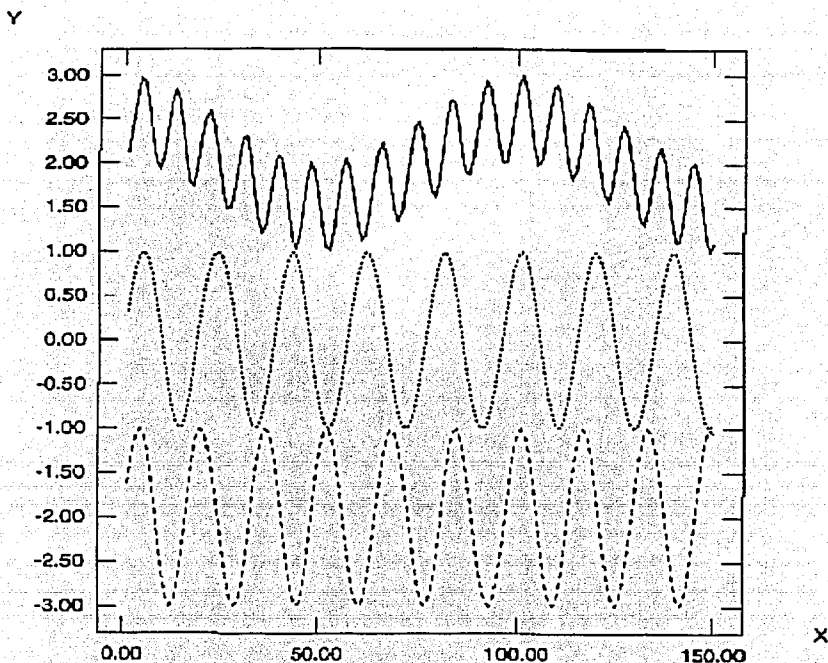


Figura 2.1. Las interacciones no lineales producen nuevas escalas. El producto de dos funciones senoidales (función superior) es una función con dos escalas de longitud que no se encuentran en los multiplicandos (funciones inferiores).

Para investigar cómo afectan las interacciones no lineales al escalamiento en el espacio real, supóngase el producto de las funciones A y B :

$$M(x) = A(x) B(x) \quad (2.10)$$

$$M(x) = (A^< + A^>)(x) (B^< + B^>)(x) \quad (2.11)$$

$$M(x) = A^<B^<(x) + A^<B^>(x) + A^>B^<(x) + A^>B^>(x) \quad (2.12)$$

$$M^<(x) = (A^<B^<)^<(x) + (A^<B^>)^<(x) + (A^>B^<)^<(x) + (A^>B^>)^<(x) \quad (2.13)$$

$$M^<(x) = \{1\} + \{2\} + \{3\} + \{4\} \quad (2.14)$$

El problema de escalamiento se puede ver como el determinar $M^<$ (las escalas grandes de M), sin el conocimiento de los detalles de $M^>$ (las escalas pequeñas de M). El producto M está compuesto de interacciones entre los componentes de A y B en diferentes escalas. En general, se espera que cada término del producto contribuya a las escalas grandes de M . Los términos de $\{1\}$ son las interacciones escalas grandes-escalas grandes (*eg-eg*), $\{2\}$ y $\{3\}$ son las interacciones escalas grandes-escalas pequeñas (*eg-ep*) (también llamados términos cruzados) y $\{4\}$ son las interacciones escalas pequeñas-escalas pequeñas (*ep-ep*).

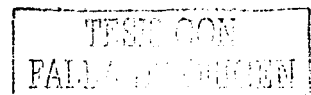
2.4. Método de filtrado espacial

En el marco de un método de filtrado espacial, las componentes *eg* de una variable $F = F(x_i)$ son definidas por la siguiente operación de convolución (Aldama 1990 y 1992):

$$F(x_i) = \int G(x_i - x'_i) F(x'_i) dx \quad (2.15)$$

donde G es una función de filtrado que posee las siguientes propiedades:

$$\int G(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad (2.16)$$



$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} D_x^\alpha G = 0 \quad \forall \alpha \quad (2.17)$$

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} D_k^\alpha \hat{G} = 0 \quad \forall \alpha \quad (2.18)$$

donde D_x^α y D_k^α representan operadores de derivadas dados por:

$$D_x^\alpha = \frac{\partial^{\Sigma \alpha}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \partial x_3^{\alpha_3}} \quad (2.19)$$

$$D_k^\alpha = \frac{\partial^{\Sigma \alpha}}{\partial k_1^{\alpha_1} \partial k_2^{\alpha_2} \partial k_3^{\alpha_3}} \quad (2.20)$$

$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ representa un multi-índice, α_1 , α_2 y α_3 son enteros y $\Sigma \alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$.

La propiedad (2.16) implica que G preserva la media y la propiedad (2.17) es necesaria para demostrar que la operación de filtrado conmuta con las derivadas espaciales de orden arbitrario. La implicación de la propiedad (2.18), así como la importancia de la operación de filtrado se comprende mejor en el espacio de Fourier.

Transformando la ecuación (2.15) se obtiene:

$$\hat{F}(k_i) = \hat{G}(k_i) \hat{F}(k_i) \quad (2.21)$$

La propiedad (2.18) implica, para $\alpha = 0$, que las componentes de número de onda altos de \hat{F} (componentes altamente fluctuantes) son eliminados (gradualmente si \hat{G} tiene una base abierta, o totalmente si \hat{G} tiene una base cerrada) a través de la operación de filtrado.

2.5. El problema de cerradura y localización

Filtrando la ley de Darcy (2.2) y la ecuación de flujo de agua subterránea (2.3), y tomando en cuenta el hecho de que la operación de filtrado conmuta con la derivadas espaciales, se obtiene:

$$Q_j = -K \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (2.23)$$

Expresando la conductividad, el flujo y la carga, en términos de sus componentes de escala grande y escala pequeña,

$$K = K + k \quad (2.24)$$

$$Q = Q + q \quad (2.25)$$

$$H = H + h \quad (2.26)$$

Substituyendo las expresiones (2.24)-(2.26) en las ecuaciones (2.22) y (2.23) resulta:

$$\begin{aligned} Q_j &= -K \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} \\ &= -K \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} - K \frac{\partial h}{\partial x_j} - k \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} - k \frac{\partial h}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} + K \frac{\partial h}{\partial x_j} + k \frac{\partial H}{\partial x_j} + k \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (2.28)$$

El primer término en la ecuación (2.27) representa la interacción *eg-eg*, el segundo y tercer términos la interacción *eg-ep*, y el cuarto la interacción *ep-ep*. El problema de cerradura se muestra claramente en la expresión (2.28), que representa la ecuación de agua subterránea escalada. Los términos de interacción *eg-ep* y *ep-ep* contienen variables de escala pequeña. Para cerrar la ecuación (2.28) es necesario expresar estos términos exclusivamente en términos de variables de escalas grandes. También es necesario que los términos de interacción *eg-eg* se expresen localmente, debido a que su naturaleza le da a la ecuación (2.28) un carácter integrodiferencial.

2.6. La metodología de filtrado espacial

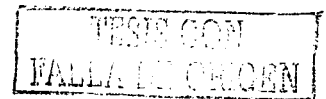
Aldama (1992) y Beckie *et al.* (1996a y 1996b) han empleado un filtro Gaussiano, el cual en el espacio de Fourier tiene la forma

$$\hat{G}(k_i) = \hat{G}_G(k) = \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{24}\right) \quad (2.29)$$

donde λ es el ancho de filtro y $k \equiv (k_i k_i)^{1/2}$. Una expansión en series de Taylor de \hat{G}_G resulta en:

$$\hat{G}(k_i) = \hat{G}_G(k) = 1 - \frac{\lambda^2 k^2}{24} + \frac{\lambda^4 k^4}{576} + O(\lambda^6) \quad (2.30)$$

Substituyendo (2.30) en (2.21), empleando el resultado de (2.27) y usando el teorema de diferenciación de Fourier, se obtiene la siguiente expresión (Aldama, 1992; Beckie *et al.*, 1996a):



$$Q_i = -K \frac{\partial H}{\partial x_j} = -K \frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial^2 H}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\lambda^4}{288} \frac{\partial^2 K}{\partial x_j \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_j \partial x_m \partial x_j} + O(\lambda^6) \quad (2.31)$$

Aplicando la expresión (2.31) a la ecuación (2.23) se obtiene la ecuación de flujo del agua subterránea de escala grande localizada:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial^2 H}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\lambda^4}{288} \frac{\partial^2 K}{\partial x_j \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_j \partial x_m \partial x_j} \right) + O(\lambda^6) \quad (2.32)$$

Mientras que el ancho de filtro, λ , sea mucho más pequeño que la escala de longitud dominante en las variables de *eg*, Λ , se esperaría que los términos de $O(\lambda^6)$ fueran despreciables en la ecuación (2.32). Por lo tanto, una vez que esos términos se han despreciado, se esperaría que la tasa de convergencia de la norma del error de la solución de la ecuación (2.32), H , fuera de orden sexto en λ . Es de notarse también que las ecuaciones de *eg* contienen derivadas de alto orden. De esta manera, se podría esperar que se necesitarían condiciones de frontera adicionales para resolver las ecuaciones. Sin embargo, Beckie *et al.* (1996b) aplicaron con éxito un método de perturbación regular que no requiere de condiciones de frontera adicionales.

Aunque Beckie *et al.* (1996b) obtuvieron resultados numéricos muy alentadores en la solución de las ecuaciones de escala grande del agua subterránea, para campos de conductividad muy heterogéneos no se obtuvo la tasa teórica de convergencia del error que se esperaba. Esto se atribuyó al hecho de que cuando la expansión (2.30) se trunca, lo cual es equivalente a despreciar términos

proporcionales a alguna potencia de λ en (2.32), la función del filtro Gaussiano se aproxima con una polinomial en el espacio de Fourier. Estas aproximaciones son muy buenas en números de onda bajos, pero se degradan significativamente en números de onda grandes. De hecho, por definición, el filtro Gaussiano es definitivamente positivo, mientras que las aproximaciones polinomiales que surgen de su expansión de Taylor no lo son. Aún más, estas aproximaciones no satisfacen la propiedad (2.18), dado que su magnitud no tiene un límite para $k \rightarrow \infty$. Estas observaciones llevaron a buscar alternativas para la aproximación polinomial al filtro Gaussiano, que dieran una mejor solución al problema de cerradura y localización.

2.7. La metodología de filtrado de Butterworth

La principal ventaja de aplicar una aproximación polinomial al filtro Gaussiano es que cuando se substituye en la operación de filtrado en el espacio de Fourier, la variable de eg, \hat{F} , se expresa como el producto de un polinomio de grado par en k por la variable primitiva \hat{F} . Esto permite el uso del teorema de diferenciación de Fourier cuando se invierte tal expresión. De esta manera, un término que involucra una potencia par en k multiplicado por \hat{F} se convierte, después de invertirlo, en una potencia par del operador ∇ aplicado a F . De esta manera, un método basado en una substitución iterada permite la derivación de expresiones como la (2.31) y (2.32). Sin embargo, como se señaló antes, la falta de las propiedades definido-positivo y un decaimiento en el infinito en las aproximaciones polinomiales del filtro Gaussiano, motivaba a encontrar un filtro alternativo que preservara las ventajas del filtro anterior, pero que no tuviera sus desventajas.

Los filtros que se proponen en este trabajo son los de Butterworth, los cuales están definidos por la siguiente expresión en el espacio de Fourier:

$$\hat{G}_{B,N}(k) = [1 + \eta_N^2 (k/k_c)^{2N}]^{-1} \quad (2.33)$$

donde N es un entero que representa el orden del filtro; k_c , un número de onda de corte y η_N es un parámetro relacionado a la tasa de decaimiento del filtro, en el que $k > k_c \Rightarrow \hat{G}_{B,N}(k) < 1/(1 + \eta_N^2)$. Como se puede observar en (2.33), $\hat{G}_{B,N}$ es positivo definido. También se puede demostrar que entre más alto es el valor de N , $\hat{G}_{B,N}$ se aproxima más y más aun filtro ideal de paso bajo. Finalmente, $\hat{G}_{B,N}$ también satisface las propiedades (2.17)-(2.18).

Hasta el momento se ha investigado el uso del miembro más simple de la familia de Butterworth, i.e., el filtro de orden uno correspondiente a $N=1$. Así mismo, se escogieron los siguientes parámetros de los filtros:

$$\left(\begin{array}{c} \eta_1 \\ k_c \end{array} \right)^2 = \frac{\lambda^2}{24} \quad (2.34)$$

De esta manera, substituyendo (2.34) en (2.33), con $N=1$, se obtiene la siguiente expresión para la función del filtro a ser aplicada de aquí en adelante (Figura A.7):

$$\hat{G}(\bar{k}_r) = \hat{G}_{B,1}(\bar{k}_r) = \frac{1}{1 + \lambda^2 k^2 / 24} \quad (2.35)$$

La razón para elegir la opción (2.34) es que la expresión que resulta para el filtro, (2.35), se puede ver como la aproximación de Padé (0,2) al filtro Gaussiano (2.29).

Substituyendo la expresión (2.35) en la ecuación (2.21), y resolviendo para \hat{F} resulta :

$$\hat{F} = \hat{F} + \frac{\lambda^2 k^2}{24} \hat{F} \quad (2.36)$$

Invirtiendo (2.37) se obtiene:

$$F = F - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_i} \quad (2.37)$$

Como se puede observar, el uso de un filtro de Butterworth permite derivar un resultado más manejable que el que se obtiene aplicando el filtro Gaussiano. En efecto, (2.37) expresa una variable primitiva en términos de la variable eg y su Laplaciano.

Empleando (2.37) para la conductividad hidráulica y el gradiente de la carga, se tiene:

$$K = K - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_i} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{\partial H}{\partial x_i} - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^3 H}{\partial x_i \partial x_i \partial x_i} \quad (2.39)$$

Substituyendo (2.38) y (2.39) en (2.22), resulta:

$$Q_i = \left(K - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_i} \right) \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^3 H}{\partial x_i \partial x_i \partial x_i} \right) \quad (2.40)$$

Substituyendo ahora (2.40) en la ecuación de continuidad eg , $\partial Q_i / \partial x_i = 0$, se produce:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(K - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^2 K}{\partial x_l \partial x_l} \right) \left(\frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\lambda^2}{24} \frac{\partial^3 H}{\partial x_l \partial x_l \partial x_j} \right) \right] = 0 \quad (2.41)$$

La expresión (2.41) representa la ecuación del flujo del agua subterránea de *eg*, la cual se ha cerrado *exactamente*. Sin embargo, (2.41) no es local, dado que el subrayado representa la operación de convolución; por lo tanto, esta posee un carácter integrodiferencial.

La ecuación (2.37) se puede resolver para \bar{F} , expresándola como la suma de F y un residuo de $O(\lambda^2)$. Con base en esta observación, se puede realizar el producto en (2.40) y (2.41), y los cuatro términos filtrados que resultan se pueden expresar en términos de su contraparte no filtrada más un residuo de $O(\lambda^2)$. La operación se puede repetir una y otra vez, definiendo un procedimiento de sustitución iterada. Su aplicación a (2.40) y (2.41) resulta respectivamente en las siguientes ecuaciones del agua subterránea y ley de Darcy *localizadas, cerradas y exactas*:

$$\begin{aligned} Q_i &= -K \frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_l} \frac{\partial^2 H}{\partial x_l \partial x_j} \\ &- \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^3 K}{\partial x_l \partial x_l \partial x_l} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_m} - \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 K}{\partial x_l \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_l \partial x_m \partial x_j} \\ &+ \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 K}{\partial x_l \partial x_l \partial x_m} \frac{\partial^2 H}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial K}{\partial x_l} \frac{\partial^4 H}{\partial x_l \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \\ &+ \frac{\lambda^6}{13824} \left[\frac{\partial^6}{\partial x_l \partial x_l \partial x_m \partial x_m \partial x_n \partial x_n} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \right. \\ &\left. + \frac{\partial^4}{\partial x_l \partial x_l \partial x_m \partial x_m} \left(\frac{\partial^2 K}{\partial x_n \partial x_n} \frac{\partial H}{\partial x_j} + K \frac{\partial^3 H}{\partial x_n \partial x_n \partial x_j} \right) \right] \end{aligned}$$

$$+ \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{\partial^2 K}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_n \partial x_n \partial x_i} \right) \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ K \frac{\partial H}{\partial x_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_m} \frac{\partial^2 H}{\partial x_m \partial x_j} \right. \\ & + \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 K}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} + \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 K}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_i} \\ & + \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 K}{\partial x_m \partial x_m \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial K}{\partial x_m} \frac{\partial^4 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \\ & + 13824 \left[\frac{\partial^6}{\partial x_m \partial x_m \partial x_m \partial x_m \partial x_m \partial x_m} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \right. \\ & + \frac{\partial^4}{\partial x_m \partial x_m \partial x_m \partial x_m} \left(\frac{\partial^2 K}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial H}{\partial x_j} + K \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \\ & \left. \left. + \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x_m} \left(\frac{\partial^2 K}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \right] \right\} = 0 \quad (2.43) \end{aligned}$$

CAPÍTULO 3

ECUACIONES DEL FLUJO DEL AGUA SUBTERRÁNEA FILTRADAS ESPACIALMENTE: ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN Y EXPERIMENTOS NÚMERICOS

3.1. *Introducción*

En este capítulo se realizan las evaluaciones numéricas de las aproximaciones que se desarrollaron en el capítulo anterior. Se investiga la tasa de convergencia asintótica de las aproximaciones, en un pequeño parámetro que caracteriza las escalas significantes del problema. Se examina además la precisión de las expansiones, usando variables filtradas exactas que se conocen a priori. También se resuelven directamente las ecuaciones del flujo en escala grande y se compara la solución con las variables exactas de escala grande. Se examina asimismo la estrategia de solución de las ecuaciones de escala grande, la cual trata a los términos de orden alto como correcciones a la ley de Darcy convencional. Se resuelven las ecuaciones de escala grande usando una metodología de perturbaciones regulares.

Para la prueba a priori primero se genera un campo de conductividades primitivo. Luego se calculan el flujo y el gradiente de la carga primitiva resolviendo la ecuación de flujo. Luego se filtra el gradiente de la carga. Las variables filtradas se consideran exactas, porque se calcularon a partir de las variables primitivas por medio de un filtrado directo. Luego se usan estas variables filtradas "exactas" para construir las expansiones de flujo de escala grande. Después se compara, en cada punto en el espacio, el flujo de escala grande exacto con el flujo que se calculó usando las expansiones asintóticas. Las pruebas a priori se realizaron en dos dimensiones.

En contraste, en la prueba a posteriori se resuelven las ecuaciones de escala grande directamente, dando únicamente como dato el campo de conductividad de escala grande. Cuando se aplique la teoría a la práctica, las ecuaciones se utilizarán en un sentido a posteriori.

3.2. Ley de Darcy filtrada

Las expansiones de la ley de Darcy en escala grande se pueden trincar al orden cero, uno y dos en λ^2 .

Orden Cero:

$$Q_j = -K \frac{\partial H}{\partial x_j} \quad (3.1)$$

Orden Uno:

$$Q_j = -K \frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.2)$$

Orden dos:

$$\begin{aligned} Q_j = & -K \frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \\ & - \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} - \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_i \partial x_m \partial x_j} \\ & + \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 K}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 H}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^4 H}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (3.3)$$

3.3. Prueba a priori

El objetivo de la prueba a priori es investigar la precisión de las aproximaciones que se presentaron en el capítulo anterior. Estas expansiones deberían ser asintóticas en potencias pares de un parámetro pequeño ε , definido como la relación del ancho de filtro a la escala de longitud dominante: $\varepsilon = \lambda / \Lambda$.

La prueba a priori consta de los siguientes pasos:

1. Se genera un campo de conductividad hidráulico primitivo altamente heterogéneo.
2. Se resuelve la ecuación de flujo primitiva, a fin de obtener cargas y flujos primitivos.
3. Se filtran numéricamente el gradiente de la carga, el flujo y el campo de conductividad hidráulico. El flujo filtrado se considera exacto, ya que se calculó filtrando directamente el flujo primitivo.
4. Utilizando los valores del gradiente de la carga y de la conductividad hidráulica filtrados, se calcula el flujo utilizando las aproximaciones de la ley de Darcy (3.1-3.3).
5. Se compara el flujo exacto del inciso 3, con el flujo aproximado que se obtiene en el inciso 4.

3.3.1. Filtrado numérico

Filtrando directamente los campos primitivos se obtienen los campos filtrados exactos. Para filtrar los campos se utiliza un filtro de Butterworth, el cual se define por la ecuación (2.35). Primero se transforman los campos del espacio físico al espacio de Fourier, utilizando un algoritmo de Transformada rápida de Fourier (FFT). Por el teorema de la convolución, la integración que define la operación de filtrado espacial en el espacio físico se realiza en el espacio de Fourier, multiplicando la transformada de Fourier de los campos por la transformada de Fourier del filtro (Bracewell, 1965). Para transformar los campos filtrados del espacio de Fourier al espacio real, se usa un algoritmo de Transformada rápida de Fourier Inversa. En el espacio físico, el filtrado es un promedio de ventana móvil.

El algoritmo de la Transformada de Fourier Discreta impone periodicidad en los datos, de tal forma que cuando se filtra en el dominio de Fourier, los puntos que se localizan en el rango 2λ de la frontera están contaminados con datos de la frontera opuesta. Este efecto se puede evitar agregando ceros en los extremos, de modo que los puntos fronterizos estén contaminados solamente con ceros.

Los campos de conductividad hidráulica que se generaron son periódicos, por lo cual no presentan este efecto de contaminación. Sin embargo, los campos de flujos y cargas simulados no son periódicos. Por lo tanto, los flujos y cargas exactos que se calcularon filtrando los resultados de las simulaciones primitivas están contaminados a lo largo de la frontera. Debido a esto, cuando se comparan los resultados exactos y las aproximaciones se toma solamente la porción del dominio que no está contaminada.

Los filtros de Butterworth, en los cuales están basadas las expansiones de escala grande, preservan la media espacialmente. Por lo tanto, el flujo total promediado espacialmente en el campo primitivo es igual al flujo total promediado espacialmente en el campo filtrado.

3.3.2. Evaluación del error

Para determinar el error en la aproximación bidimensional, se utiliza una norma L^2 normalizada:

$$\|E_{\bar{Q}_\ell}\|_2 = \left[\frac{\sum_{x,y \in \Omega} (\bar{Q}_{ar} - \bar{Q}_{er})^2}{\sum_{x,y \in \Omega} (\bar{Q}_{er})^2} \right]^{1/2} \quad (3.4)$$

donde Ω es un subdominio el cual no está sujeto a contaminación de las fronteras y está contenido en el dominio primitivo original. $E_{\bar{Q}_\ell}$ es el error del ℓ componente del flujo, \bar{Q}_{ar} es el flujo aproximado y \bar{Q}_{er} es el flujo exacto que se calcula filtrando espacialmente la solución del flujo primitivo.

3.3.3. Aproximaciones discretas

Para resolver numéricamente las ecuaciones (3.1) – (3.3) se utilizó diferencias finitas. Por ejemplo, en una dimensión, las aproximaciones de orden cero y uno son,

$$\bar{Q}_j = -K_j \bar{G}_j \quad (3.5)$$

$$\bar{Q}_j = -\bar{K}_j \bar{G}_j - \frac{\lambda^2}{12} \frac{\bar{K}_{j+1} - \bar{K}_{j-1}}{2\Delta x} \frac{\bar{G}_{j+1} - \bar{G}_{j-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (3.6)$$

donde j es el índice del nodo, $\bar{K}_j = \bar{K}(x_j)$ y \bar{G}_j es el gradiente de la carga en el nodo j .

3.3.4. Simulaciones

Para las simulaciones del flujo se utilizó un dominio cuadrado de 512×512 bloques. Las condiciones de frontera fueron de no flujo en dos lados opuestos y de carga constante en los otros dos lados (figura 3.1).

En la figura 3.2 se muestra la conductividad hidráulica. Como se puede apreciar, el campo tiene muchas escalas de variabilidad.

La escala de longitud dominante Λ , del campo de conductividad hidráulico, se determina a partir del espectro de energía. Esta escala se estima como la escala de longitud asociada con la frecuencia más alta del espectro de energía que está en un máximo. De tal modo, si el espectro de energía es máximo en varias frecuencias, Λ se determina a partir de la frecuencia más alta (que corresponde a la escala más pequeña). A partir de la figura 3.3 se estimó que $\Lambda \approx 100\Delta x$.

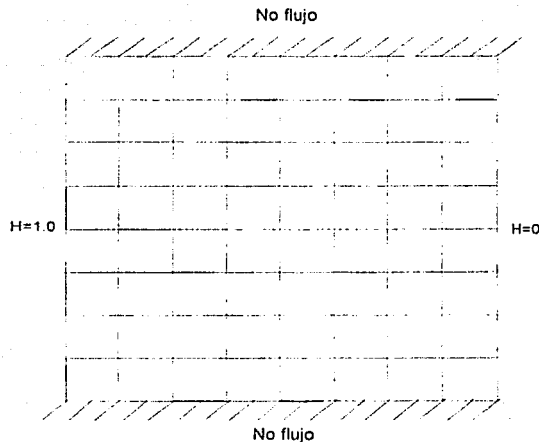


Figura 3.1. Dominio bidimensional de $512\Delta x \times 512\Delta y$, con condiciones de frontera de carga constante en dos lados y de no flujo en los otros dos.

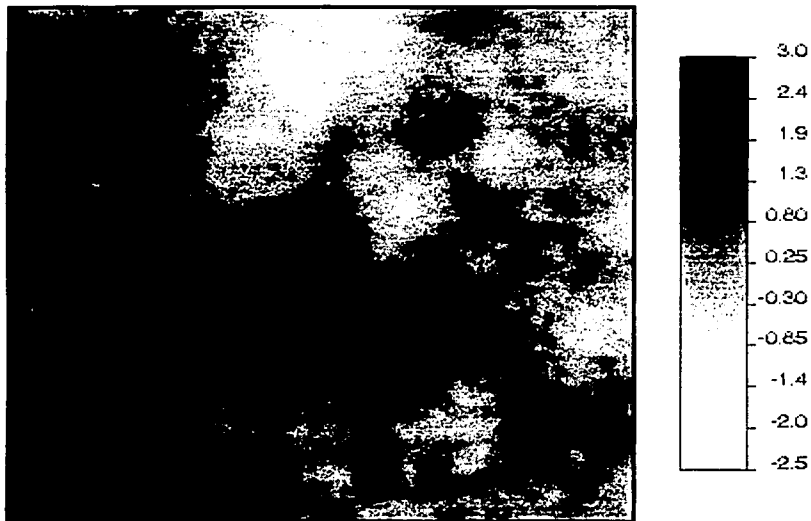


Figura 3.2 Campo de conductividad $\text{Log}_{10} K$, $\sigma_{\ln K}^2 = 6.3$, $\Lambda \approx 100$.

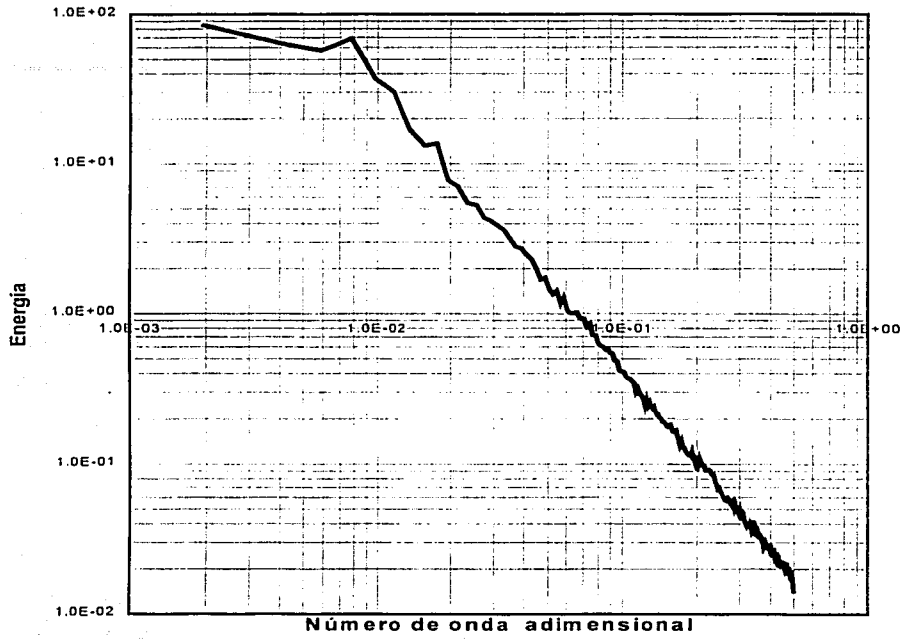
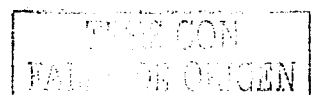


Figura 3.3. Espectro de energía del campo de conductividades primitivo.

La ecuación del agua subterránea primitiva se resolvió usando el campo de conductividad mostrado en la figura 3.2. El flujo primitivo se filtró con un ancho de filtro $\lambda = 20\Delta x$. La Figura 3.4 presenta un corte del flujo primitivo y filtrado.

Las ecuaciones 3.1-3.3 se emplearon como la base de la prueba a priori. Usando los valores exactos del campo de escala grande, \bar{K} y \bar{H} , se calcularon varias aproximaciones a \bar{Q}_x . Una aproximación de orden cero se obtuvo despreciando términos de orden $O(\lambda^2)$ y más altos; una aproximación de orden uno, despreciando términos de orden $O(\lambda^4)$ y más altos, y una aproximación que desprecia términos de orden $O(\lambda^6)$. La figura 3.5 muestra la comparación de un corte del valor exacto contra el valor aproximado de orden cero. Como se puede observar, las dos soluciones difieren significativamente en algunas partes del dominio. Por otra parte la Figura 3.7 muestra la comparación de un corte del valor exacto contra el valor aproximado de orden dos. En este caso, la concordancia entre la solución exacta y la aproximación es excelente.

La norma del error ℓ_2 , definida como la diferencia entre la solución aproximada y la exacta, se obtuvo para diferentes valores de λ . La tasa de convergencia calculada se muestra en la figura 3.8. Las pendientes de estas líneas confirman la tasa de convergencia teórica de las aproximaciones, esto es, los errores son proporcionales a ε^2 , ε^4 , y ε^6 , para las aproximaciones de orden cero, uno y dos, respectivamente.



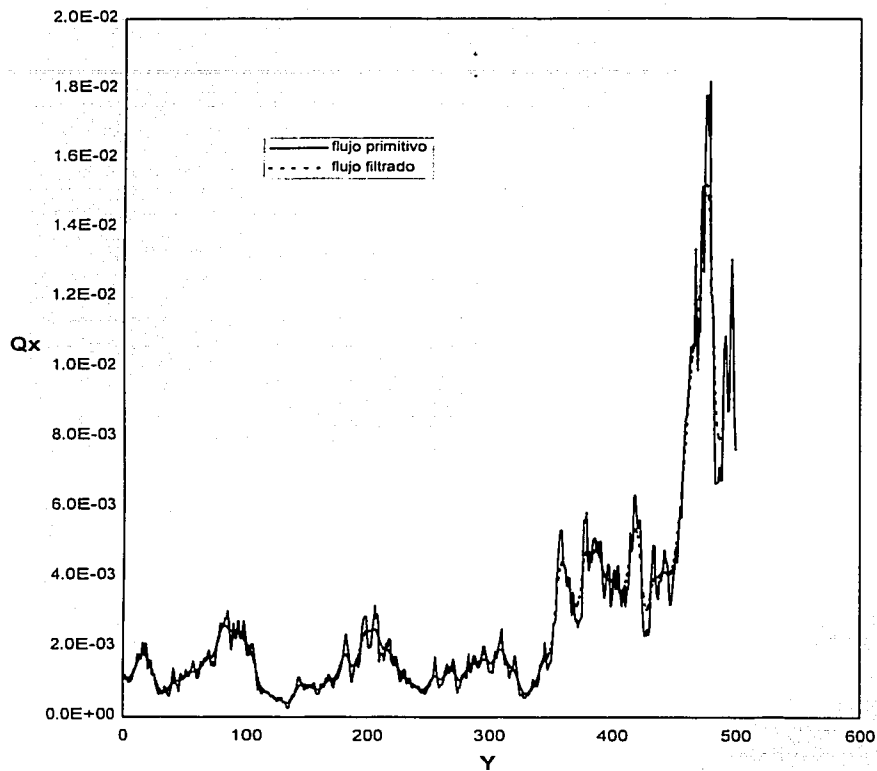


Figura 3.4. Flujo primitivo y exacto filtrado a lo largo de $x = 110$. El ancho de filtro es $\lambda = 20\Delta x$.

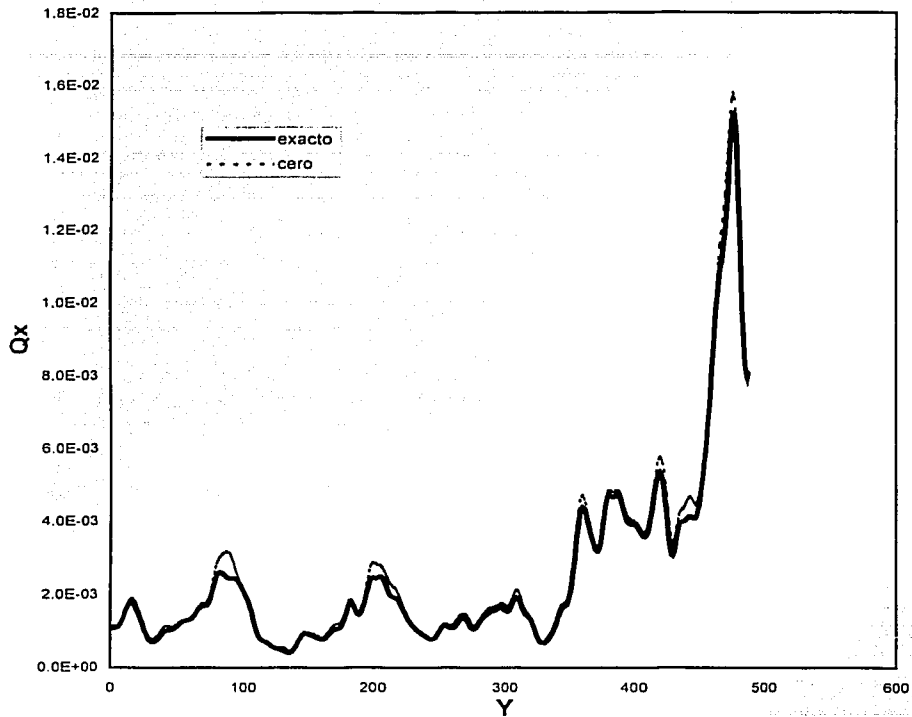


Figura 3.5. Flujo exacto y flujo filtrado aproximado de orden cero $\bar{Q}_x(110, y)$, $\lambda = 20\Delta x$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

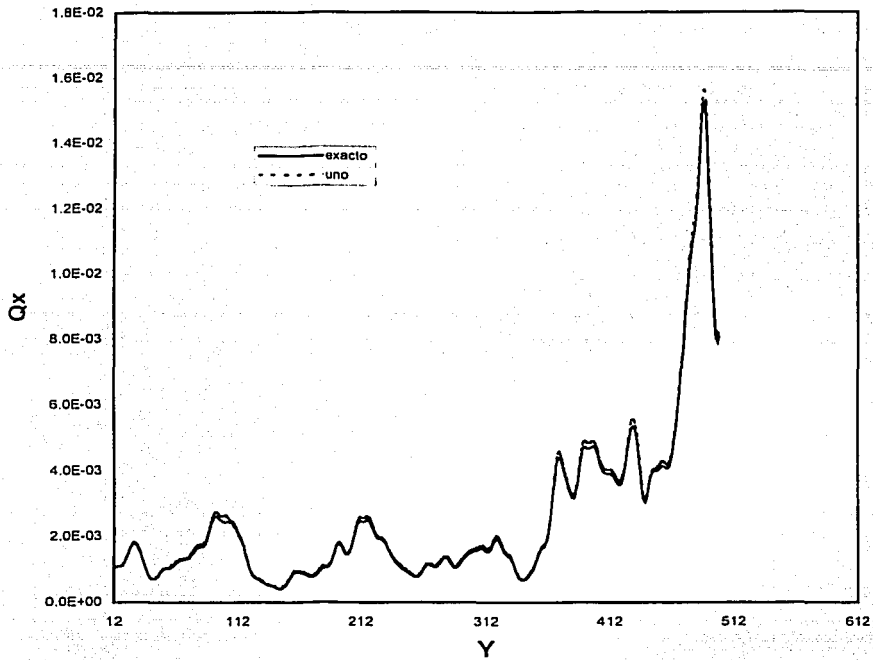


Figura 3.6. Flujo exacto y flujo filtrado aproximado de orden uno $Q_x(110, y)$, $\lambda = 20\Delta x$.

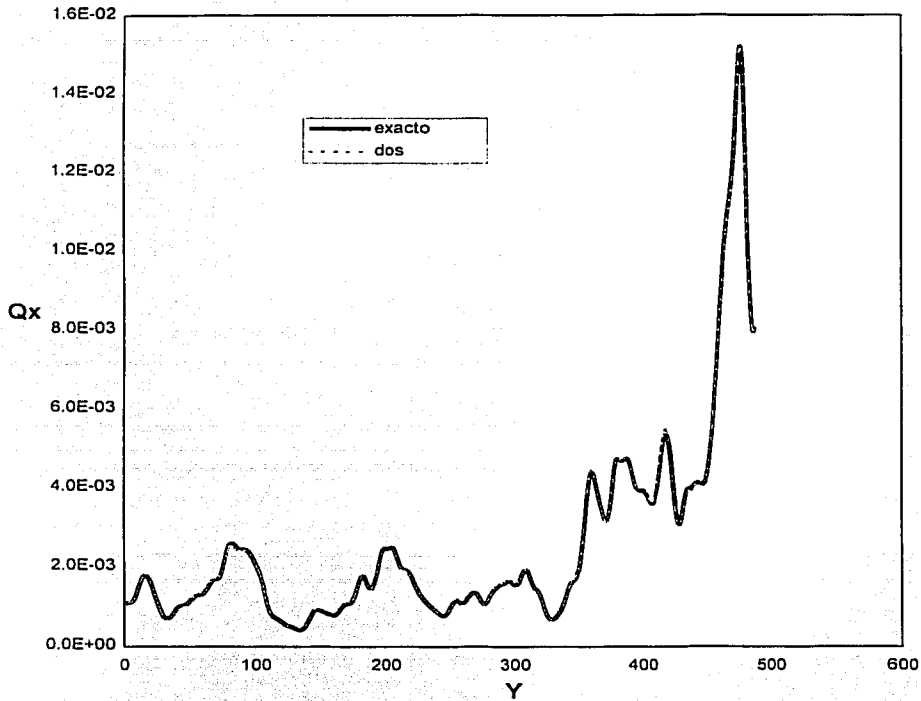


Figura 3.7. Flujo exacto y flujo filtrado aproximado de orden dos $\bar{Q}_x(110, y)$, $\lambda = 20\Delta x$.

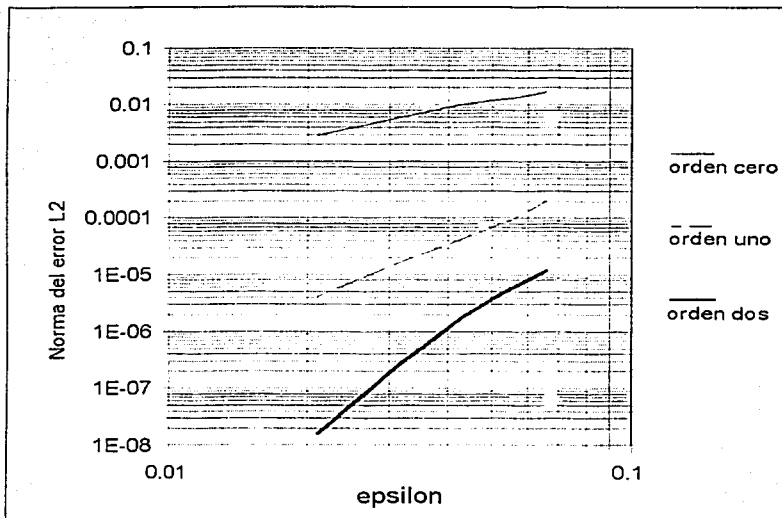


Figura 3.8. Tasa de convergencia calculada de la norma del error ℓ_2 , para las aproximaciones de orden cero, uno y dos.

3.4. Ecuaciones de flujo filtradas

Ecuación de continuidad filtrada espacialmente:

$$\nabla \cdot q = 0 \quad (3.7)$$

Combinando la ecuación de continuidad filtrada con la ley de Darcy filtrada se obtiene la ecuación de flujo filtrada.

La aproximación de orden cero es:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (3.8)$$

Aproximación de orden uno:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial H}{\partial x_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right) = 0 \quad (3.9)$$

Aproximación de orden dos:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ K \frac{\partial H}{\partial x_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right. \\ & + \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^3 H}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} + \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 K}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^3 H}{\partial x_i \partial x_m \partial x_j} \\ & \left. + \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 K}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 H}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial K}{\partial x_i} \frac{\partial^4 H}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Estas ecuaciones requieren estrategias de solución no convencional, debido a que contienen derivadas de orden alto.

Para evaluar la importancia relativa de los términos de la ecuación de flujo de escala grande, se reescriben las ecuaciones en forma adimensional, con los siguientes parámetros de escalamiento (por simplicidad se presenta el análisis en una dimensión):

$$x^* = \frac{x}{\Lambda} \quad (3.11)$$

$$K^*(x) = \frac{K(x)}{K_0} \quad (3.12)$$

$$H^*(x) = \frac{H(x)}{\Delta H_h} \quad (3.13)$$

$$H_0^* = \frac{H_0}{\Delta H_h} \quad (3.14)$$

$$H_1^* = \frac{H_1}{\Delta H_h} \quad (3.15)$$

donde Λ es una escala de longitud característica; K_0 una conductividad característica; H_0 y H_1 son condiciones de frontera, y $\Delta H_h = |H_0 - H_1|$.

Definiendo también un pequeño parámetro ε como la relación del ancho de filtro a la escala de longitud característica Λ , $\varepsilon = \lambda / \Lambda$. El parámetro ε aparece en la solución numérica del flujo. Escalando la ecuación de flujo filtrada con ((3.11)-(3.15)), las ecuaciones de orden cero, uno y dos, se transforman en

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{K} \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{K} \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon^2}{12} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial x_i \partial x_j} \right) = 0 \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{K} \frac{\partial \bar{H}}{\partial x_j} + \frac{\varepsilon^2}{12} \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial x_i \partial x_j} \right. \\ & + \frac{\varepsilon^4}{576} \frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^3 \bar{H}}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} + \frac{\varepsilon^4}{144} \frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^3 \bar{H}}{\partial x_i \partial x_m \partial x_j} \\ & \left. + \frac{\varepsilon^4}{288} \left(\frac{\partial^3 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^4 \bar{H}}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Cuando el ancho del filtro es pequeño en relación con la escala de longitud característica Λ , se tiene que $\delta \ll 1$. Las ecuaciones cuyas derivadas de alto orden son escaladas por un pequeño parámetro, se les conoce como singularmente perturbadas (Bender y Orszag, 1978). Por ello, la ecuación del flujo de escala grande asemeja una ecuación singularmente perturbada.

Es común que la solución de las ecuaciones singularmente perturbadas sean inestables. Por lo tanto, son difíciles de obtener aun numéricamente (Kaper y Garbey, 1993). Sin embargo, el sistema filtrado debería ser más suave y más estable que el primitivo. Cualquier descripción matemática del sistema debería mantener esta propiedad, por lo cual se supone que los términos de orden alto (3.17 y 3.18) son correcciones pasivas a la aproximación de orden cero (3.16). Son pasivas, en el sentido que no afectan la estabilidad del sistema. El método numérico que se utilizó está basado en esta suposición.

3.5. Prueba a posteriori: Solución de las ecuaciones del agua subterránea en escala grande

La ecuación de escala grande del agua subterránea (2.43) involucra derivadas de alto orden, lo que implica condiciones de frontera adicionales. Para evitar estas nuevas condiciones de frontera, se empleó la estrategia de perturbaciones propuesta por Beckie et al. (1996b) y Aldama et al. (1998).

Se supondrá que la carga de escala grande, \bar{H} , se puede expandir en una serie de perturbaciones como sigue:

$$\bar{H}(x_i) = \bar{H}_0(x_i) + \varepsilon^2 \bar{H}_1(x_i) + \varepsilon^4 \bar{H}_2(x_i) + O(\varepsilon^6) \quad (3.19)$$

donde \bar{H}_0 , $\bar{H}_0 + \varepsilon^2 \bar{H}_1$ y $\bar{H}_0 + \varepsilon^2 \bar{H}_1 + \varepsilon^4 \bar{H}_2$ representan respectivamente la solución aproximada de orden cero, uno y dos, a la ecuación de agua subterránea de escala grande, y

$$\varepsilon^2 = \left(\frac{\lambda}{\Lambda} \right)^2 \quad (3.20)$$

con Λ representando la escala de longitud dominante de las variables de escala grande. Se supone que $\varepsilon \ll 1$.

Sustituyendo (3.19) en (3.16 – 3.18), se obtienen las siguientes ecuaciones para la solución del orden cero, \bar{H}_0 , corrección de orden uno, \bar{H}_1 , y corrección de orden dos, \bar{H}_2 :

Orden cero:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial H_0}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (3.21)$$

Orden uno:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{K} \frac{\partial H_1}{\partial x_j} \right) = - \frac{1}{12} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H_0}{\partial x_i \partial x_j} \right) \quad (3.22)$$

Orden dos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{K} \frac{\partial H_2}{\partial x_j} \right) = & - \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ + \frac{1}{12} \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_i \partial x_j} \right. \\ & + \frac{1}{576} \frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^3 H_0}{\partial x_m \partial x_m \partial x_j} + \frac{1}{144} \frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^3 H_0}{\partial x_i \partial x_m \partial x_j} \\ & \left. + \frac{1}{288} \left(\frac{\partial^3 \bar{K}}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 H_0}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_i} \frac{\partial^4 H_0}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m \partial x_j} \right) \right\} \quad (3.23) \end{aligned}$$

Como se puede apreciar, las ecuaciones (3.22) y (3.23) son forzadas por un término no homogéneo que contiene las soluciones de orden más bajo. Este término no homogéneo se conoce si las ecuaciones se resuelven en forma secuencial. La ventaja de este método es que sólo se tiene que resolver la ecuación de flujo estándar. Los términos de la perturbación entran como una función explícita en el lado derecho.

En vista de la naturaleza de la serie de perturbaciones de (3.19), la solución de orden cero, H_0 , satisface las mismas condiciones de frontera de Dirchlet que H ,

y las sucesivas correcciones, H_1, H_2, \dots versiones homogéneas de la misma condición de frontera.

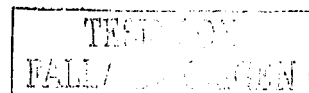
Se utilizó diferencias finitas para resolver las ecuaciones (3.21) – (3.23).

3.5.1. Resultados

En la figura 3.9 se muestran el flujo filtrado exacto y el aproximado de orden cero. La figura muestra la componente del flujo en dirección x , a lo largo de una sección localizada en $x=110$. Como se puede observar, la aproximación de orden cero se desvía considerablemente de la solución exacta.

Los resultados que se muestran en la figura 3.11 son muy alentadores, ya que la aproximación de orden dos es prácticamente igual que la solución exacta.

La norma del error ℓ_2 , definida como la diferencia entre la solución exacta y la aproximada, se obtuvo para diferentes valores de λ . De acuerdo con los argumentos teóricos que se presentaron anteriormente, se espera una tasa de convergencia de orden sexto para la solución del orden dos. En la Figura 3.12 se muestra la tasa de convergencia calculada. Como se puede observar, se confirma la tasa teórica esperada.



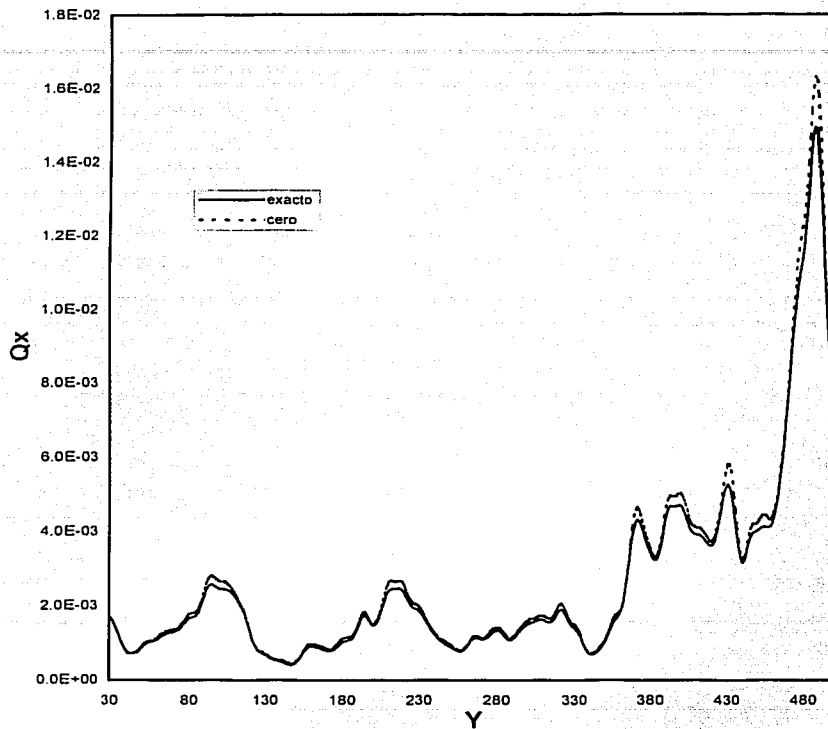


Figura 3.9. Flujo exacto y flujo aproximado de orden cero $Q_x(110, y)$, con $\varepsilon = 0.2$

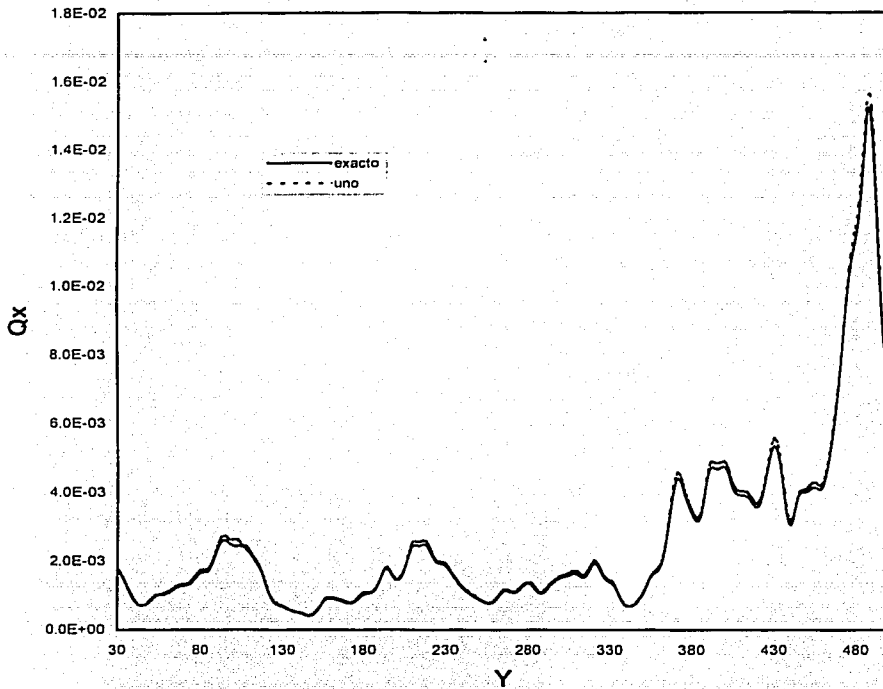


Figura 3.10. Flujo exacto y flujo aproximado de orden uno $Q_x(110, y)$, con $\varepsilon = 0.2$

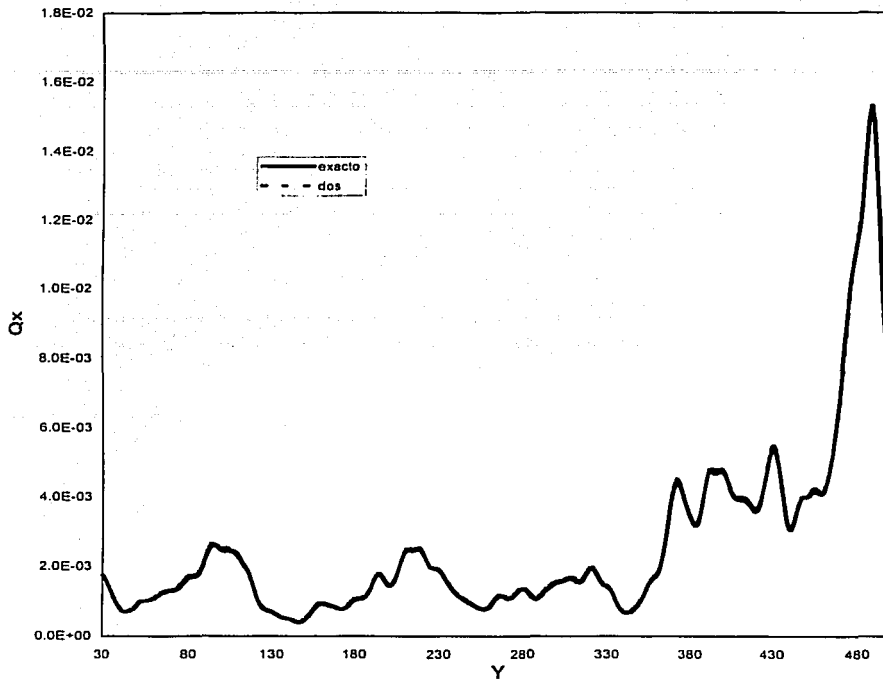
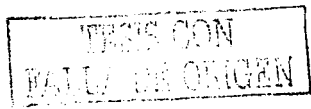


Figura 3.11. Flujo exacto y flujo aproximado de orden dos $\bar{Q}_x(110, y)$, con $\varepsilon = 0.2$



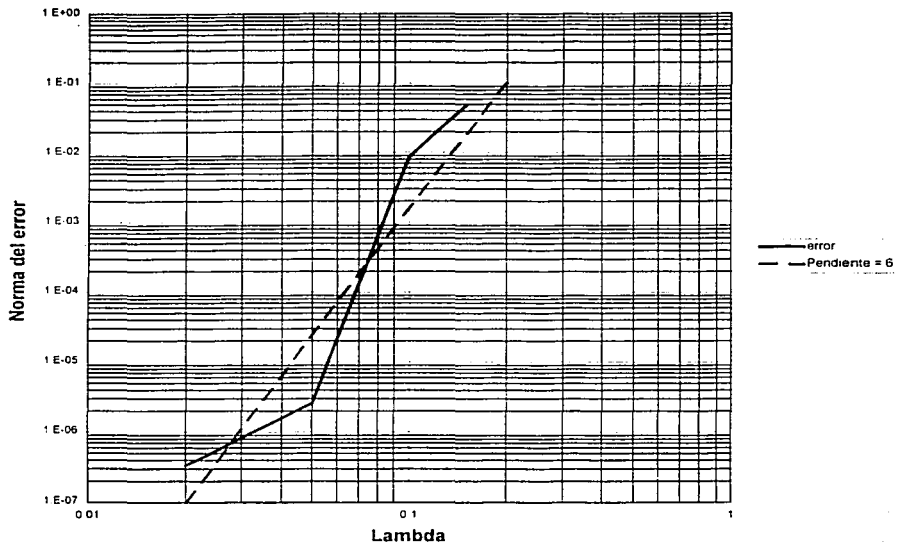
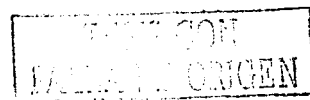


Figura 3.12. Tasa de convergencia de la norma del error ℓ_2 teórica (línea discontinua) y la calculada (línea continua).



Para eliminar efectos debido a errores de truncado en la evaluación de la teoría, la solución de las ecuaciones de escala grande se realizaron en la misma malla que se utilizó para resolver las ecuaciones primitivas (262144 celdas).

Las figuras (3.13)-(3.15) muestran la solución de las ecuaciones de escala grande, en mallas menos densas que la que se utilizó para resolver las ecuaciones primitivas. Se utilizó $\Delta x = 2, 4$ y 8 , que corresponden respectivamente a 65536, 16384 y 4096 celdas. Como se puede observar, aún con muy pocos datos los resultados son muy satisfactorios. Las figuras muestran la componente del flujo en dirección x a lo largo de una sección localizada en $x = 256$.

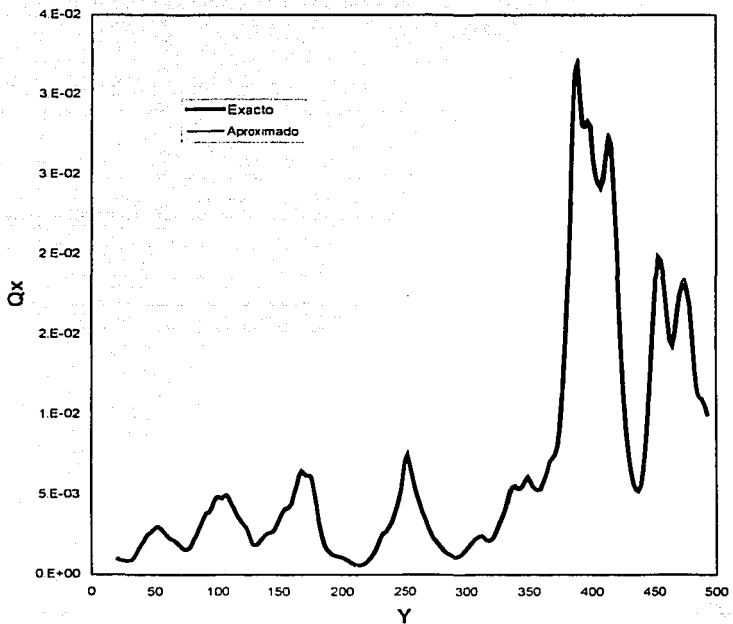


Figura 3.13. Flujo exacto y flujo aproximado $Q_x(256, y)$, con $\Delta x = 2.0$

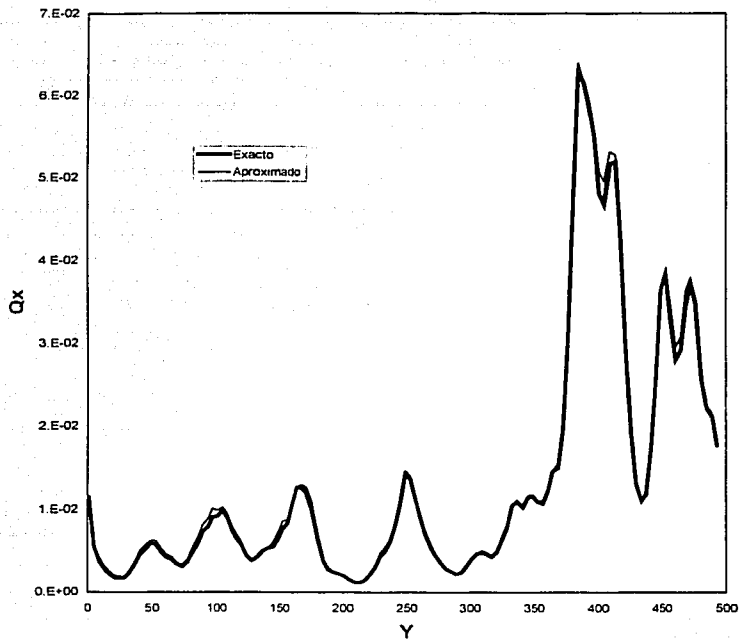


Figura 3.14. Flujo exacto y flujo aproximado $Q_x(256, y)$, con $\Delta x = 4.0$

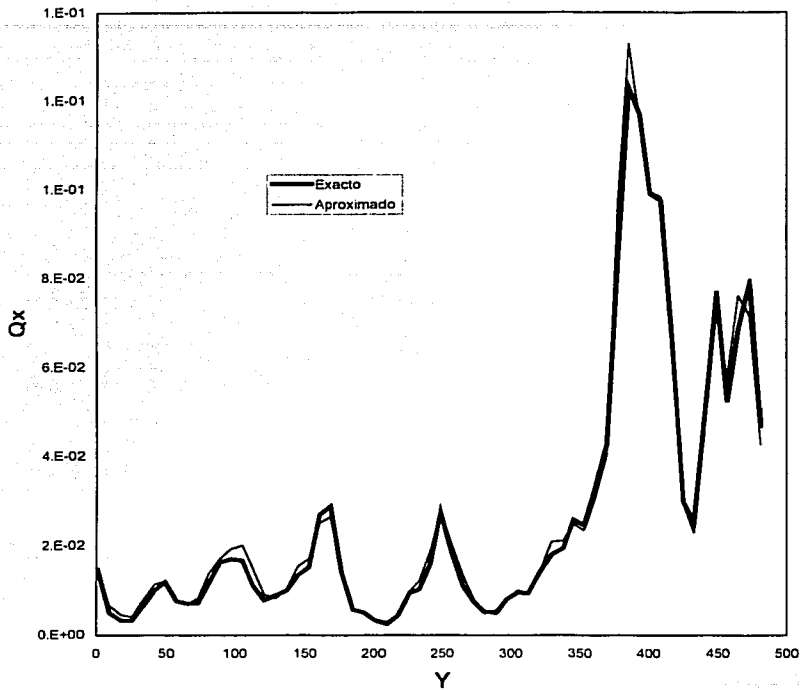


Figura 3.15. Flujo exacto y flujo aproximado $\bar{Q}_x(256, y)$, con $\Delta x = 8.0$

CAPÍTULO 4

TRANSPORTE DE SOLUTOS EN MEDIOS POROSOS EN ESCALA GRANDE

4.1. Introducción

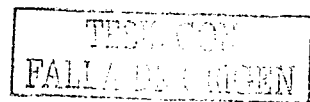
Los modelos de transporte de solutos que existen en la actualidad, se pueden clasificar como modelos en escala de poro, modelos en escala de laboratorio, y modelos en escala de campo. Estos modelos solamente pueden simular un cierto rango de escalas.

Los modelos que se utilizan para determinar políticas de uso y de restauración de acuíferos son los modelos en escala de campo. Sin embargo, los procesos que ocurren en escalas más pequeñas determinan mucho del comportamiento macroscópico.

El siguiente ejemplo muestra en una forma muy clara la influencia que tienen los procesos de las escalas pequeñas sobre las escalas grandes.

Primero, supóngase que en una escala muy fina, se modela un campo de velocidades primitivo o exacto (figura 4.1). Supóngase también que se modela el transporte de un soluto como un proceso puramente advectivo. En la figura 4.1 se puede observar que el campo de velocidades no es uniforme, por lo cual un soluto no viaja como un todo, sino que algunas partes están desfasadas con respecto a otras, viajando más lento o más rápido. Esto da como resultado la típica curva de llegada que se muestra en la figura 4.3.

Ahora considérese que se modela exactamente el mismo problema, pero en una escala de malla más grande (figura 4.2). En esta escala solamente pueden resolverse



explícitamente las componentes de escala grande del campo de velocidades primitivo (exacto). Como se puede observar, el campo de velocidades de escala grande es mucho más suave y le falta la variabilidad de escala pequeña del campo de velocidades exacto. En esta escala, un modelo de transporte puramente advectivo produce la curva de llegada que se muestra en la figura 4.4. Esta curva es imprecisa debido a que no captura los efectos de la variabilidad de las escalas de submalla. Si se examinan las curvas, da la impresión de que la curva de llegada de la escala grande es muy brusca, y que si se dispersara ésta sería más parecida al modelo primitivo. En otras palabras, el efecto de la advección de submalla se puede aproximar sumando dispersión al modelo de escala grande. La dispersión que se le pone a un modelo de transporte de escala grande, adicional a la que correspondía originalmente al modelo primitivo, se le llama dispersión realzada (Gelhar y Axness, 1983). Por lo tanto, esta dispersión no es más que una aproximación, un modelo de cerradura, a lo que en realidad es solamente advección en el modelo primitivo.

Este ejemplo muestra cómo un proceso de un modelo primitivo, advección, se representa en un modelo de escala grande por medio de dos procesos: advección y dispersión. La cantidad de dispersión adicional que se requiere en el modelo de escala grande, se incrementa conforme la proporción del campo de velocidades primitivo que cae en las escalas más finas se incrementa. Por lo tanto, la dispersión adicional es dependiente de la escala. Cuando coinciden la escala de la malla y la escala del modelo primitivo, no es necesaria la dispersión adicional.

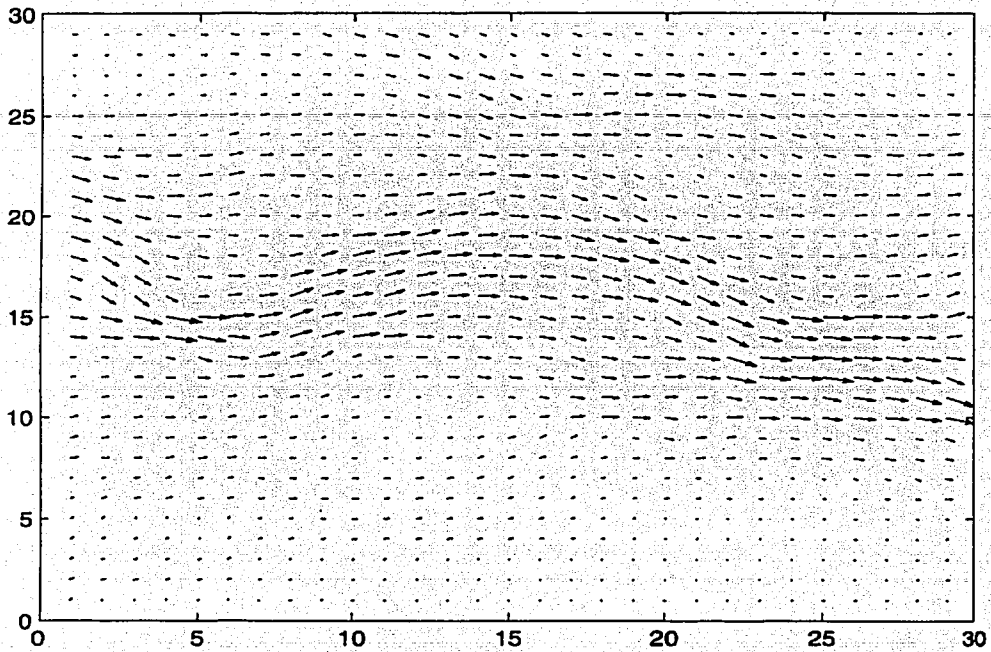


Figura 4.1. Campo de velocidades primitivo.

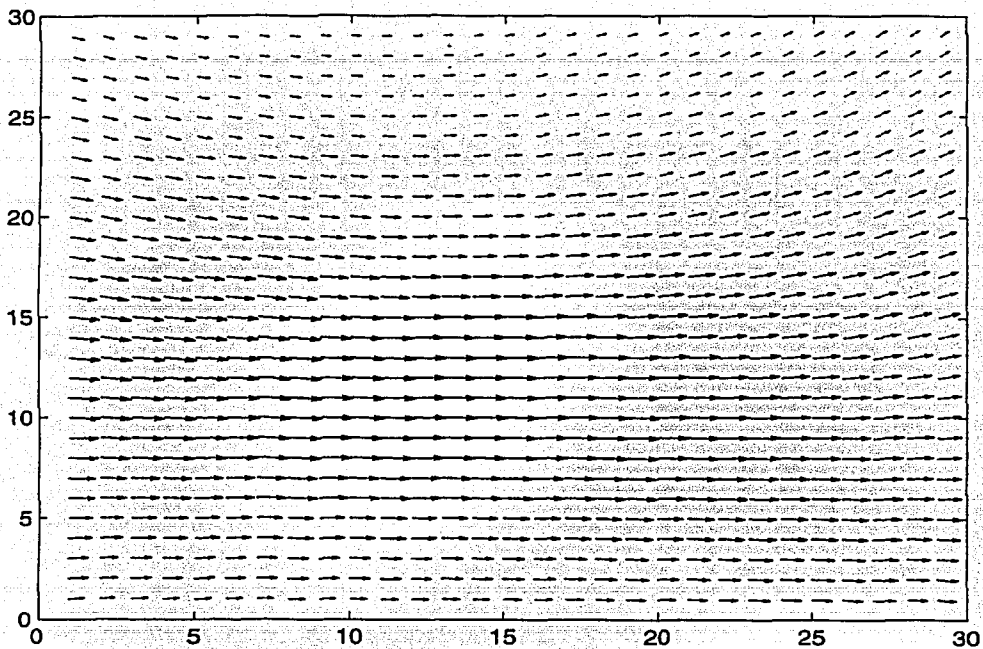


Figura 4.2. Campo de velocidades de la figura 4.1, en una escala de malla que es ocho veces más grande que la escala del campo primitivo.

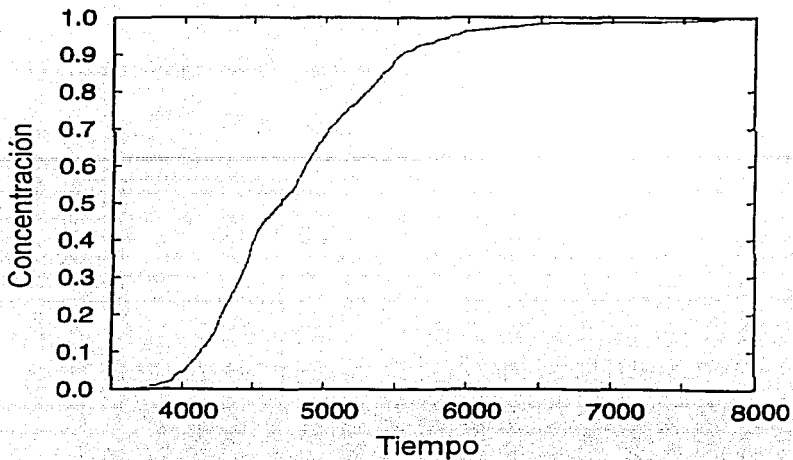


Figura 4.3. Curva de llegada de un soluto, transportado por el campo de velocidades primitivo de la figura 4.1.

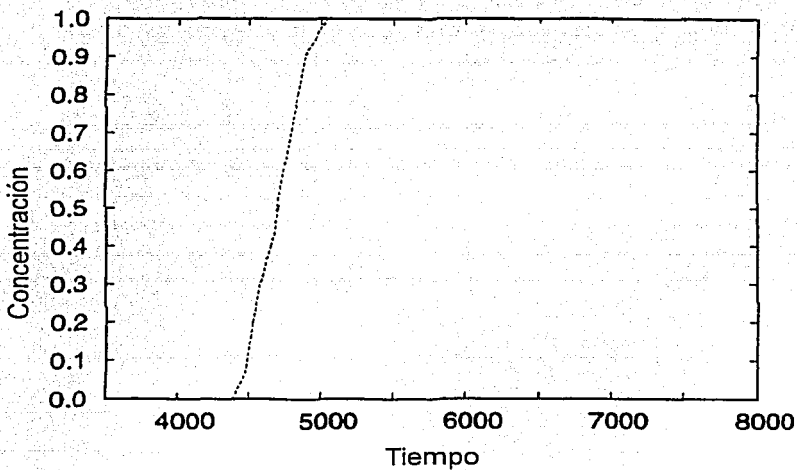


Figura 4.4. Curva de llegada de un soluto, transportado por el campo de velocidades de escala grande de la figura 4.2.

4.2. Ecuación de transporte filtrada espacialmente

Para desarrollar el modelo de transporte lo primero que debemos hacer es definir un modelo para la dinámica de la escala pequeña, el cual se filtra para producir el modelo de escala grande. Definiendo el modelo de transporte primitivo como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (V_j C) = 0 \quad (4.1)$$

donde $C(x, t)$ es el campo de concentraciones del soluto $\left[\frac{m}{\ell^3} \right]$ y $V_j(x, t)$ es la velocidad lineal promedio ℓ/t .

Filtrando espacialmente el modelo primitivo, se obtiene el modelo de escala grande:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{V_j C}) = 0 \quad (4.2)$$

El término advectivo filtrado $(\overline{V_j C})$ se puede interpretar como el efecto que tiene la advección del modelo primitivo en las escalas grandes.

Separando el término advectivo filtrado $(\overline{V_j C})$ en componentes de escala grande y de escalas pequeñas (Beckie, *et al.*, 1994),

$$\overline{V_j C} = \overline{V_j} \overline{C} + \overline{v_j c} + \overline{v_j c} \quad (4.3)$$

o bien,

$$\overline{V, C} = \{1\} + \{2\} + \{3\} + \{4\}$$

(4.4)

El término {1} representa la advección del soluto en la escala grande, debido al campo de velocidades de escalas grandes. Este término no requiere de ningún término de cerradura de submalla dado que contiene solamente variables de escalas grandes. Este es una cantidad no local ya que está integrado espacialmente. Un término no local es aquél que depende de variables que están a su alrededor.

El término {4} representa la advección de las escala pequeñas.

El término {2} es la advección del campo de concentraciones de submalla debido al campo de velocidades de las escalas grandes. El término {3} representa la advección del campo de concentración de las escalas grandes debido a las fluctuaciones de velocidad en las escalas pequeñas.

Los términos cruzados toman en cuenta la advección de escala primitiva que ocurre en escalas cerca del límite entre las escalas grandes y pequeñas. Estos términos no son importantes en sistemas en los cuales los campos de velocidad varían en dos o más escalas ampliamente separadas. Estos términos son más significativos en aquellos sistemas en los cuales el campo de velocidad varía en un rango de escalas continuo.

4.3. Modelos de cerradura de submalla

La ecuación de transporte filtrada contiene términos tanto de escalas grandes como de escalas pequeñas. Esto es lo que se llama un problema de cerradura. Para cerrar esta ecuación, es necesario expresarla solamente en términos de escalas grandes. Se citan algunos métodos que se podrían utilizar con este fin.

Quizás el modelo de cerradura más simple es la cerradura Fickiana, la cual depende de un coeficiente de macrodispersión D_{jk}^* :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \bar{V}_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} - D_{jk}^* \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_j \partial x_k} \quad (4.5)$$

Este modelo tiene la ventaja de su simplicidad. Aquí, el reto es determinar una expresión apropiada para el coeficiente de macrodispersión.

El análisis de la macrodispersión y del modelo de Fick han sido un tópico de considerable investigación en el campo del agua subterránea, aunque la mayoría se ha hecho en un marco estocástico, Gelhar y Axness (1983), Dagan (1984,1988), Sposito, Jury, y Gupta (1986), Neuman, Winter, y Newman (1987), Sposito y Barry (1987). El problema de estos modelos es que no toman en cuenta el efecto de la escala de la malla numérica en la macrodispersión, por lo cual no son directamente aplicables al problema de la cerradura de submalla.

Las teorías estocásticas de dos partículas, de Dagan (1990, 1992), Rubin (1991) y Rajaram y Gelhar (1993), y los métodos de momentos espaciales de Kitanidis (1988) ya consideran el efecto de la escala de la pluma sobre la magnitud de la dispersividad. Estos resultados muestran que la magnitud del coeficiente de dispersión de la pluma

crece conforme la pluma crece en escala. De hecho, conforme la pluma crece experimenta variabilidades de velocidad de escala más grandes. Asimismo, la variabilidad de la velocidad en escalas más grandes que la pluma solamente barren la pluma completa, pero no la diseminan (Rajaram y Gelhar, 1993).

En estos estudios estocásticos, el coeficiente de dispersión es una medida de la tasa a la cual crecen los momentos segundos espaciales de una pluma. Dicho coeficiente describe a una sola pluma. Para aplicar este modelo a un sitio con múltiples plumas se requiere que cada pluma sea descrita por su propio coeficiente de dispersión. En contraste, la idea de un modelo de filtrado espacial de escala grande es desarrollar un modelo de cerradura que es una propiedad de cada bloque de la malla de un modelo numérico.

Además del modelo de Fick, hay otras alternativas para el modelo de la cerradura. Tompson y Gray (1986) desarrollaron un modelo de transporte de segundo orden, en el cual la dinámica del flujo dispersivo es gobernada por una ecuación separada, en vez de un simple modelo de Fick. Su método se basa en la ecuación de momentos que usan algunos modelos de turbulencia (Mellor y Yamada, 1974). Tompson y Gray (1986) desarrollaron su modelo usando un promediado de volumen para escalar un modelo de la escala de poro a escala de laboratorio.

Graham y MacLaughlin (1989) utilizaron una estrategia similar a la de Tompson y Gray (1986) dentro de un marco estocástico. Ellos modelaron el flujo dispersivo usando momentos estadísticos de alto orden tomados de las variables del modelo primitivo. Estos momentos estadísticos se pueden usar para hacer suposiciones probabilísticas acerca de las variables del modelo.

Rose (1977) desarrolló un modelo de escala grande para transporte en un campo de velocidades espacialmente heterogéneo e invariante en el tiempo, con una estructura de correlación espacial similar a una turbulencia completamente desarrollada. Para derivar un modelo de transporte en escala grande, Rose aplicó métodos de grupo de renormalización de mecánica estadística. Los métodos de renormalización utilizan una mezcla de promediado probabilístico con filtrado espacial. Los filtros espaciales se usan para definir las escalas grandes y las pequeñas. Los términos de cerradura se reemplazan por medias estadísticas. Las escalas de la malla se tratan determinísticamente. El modelo que se obtiene contiene un término de advección de escala de malla, un término de macrodispersión de Fick, un término estocástico llamado "advección de remolino", y otro término que Rose describió como "advección de escala de malla de una densidad no local". El término de advección de remolino y el término no local toman en cuenta el acoplamiento entre las escalas grandes y las pequeñas. La combinación del filtrado espacial con un promediado probabilístico de las escalas pequeñas, hace de la metodología de renormalización una alternativa atractiva.

4.4. Transporte a priori

Utilizando la teoría desarrollada en el capítulo 2, los términos advectivos filtrados se pueden expresar como

$$V, \bar{C} = \left(V_i - \frac{\lambda^2}{4\gamma} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_i} \right) \left(\bar{C} - \frac{\lambda^2}{4\gamma} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_i \partial x_i} \right) \quad (4.6)$$

Esta ecuación representa los términos advectivos filtrados, y es no local dado que posee un carácter integro-diferencial. La ecuación se pueden expandir localmente, empleando (2.39), de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \overline{V_j C} &= \overline{C V_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{V_j}}{\partial x_i} \\
 &+ \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^2 \overline{V_j}}{\partial x_m \partial x_m} + \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 \overline{V_j}}{\partial x_i \partial x_m} \\
 &+ \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 \overline{C}}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial \overline{V_j}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \frac{\partial^3 \overline{V_j}}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m} \right) \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

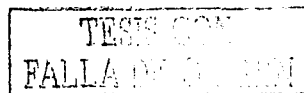
La expansión (4.7) se puede trincar al orden cero, uno y dos en λ^2

Orden cero:

$$\overline{V_j C} = \overline{C V_j} \quad (4.8)$$

Orden uno:

$$\overline{V_j C} = \overline{C V_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{V_j}}{\partial x_i} \quad (4.9)$$



Orden dos:

$$\begin{aligned}
 \overline{V_j C} &= \overline{C V_j} + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{V_j}}{\partial x_i} \\
 &+ \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 C}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^2 \overline{V_j}}{\partial x_m \partial x_m} + \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 \overline{V_j}}{\partial x_i \partial x_m} \\
 &+ \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial \overline{V_j}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \frac{\partial^3 \overline{V_j}}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m} \right) \quad (4.10)
 \end{aligned}$$

4.4.1. Experimentos numéricos

En este punto se realizan las evaluaciones numéricas de la aproximación de la ecuación no local (4.6). Se examina la precisión de las expansiones usando variables filtradas exactas que se conocen a priori. Para la prueba a priori se calculan el flujo y el transporte en un campo de conductividades primitivo. Luego se filtra el campo de velocidades y concentraciones primitivo. Las variables filtradas se consideran "exactas" porque se calcularon de las variables primitivas por medio de un filtrado directo. Luego se usan estas variables filtradas exactas para construir las expansiones del transporte de escala grande. En seguida se compara en cada punto del espacio, el transporte de escala grande exacto con el transporte que se calculo usando las expansiones asintóticas.

Las pruebas a priori se realizaron en un dominio cuadrado de 512 x 512 bloques. Las condiciones de frontera para el flujo fueron de carga constante en dos lados opuestos, y de no flujo en los otros dos lados. La condiciones de frontera para el transporte es $C(0, y, t) = C_0$, (figura 4.5).

En la figura 4.6 se muestra una comparación entre el valor exacto $\bar{v}C$ y el valor de la misma variable, aproximado por la expansión de la ecuación (4.6). Como se puede observar el valor aproximado es prácticamente el mismo que el valor exacto. De estos resultados se puede concluir que las expansiones se desempeñan en forma por demás excelente también con el problema del transporte.

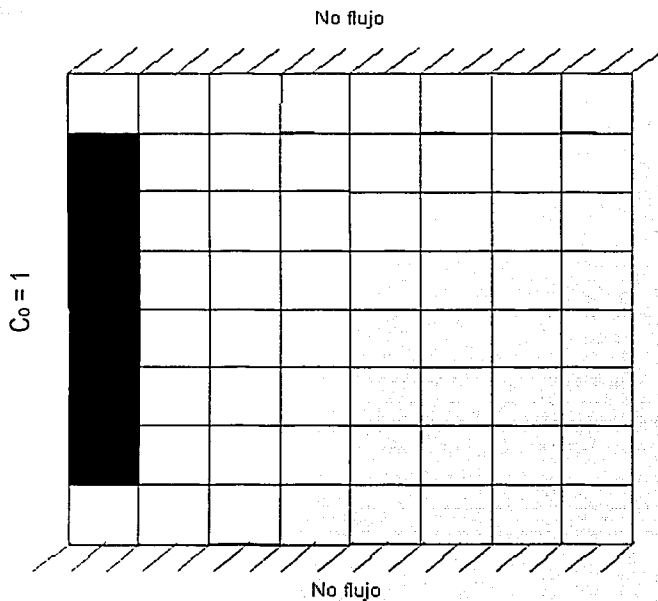


Figura 4.5. Dominio bidimensional de $512\Delta x \times 512\Delta y$. Las condiciones de frontera para el flujo son, de carga constante en dos lados opuestos y no flujo en los otros dos. La condición de frontera para el transporte es igual a $C(0, y, t) = C_0$.

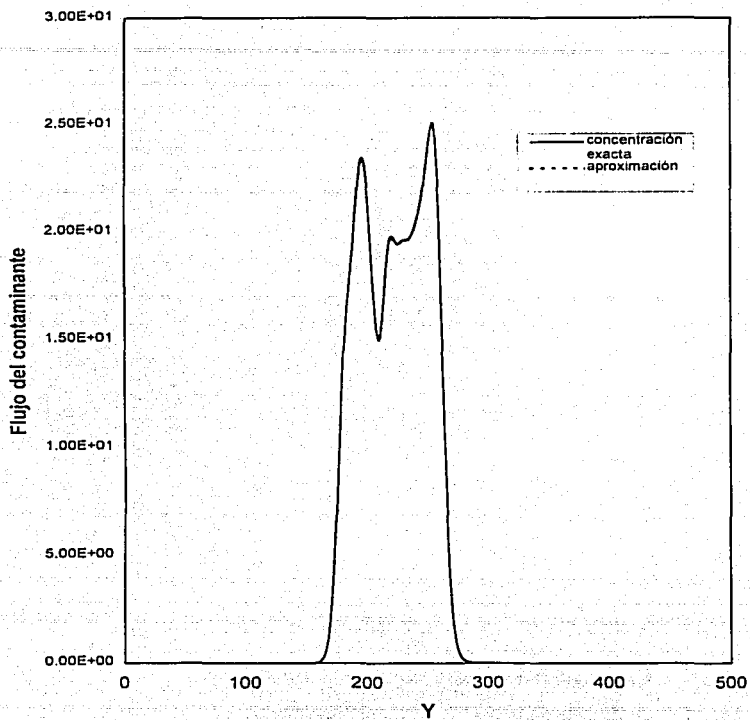


Figura 4.6. Flujo del contaminante exacto y aproximado $\sqrt{C}(x/2, y)$, con $\lambda = 20\Delta x$.

4.5. Transporte a posteriori

Combinando el modelo de transporte primitivo filtrado (4.2), con las expansiones de los términos advectivos filtrados (4.8-4.10) se obtiene

Aproximación de orden cero:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{V}_j \bar{C}) = 0 \quad (4.11)$$

Aproximación de orden uno:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{C} \bar{V}_j + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (4.12)$$

Aproximación de orden dos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{C} \bar{V}_j + \frac{\lambda^2}{12} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_i} \right. \\ \left. + \frac{\lambda^4}{576} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^2 \bar{V}_j}{\partial x_m \partial x_m} + \frac{\lambda^4}{144} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 \bar{V}_j}{\partial x_i \partial x_m} \right. \\ \left. + \frac{\lambda^4}{288} \left(\frac{\partial^3 \bar{C}}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_m} + \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \frac{\partial^3 \bar{V}_j}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Considérense los siguientes parámetros de escalamiento

$$x^* = \frac{x}{\Lambda} \quad (4.14)$$

$$c^* = \frac{c}{\Delta C_b} \quad (4.15)$$

$$V^* = \frac{V}{V_0} \quad (4.16)$$

$$t^* = \frac{t}{t_0}; \quad t_0 = \frac{\Lambda}{V_0} \quad (4.17)$$

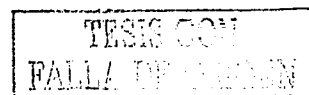
donde Λ es una escala de longitud característica; V_0 una velocidad característica, y $\Delta C_b = |C_0 - C_1|$

Definiendo también un pequeño parámetro ε como la relación del ancho de filtro a la escala de longitud característica Λ , $\varepsilon = \lambda/\Lambda$

Escalando la ecuación de transporte filtrada con (4.14 - 4.17) se obtiene

Orden cero:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} (V_j^* C^*) = 0 \quad (4.18)$$



Aproximación de orden uno:

$$\frac{\partial \bar{C}^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left(\bar{C}^* \bar{V}_j^* + \frac{\varepsilon^2}{12} \frac{\partial \bar{C}^*}{\partial x_j^*} \frac{\partial \bar{V}_j^*}{\partial x_j^*} \right) = 0 \quad (4.19)$$

Aproximación de orden dos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left(\bar{C}^* \bar{V}_j^* + \frac{\varepsilon^2}{12} \frac{\partial \bar{C}^*}{\partial x_l^*} \frac{\partial \bar{V}_j^*}{\partial x_l^*} \right. \\ \left. + \frac{\varepsilon^4}{576} \frac{\partial^2 \bar{C}^*}{\partial x_l^* \partial x_l^*} \frac{\partial^2 \bar{V}_j^*}{\partial x_m^* \partial x_m^*} + \frac{\varepsilon^4}{144} \frac{\partial^2 \bar{C}^*}{\partial x_l^* \partial x_m^*} \frac{\partial^2 \bar{V}_j^*}{\partial x_l^* \partial x_m^*} \right. \\ \left. + \frac{\varepsilon^4}{288} \left(\frac{\partial^3 \bar{C}^*}{\partial x_l^* \partial x_l^* \partial x_m^*} \frac{\partial \bar{V}_j^*}{\partial x_m^*} + \frac{\partial \bar{C}^*}{\partial x_l^*} \frac{\partial^3 \bar{V}_j^*}{\partial x_l^* \partial x_m^* \partial x_m^*} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Las ecuaciones (4.18) a (4.20) involucran derivadas de alto orden, lo que implica condiciones de frontera adicionales. Para evitar estas últimas condiciones, se empleó la estrategia de perturbaciones propuesta por Beckie *et al.* (1996b) y Aldama *et al.* (1998).

Se supondrá que la concentración de escala grande, \bar{C}^* , se puede expandir en una serie de perturbaciones como sigue:

$$C^*(x^*) = \bar{C}_0^*(x^*) + \varepsilon^2 \bar{C}_1^*(x^*) + \varepsilon^4 \bar{C}_2^*(x^*) + O(\varepsilon^6) \quad (4.21)$$

donde \bar{C}_0 , $\bar{C}_0 + \varepsilon^2 \bar{C}_1$ y $\bar{C}_0 + \varepsilon^2 \bar{C}_1 + \varepsilon^4 \bar{C}_2$ representan respectivamente la solución aproximada de orden cero, uno y dos, a la ecuación de agua subterránea de escala grande, y

$$\varepsilon^2 = \left(\frac{\lambda}{\Lambda} \right)^2 \quad (4.22)$$

Λ representa la escala de longitud dominante de las variables de escala grande. Se supone que $\varepsilon \ll 1$.

Sustituyendo (4.21) en (4.18-4.19) se obtienen las siguientes ecuaciones para la solución del orden cero, C_0 , corrección de orden uno, C_1 , y corrección de orden dos, C_2 :

Orden cero:

$$\frac{\partial C_0^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} (\bar{V}_j^* C_0^*) = 0 \quad (4.22)$$

Orden uno:

$$\frac{\partial C_1^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} (\bar{C}_1^* \bar{V}_j^*) = - \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left(\frac{1}{12} \frac{\partial \bar{C}_0^*}{\partial x_i^*} \frac{\partial \bar{V}_j^*}{\partial x_i^*} \right) \quad (4.23)$$

Orden dos:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{C}_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{C}_2 \bar{V}_j = & - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{12} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_i} \right. \\
 & + \frac{1}{576} \frac{\partial^2 \bar{C}_o}{\partial x_i \partial x_i} \frac{\partial^2 \bar{V}_j}{\partial x_m \partial x_m} + \frac{1}{144} \frac{\partial^2 \bar{C}_o}{\partial x_i \partial x_m} \frac{\partial^2 \bar{V}_j}{\partial x_i \partial x_m} \\
 & \left. + \frac{1}{288} \left(\frac{\partial^3 \bar{C}_o}{\partial x_i \partial x_i \partial x_m} \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_m} + \frac{\partial \bar{C}_o}{\partial x_i} \frac{\partial^3 \bar{V}_j}{\partial x_i \partial x_m \partial x_m} \right) \right) \quad (4.24)
 \end{aligned}$$

Como se puede apreciar, las ecuaciones (4.22) a (4.24) son forzadas por un término nohomogéneo que contiene las soluciones de orden más bajo. Este término nohomogéneo se conoce si las ecuaciones se resuelven en forma secuencial. La ventaja de este método es que sólo se tiene que resolver la ecuación de transporte advectivo estándar. Los términos de la perturbación entran como una función explícita en el lado derecho.

4.5.1. Experimentos numéricos

Para validar los resultados teóricos presentados, se realizan pruebas en un dominio cuadrado bidimensional de 500 x 500 bloques. Las condiciones de frontera para el flujo fueron de carga constante en dos lados opuestos, y de no flujo en los otros dos lados. Las condiciones de frontera para el transporte es igual a $C(0, y, t) = 1$ (figura 4.5).

Como primer paso se resolvió la ecuación primitiva del agua subterránea, usando el campo de conductividades que se muestra en la figura 4.7. Se utilizó un método de volumen finito con $\Delta x = \Delta y = 1$. Esto produjo un campo de cargas primitivas y, por

medio de diferenciación numérica, un campo de flujo primitivo. Después, el campo de flujo primitivo se filtró numéricamente, empleando un filtro de Butterworth con un ancho de $\lambda = 20\Delta x$. Por lo tanto, se obtiene una solución de "escala grande exacta".

Como un segundo paso, se resuelve la ecuación de transporte primitiva (4.1), empleando el campo de flujo exacto de escala grande y un método de características. Esto produce un campo de concentraciones primitivo "exacto", el cual se filtra usando un filtro de Butterworth con $\lambda = 20\Delta x$. Esto da como resultado un campo de concentraciones de escala grande "exacto".

Como tercer paso, se resuelve la ecuación de transporte de escala grande (4.20) empleando el campo de flujo exacto de escala grande, y la estrategia de perturbaciones propuesta por Beckie *et al.* (1996b) y Aldama *et al.* (1998).

En la figura 4.8, se muestra un corte a lo largo de la línea $x=170$, del valor aproximado y exacto de la concentración. Como se puede observar, el valor aproximado es muy similar al valor exacto.

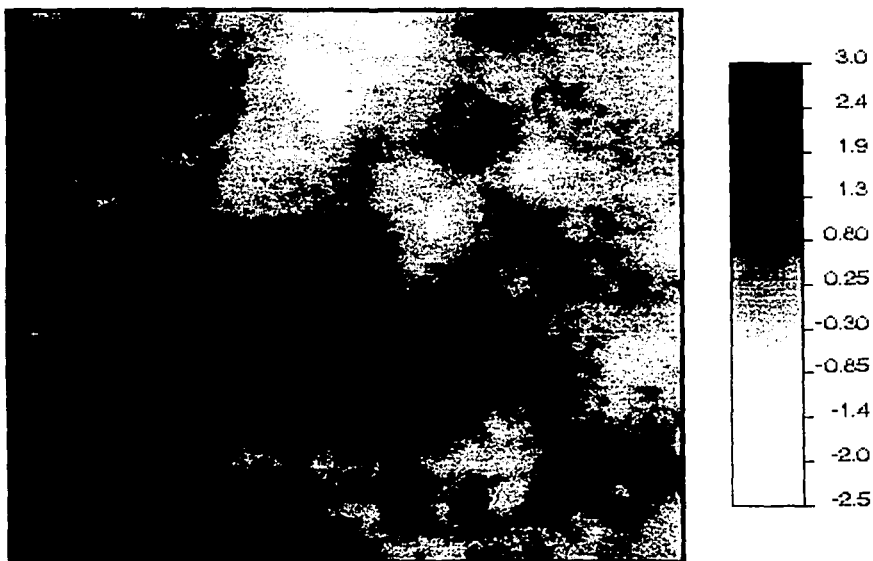


Figura 4.7. Campo de conductividades primitivo logaritmico.

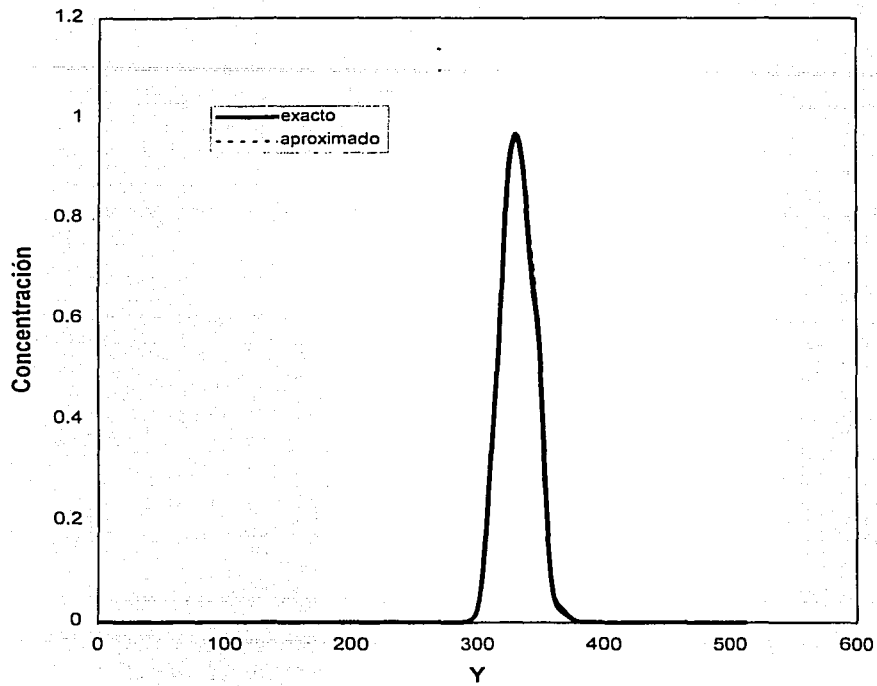


Figura 4.8. Solución exacta y aproximada para la prueba del transporte.

CAPÍTULO 5

FLUJO Y TRANSPORTE EN MEDIOS POROSOS AUTOSIMILARES

5.1 Introducción

En la práctica, casi nunca es posible obtener información confiable de las escalas pequeñas presentes en el flujo y transporte del agua subterránea. Debido a esto, para caracterizar el medio donde suceden los procesos, se debe recurrir a un muestreo muy espaciado de las propiedades del acuífero. Por lo tanto, la simulación del flujo y el transporte se encara con la doble dificultad de tratar con la incertidumbre y el problema de escala.

Existe una serie de métodos para tratar este tipo de problemas; pero, por lo general, la incertidumbre y el escalamiento se tratan simultáneamente, invocando homogeneidad estadística y ergodicidad. Pero todavía no es muy claro si estas suposiciones son correctas.

Por otro lado, muchas formaciones geológicas tienen un comportamiento autosimilar en el sentido de que, al menos para un rango de escalas, sus propiedades poseen un espectro que decae siguiendo una potencia negativa del número de onda. Una representación *Log-Log* de este comportamiento produce una línea recta, la cual se puede extrapolar a los números de onda grandes, i.e., las escalas pequeñas, por lo que se puede usar un esquema de interpolación fractal para reconstruir las propiedades de los materiales (tal como la conductividad hidráulica), que fueron obtenidas mediante un muestreo raro; estos es, de poca densidad.

Con base en estas observaciones, en este trabajo se usa una técnica de muestreo espectral para generar realizaciones de campos de conductividad hidráulicos altamente heterogéneos, en los cuales sólo se conoce un número relativamente muy pequeño de valores de dicho parámetro.

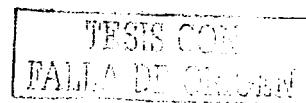
Esto permite poner las bases para usar las simulaciones de Montecarlo y así manejar el problema de la incertidumbre. Para tratar apropiadamente con el problema del escalamiento se usa una metodología de filtrado de Butterworth.

5.2. Geoestadística fractal

La geometría fractal de Mandelbrot (Mandelbrot, 1983) revolucionó la descripción matemática de la naturaleza y proveyó el marco matemático para describir las complejas e irregulares formas que se encuentran en la naturaleza. Ejemplos de estas formas son las estructuras microscópicas de los sólidos porosos, la distribución del oro en los depósitos minerales, las montañas y las líneas costeras.

Los fractales se caracterizan por el hecho de que exhiben variaciones en todas las escalas de observación y tienen correlaciones espaciales sobre todas las escalas. Los primeros fractales que se estudiaron fueron más que nada curiosidades matemáticas como la curva de Koch, las cuales empezaron a dar las primeras relaciones de escalamiento que poseen las estructuras fractales. Sin embargo, son demasiado regulares para modelar propiedades geológicas (Mandelbrot, 1983).

Una de las primeras aplicaciones de la estadística fractal en las ciencias geofísicas fue en el campo de la hidrología, donde se mostró que la secuencia de los flujos anuales de la mayoría de los ríos exhibe un lapso de interdependencia el cual se puede considerar infinito (Hurts, 1951, Mandelbrot, 1968). Estas secuencias se caracterizan por tender a que a un flujo anual alto le siga otro flujo alto, y a un flujo bajo le siga otro flujo bajo. Esto resulta en una persistencia de variaciones en todas las escalas (Mandelbrot, 1968). Se ha encontrado similar comportamiento en otros registros geofísicos relacionados con el clima, entre éstos los registros de lluvia y las medidas de temperatura. Debido al carácter fractal de los datos hidrológicos, no es descabellado esperar un carácter similar



en la distribución de los sedimentos, dado que su estadística la determinan en gran medida los procesos que los formaron.

El concepto de geometría fractal también se ha usado para describir la heterogeneidad de la conductividad hidráulica en diferentes escalas (Hewett, 1986; Lenormand et al., 1990). Se han utilizado procesos tales como el movimiento Browniano fraccionario (mBf) y el movimiento de Levy fraccionario (mLf). Por ejemplo, Mukhopadhyat (1995) usó una conductividad basada en mBf y un modelo de percolación, para estudiar el efecto de la heterogeneidad sobre el flujo y transporte en medios porosos y rocas fracturadas.

Este tipo de funciones se utilizaron inicialmente en hidrología para simular el flujo de corrientes (Mandelbrot y Wallis, 1968, 1969 a,b; Rodriguez-Iturbe et al., 1972). Como reportó Hewett (1986), observaciones de campo indican que es común que las propiedades de las formaciones geológicas se comporten como un proceso mBf. Muchos estudios han revelado que el comportamiento fractal de las formaciones petrolíferas no es la excepción, sino la regla. Por ejemplo, los registros de la porosidad de varios pozos petroleros en Irán (Sahimi y Mehrabi, 1995) revelaron que la mayoría de estos registros se pueden describir razonablemente con un mBf. Neuman (1994), también provee evidencia de que la conductividad de muchos acuíferos obedece la estadística de un mBf.

5.3. Caracterización geoestadística

La suposición básica en geoestadística es que las propiedades geológicas están distribuidas en el espacio, y que tienen una estructura u organización dentro de su aparente irregularidad. La medida de esta estructura es una función llamada el variograma, el cual se define como

$$2\gamma(h) = E \left\{ [Z(x+h) - Z(x)]^2 \right\} \quad (5.1)$$

donde $Z(x)$ es el valor de la variable en la localización x , $Z(x+h)$ es el valor de la variable en x más un cierto incremento h , y $E\{ \}$ es el valor medio o valor esperado. $\gamma(h)$ mide la variación de una propiedad en función de la separación espacial que hay entre sus muestras. El procedimiento para estimar el variograma a partir de un conjunto de datos ya se ha descrito con mucho detalle (Journel, *et al.*, 1978).

Es común que las propiedades geológicas muestren correlaciones que se pueden observar sobre múltiples escalas (Serra, J., 1968). Las distribuciones que exhiben estas estructuras anidadas se pueden caracterizar superponiendo una serie de variogramas con diferentes rangos y mesetas (sill). Cuando la forma del variograma que caracteriza cada escala de variación es geoméricamente similar a las otras (i.e., cuando el rango y la meseta para cada incremento de escalas es una progresión geométrica), la superposición de muchos variogramas resulta en un variograma de ley de potencias.

Las distribuciones fractales están caracterizadas por un variograma de ley de potencias de la forma

$$\gamma(r\ell) = \gamma(\ell) r^{2H} \quad (5.2)$$

donde $\gamma(\ell)$ es una varianza característica de la escala ℓ , y H es un coeficiente.

Las distribuciones que tienen esta forma en sus incrementos se dice que son estadísticamente autosimilares (Mandelbrot, *et al.*, 1968), dado que la variación en cualquier escala $r\ell$ está relacionada con la variación en la escala ℓ . Esto implica que la varianza en una escala determinada se puede obtener a partir de la varianza medida en cualquier otra escala.

El espectro de energía de un mBf obedece a una ley de potencia de la forma

$$S(w) = \frac{1}{w^\beta} \quad (5.3)$$

donde w = número de onda

β = pendiente del espectro

La pendiente del espectro esta relacionada con H por $\beta = 2H + 1$, donde $0 < H < 1$.

La ecuación (5.3) esta dominada por los números de onda bajos. Conforme H se incrementa de cero hacia la unidad, la persistencia de las correlaciones también se incrementa mientras que la contribución de las escalas pequeñas (número de onda altos) decrece. En las figuras 5.1 y 5.2 se presentan ejemplos de mBf. Se generaron utilizando la misma secuencia de números aleatorios y varianza, pero con valores de H diferentes. Conforme H se incrementa, la función se hace cada vez más regular.

En los depósitos sedimentarios, los valores similares tienden a aglutinarse y no son totalmente aleatorios a través del espacio. En una secuencia de arenas y arcillas, la conductividad media es el promedio de los valores altos concentrados en las arenas y los valores bajos concentrados en las arcillas. Por ejemplo, el flujo horizontal depende mucho de las regiones de alta conductividad y no es muy útil predecir el flujo medio. Es necesario conocer cómo las regiones de valores altos y bajos están espacialmente distribuidas. El valor de H da una medida de la intermitencia de las diferentes regiones de conductividad, y de qué tanto persisten estas regiones.

. fBm

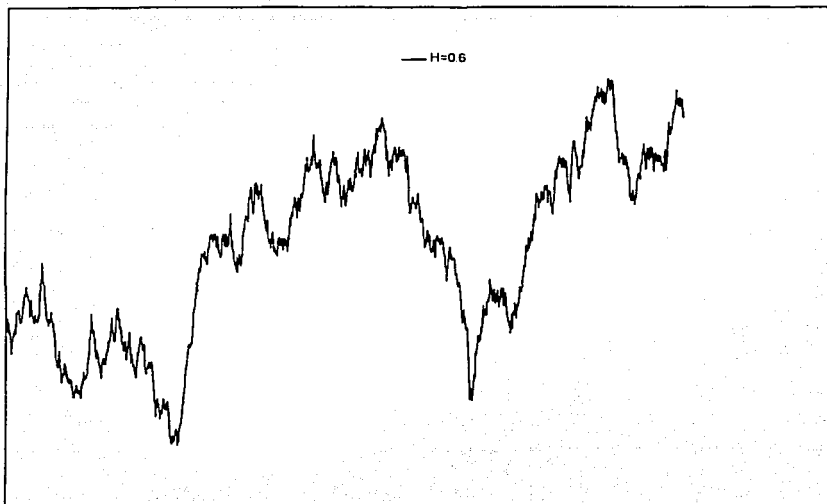


Figura 5.1. Movimiento browniano fraccionario generado con $H = 0.6$.

fBm

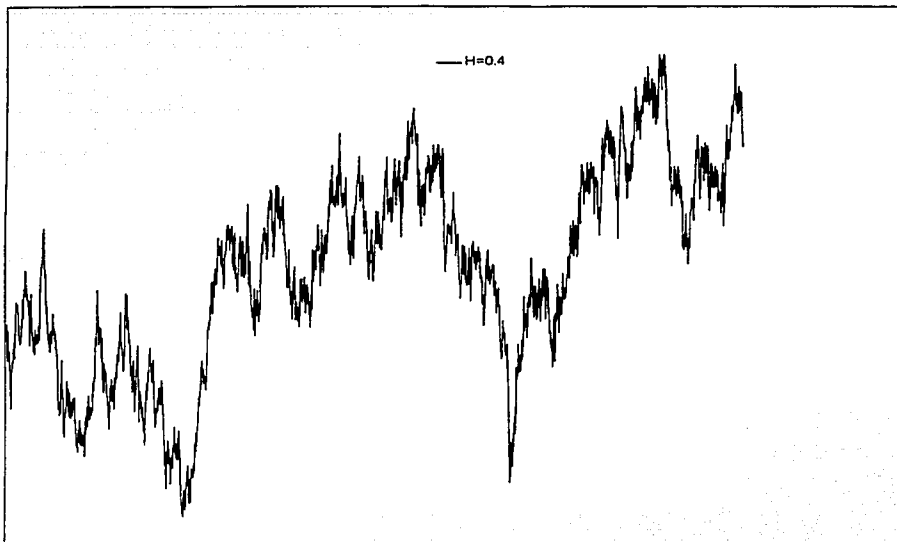


Figura 5.2. Movimiento browniano fraccionario generado con $H=0.4$.

Se ha encontrado que muchos fenómenos naturales tienen un comportamiento tal que su espectro varía con el inverso del número de onda. Si se grafica el espectro de la energía en una escala log-log, este exhibe un comportamiento lineal en varios ciclos de la frecuencia.

Como un ejemplo se presenta aquí el espectro unidimensional de los datos de la conductividad en tres pozos del acuífero de *Mount Simon* (Bakr, 1976). La línea recta obedece una ley del tipo de la ecuación (5.3).

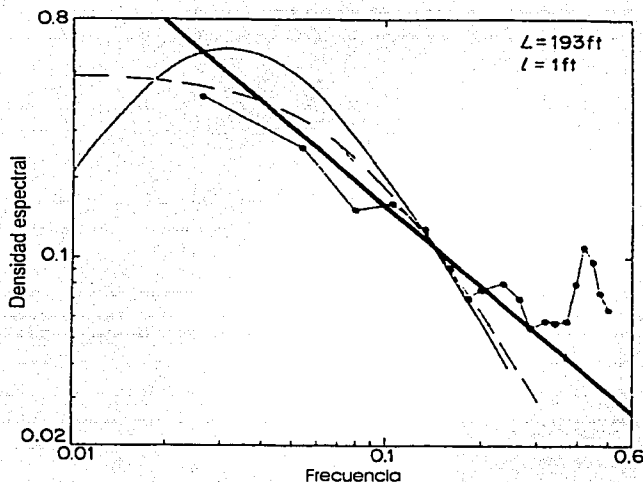


Figura 5.3. Espectro unidimensional de la conductividad en un pozo del acuífero *Mount Simon* (Bakr, 1976). La línea recta representa un espectro autosimilar.

5.4. Interpolación estocástica

La interpolación estocástica con la estructura de correlación de un mBf se puede llevar a cabo por varios métodos. El que se utilizó en este trabajo fue el de adiciones aleatorias sucesivas. En este método los valores se interpolan "suavemente" en el punto medio del intervalo y se le suma una variación aleatoria que satisface la ecuación 5.2. Este procedimiento se repite sucesivamente a intervalos más y más pequeños, hasta que se genera un campo estocástico con la resolución que se desea. La relación entre las variables en cada escala se obtiene a partir de la variable H . La interpolación "suave" se puede hacer por interpolación lineal o por promedios pesados tal como *kriging*. La variación aleatoria que se le suma al valor suave, es un número aleatorio que se toma de una distribución Gaussiana con media cero y varianza σ_1^2 .

El valor de σ_1^2 se obtiene con la relación

$$\sigma_1^2 = \frac{\sigma_0^2}{2^{2H}} \quad (5.4)$$

donde σ_0^2 es la varianza de la escala conocida.

5.5. Simulaciones de campos de conductividad

5.5.1. Simulación no condicional

Una vez que se tiene un variograma, se pueden llevar a cabo realizaciones de campos aleatorios que tienen correlaciones espaciales que se ajustan a las correlaciones dadas por el variograma. A estas simulaciones se les llama simulaciones no condicionales, porque no necesariamente tienen el mismo valor que los datos medidos en ciertos puntos. En la figura 5.4 se muestra una simulación no condicional :

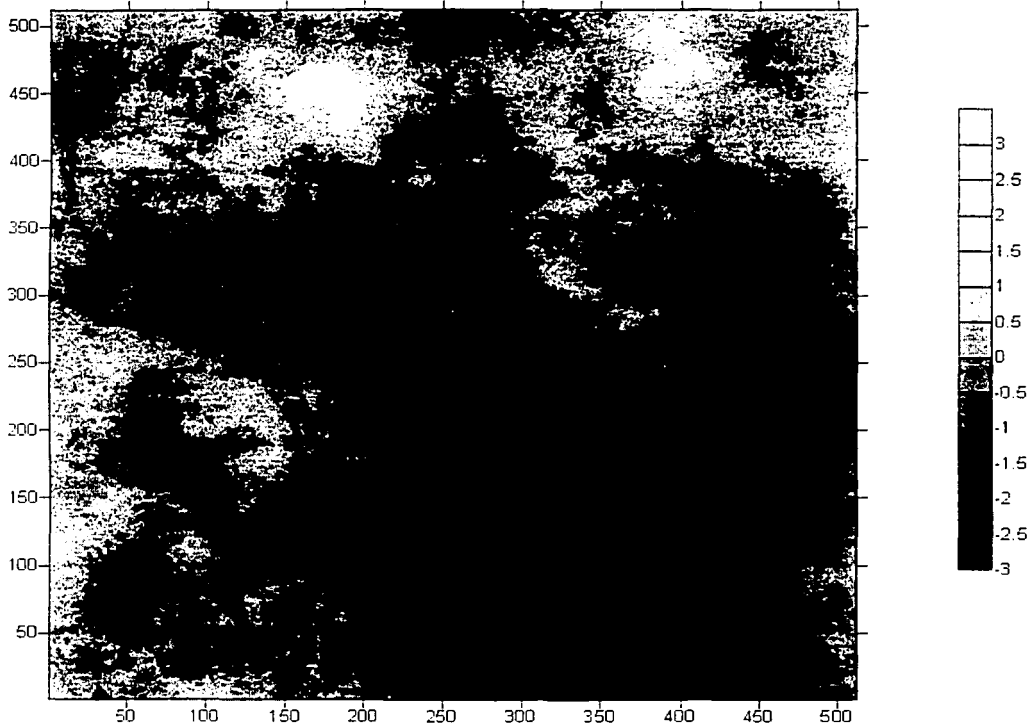


Figura 5.4. Simulación fractal no condicionada de un campo de conductividad hidráulica (Log K).

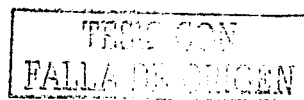
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

5.5.2. Simulación condicional

En la simulación condicional se toma un campo aleatorio y se obliga a que pase por los puntos donde se tienen mediciones, haciendo que se preserve la estructura de correlación general del campo. Obviamente, estas realizaciones no son únicas, porque tienen componentes aleatorias que representan la variabilidad en escalas más pequeñas que las de muestreo. Sin embargo, dado que se ajustan al mismo variograma y pasan a través de los mismos valores de datos, tienen una apariencia similar.

Cuando se genera una familia de simulaciones condicionales que están relacionadas con el campo original y se conjunta toda esta información, se desarrolla un procedimiento semejante a aquel por el que la policía obtiene el rostro de un sospechoso a partir de la descripción de los testigos. Diferentes, pero similares, imágenes surgen de cada dibujo. Entre más información proveen los testigos, más se parecen esas imágenes.

Como un ejemplo de este tipo de simulaciones, considérese el campo de conductividades que se muestra en la figura 5.5. Es un campo con una heterogeneidad muy grande, por lo cual el rango de valores de Log K es muy amplio. El campo de la figura 5.6 se generó utilizando solamente el 11 % de los datos de la figura 5.5. Como se puede apreciar, la simulación fractal estocástica es muy parecida al campo de conductividades exacto.



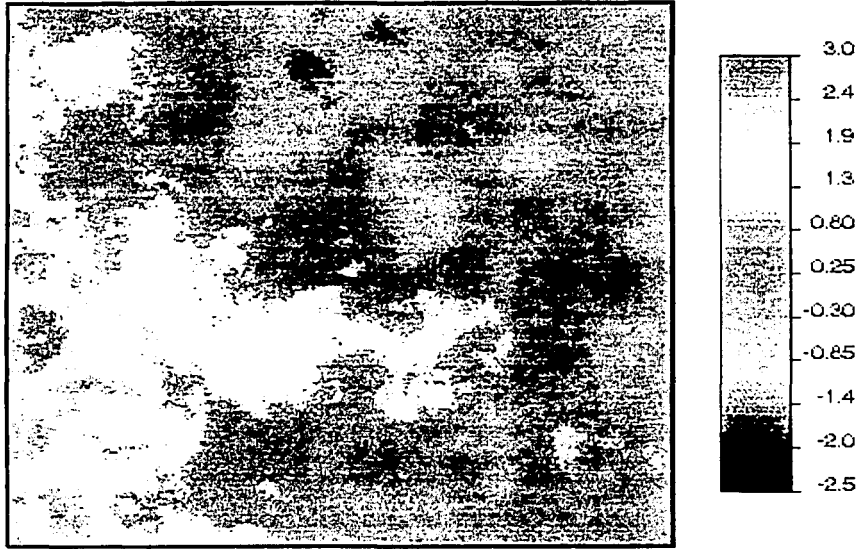


Figura 5.5. Campo de conductividades (Log K) exacto.



Figura 5.6. Campo de conductividades generado fractalmente y condicionado al campo de la figura 5.5.

5.6 Flujo y transporte en medios porosos autosimilares

Para aplicar la metodología del cálculo del flujo y transporte en medios porosos autosimilares, se realizaron pruebas en un dominio cuadrado bidimensional de 500 x 500 bloques, con condiciones de frontera de carga constante en dos lados opuestos ($H = 1$ en un lado y $H=0$ en el otro), y de no flujo en los otros dos lados opuestos.

Como primer paso, se resolvió la ecuación primitiva del agua subterránea usando el campo de conductividades que se muestra en la figura 5.5. Se usó el método de volumen finito con $\Delta x = \Delta y = 1$. La solución dio como resultado un campo de cargas primitivo y, a través de diferenciación numérica, un campo de flujos primitivo. Los campos de conductividad, de flujo y de carga primitivos, se filtraron numéricamente empleando un filtro de Butterworth con $\lambda = 20\Delta x$, por lo que se obtiene una solución exacta.

Como segundo paso, el campo de conductividad que se muestra en la figura 5.6, así como otras 29 realizaciones estadísticamente equivalentes, se filtraron usando un filtro de Butterworth con $\lambda = 20\Delta x$. Luego, la ecuación del agua subterránea de escala grande se resolvió para cada realización, aplicando un método de volumen finito. La figura 5.7 muestra una comparación del valor exacto del flujo y del valor del flujo de escala grande. Este último se obtuvo como el valor promedio de las treinta simulaciones realizadas. Como se puede observar, ambas soluciones son muy parecidas.

Como tercer paso, la ecuación de transporte primitiva se resolvió empleando el campo de flujo primitivo. La condición inicial fue una concentración igual a cero en todo el campo, y la condición de frontera en el lado izquierdo del dominio fue $C(0, y, t) = 1$ para valores positivos del tiempo.

La solución dio como resultado un campo de concentraciones primitivo, el cual se filtró usando un filtro de Butterworth igual a $\lambda=20\Delta x$. Con esto se obtuvo un campo de concentraciones exacto. Luego se empleó el campo de flujo de escala grande (el cual se generó por la solución de la ecuación del agua subterránea de escala grande), con el objeto de resolver la ecuación de transporte de escala grande para cada una de las 30 realizaciones del flujo. La figura 5.8 muestra una comparación de los valores exacto y aproximado de la concentración. Nuevamente, el valor aproximado se obtuvo como el promedio ensamble de las 30 realizaciones. Como se puede observar, existe concordancia.

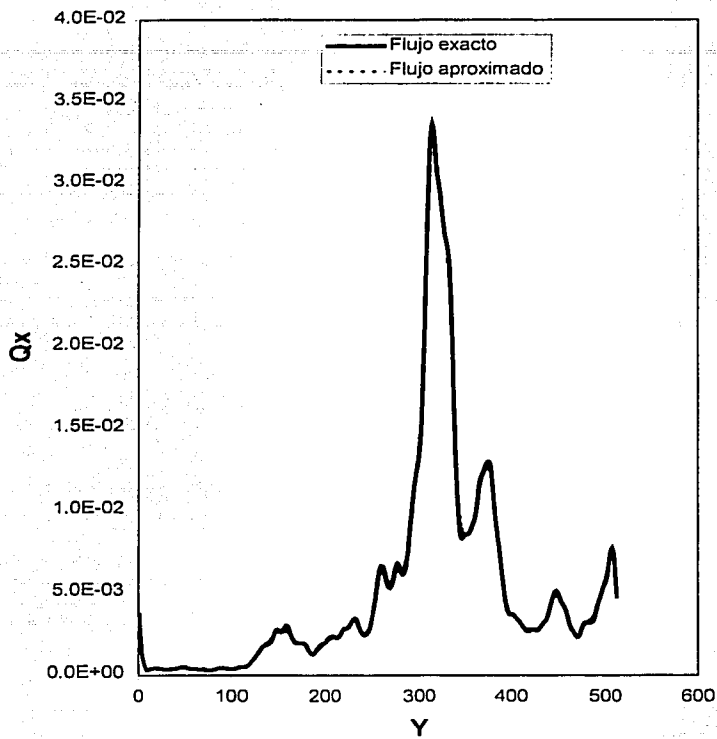


Figura 5.7. Solución exacta y aproximada para la prueba del flujo.

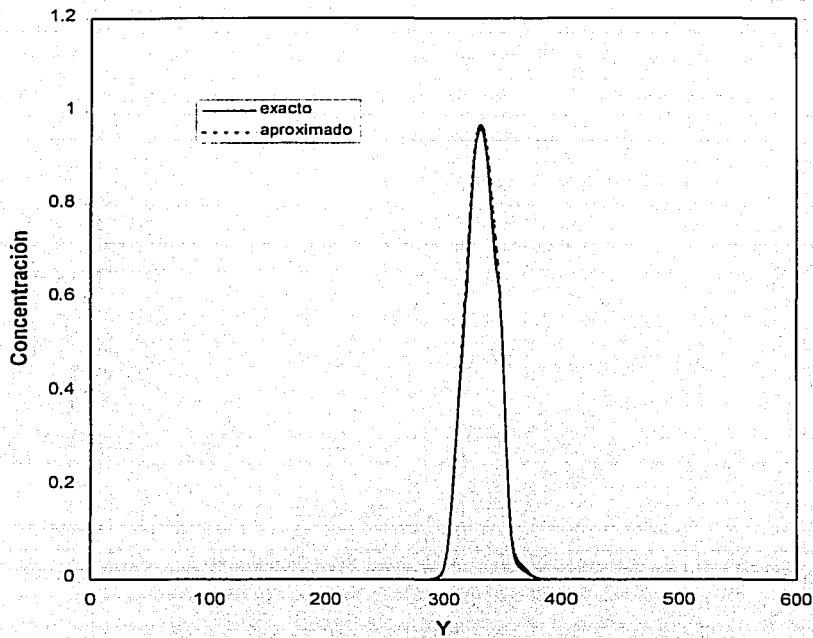


Figura 5.8. Solución exacta y aproximada para la prueba del transporte.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1 Conclusiones

Probablemente uno de los mayores problemas en la construcción de un modelo de flujo y transporte en un medio poroso saturado, es determinar los parámetros del modelo con una cantidad muy limitada de datos. La determinación incorrecta de los parámetros son en gran medida la fuente más significativa de error en la predicción de los modelos.

En muchos casos solamente se pueden caracterizar las componentes de escala grande que describen el sistema. Por ejemplo, la conductividad hidráulica por lo general se determina de un conjunto de medidas tales como pruebas de bombeo o de piezómetros, que se toman puntualmente en el dominio del problema. Si los puntos de muestreo están suficientemente juntos en principio se podría medir el campo de conductividad K "verdadero". Sin embargo, cuando las mediciones no están lo suficientemente cerca, la red de muestreo filtra la conductividad hidráulica verdadera K que de otro modo sería observada si el muestreo fuera lo suficientemente denso. Se designa a la componente de escala grande de la conductividad hidráulica verdadera como \bar{K} . Es común que únicamente se cuente con el valor de \bar{K} .

En este trabajo se presentó una metodología de modelación que utiliza las componentes de escala grande. Esta metodología difiere de los métodos convencionales en el requerimiento de los datos. Mientras que otras teorías por lo general requieren información estadística acerca de las propiedades de submallá del sistema, nuestro método sólo utiliza información de las propiedades de las escalas grandes del sistema, la cual es mucho más fácil de obtener.

La principal aportación de este trabajo, fue el desarrollo de ecuaciones de dinámica de escala grande con base en aproximaciones asintóticas que se obtienen de la expansión de filtros de Butterworth, que permitieron la construcción de **cerraduras exactas**.

Las pruebas numéricas que se realizaron para validar la teoría muestran resultados muy prometedores.

6.2 Recomendaciones

6.2.1. Filtros anisotrópicos

En este trabajo únicamente se utilizaron filtros isotrópicos. Este tipo de filtros es adecuado para la mayoría de los sistemas horizontales bidimensionales. Sin embargo, si se va a modelar una sección vertical sería más apropiado usar filtros anisotrópicos. En este caso se usa un ancho de filtro pequeño en la dirección vertical, donde las características del medio poroso cambian rápidamente con la posición. En la dirección horizontal se utilizarían anchos de filtro más grandes. Aldama [1992] presenta algunas ideas que se pueden utilizar para realizar este análisis.

6.2.2. Métodos numéricos

Las ecuaciones de escala grande que se presenta en el capítulo 2 contienen derivadas de órdenes muy altos, que son muy sensibles a errores de truncado. Los métodos numéricos que se utilizaron para calcular las derivadas pueden producir este tipo de errores. Se recomienda utilizar otros métodos numéricos que sean más apropiados para resolver este tipo de ecuaciones. En particular, se recomiendan los métodos espectrales [Canuto et al., 1987] los cuales aproximan las derivadas con precisiones muy altas.

6.2.3 Implementación práctica

En la práctica, por lo general los datos disponibles son elevaciones piezométricas en puntos determinados del campo de interés y algunas pruebas de campo locales (por lo general pruebas de bombeo). Para implementar la metodología de escala grande, se tienen que utilizar estos datos para estimar los parámetros de escala grande (e.g. \bar{K}) y los anchos de filtro apropiados.

El campo de conductividades de escala grande \bar{K} se puede estimar a partir de las pruebas de campo locales, utilizando el método de Kriging. El ancho de filtro el cual aparece en las expansiones de escala grande, se puede determinar de la distancia entre las pruebas de campo locales que se utilizaron para determinar \bar{K} .

En la práctica puede ser difícil determinar el ancho de filtro que corresponde a las mediciones de una red de muestreo. Particularmente cuando el muestreo no es regular. Aún falta una metodología para relacionar la configuración de la red de muestreo con los anchos del filtro, y así mismo para el uso de filtros con ancho variable.

Una metodología que podría ayudar en el uso de filtros con ancho variable es la que se conoce como sistemas coordenados curvilíneos. En estos sistemas las líneas coordenadas coinciden con las fronteras del dominio y pueden ser irregulares. Así mismo, el tamaño de los elementos de la malla de cálculo puede ser variable. En estos sistemas el dominio físico, las ecuaciones diferenciales que describen el fenómeno y las condiciones de frontera, se transforman a un plano en el cual los cálculos se realizan en una malla rectangular. Dado que todos los cálculos se realizan en una malla regular en el plano transformado, se pueden utilizar anchos de filtro variables en el plano físico.

BIBLIOGRAFIA

Aldama, A. (1990). *Filtering techniques for turbulent flow simulation*. Berlin: Springer-Verlag. 397 pp.

Aldama, A. (1992). *A subgrid scale theory for physical processes with quadratic nonlinearities: An a priori test for Burgers' flow*, Comp. Meth. Water Res., IX, Vol. 2, 91-98.

Aldama, A. (1992). *Leonard and cross terms approximation in the anisotropically filtered equations of motion*, Large eddy simulation of complex engineering and geophysical flows, Cambridge Univ. Press, New York, NY.

Aldama, A., R. Beckie y M. Mejia (1998). *A new approach for scaling-up flow and transport processes based on the use of Butterworth filters*. Proc. XII Int. Conf. Comp. Meth. Water Res. 1:421-428. Southampton: Comp. Mech. Publications

Armstrong, M., *Basic linear Geostatistics*, Springer-Verlag, New York, 1998.

Bakr, A. A. (1976), *Stochastic analysis of the effect of spatial variations of hydraulic conductivity on groundwater flow*. Ph. D. Thesis, New Mexico Institute of Mining and Technology, Socorro, NM.

Beckie, R., Aldama, A. y Wood, E. (1994), *The universal structure of the groundwater flow equations*, Water Res. Res., 30, 1407-1419.

Beckie, R., Aldama, A. y Wood, E. (1996a), *Modeling the large-scale dynamics of saturated groundwater flow using spatial-filtering theory: Theoretical development*, Water Res. Res., 32, 1269-1280.

Beckie, R., Aldama, A. y Wood, E. (1996b), *Modeling the large-scale dynamics of saturated groundwater flow using spatial-filtering theory: Numerical Evaluation*, Water Res. Res., 32, 1281-1288.

Bender, C. M., y S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill, New York, 1978.

Beran, M.J., *Statistical continuum theories*, Monographs in statistical physics and thermodynamics, 9, Interscience, 1968.

Bracewell, R. In the Fourier transform and its applications, Electrical and electronic engineering series, McGraw-Hill, New York, NY, 1965.

Canuto, C., M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, y T. A. Zang, *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, New York, 1987.

Champeney, A handbook of Fourier theorems, Cambridge Univ. Press, New York, NY, 1987.

Folland, G.B. Introduction to partial differential equations, Princeton Univ. Press, Princeton, NJ, 1976.

Friedman, Foundations of modern analysis, Dover, Mineola, NY, 1981.

Dagan, G. 1984. Solute transport in heterogeneous porous formations. *J. Fluid Mech.* 145:151-77.

Dagan, G. 1988. Time-dependent macrodispersion for solute transport in anisotropic heterogeneous aquifers. *Water Resour. Res.* 24:1491-500

Dagan, G. 1990. Transport in heterogeneous porous formations: spatial moments, ergodicity, and effective dispersion. *Water Resour. Res.* 26:1281-90

Dagan, G. 1992. Dispersion of a passive solute in non-ergodic transport by steady velocity fields in heterogeneous formations. *J. Fluid Mech.* 233:197-210

Dagan, G., *Upscaling of dispersion coefficients in transport through heterogeneous formations*, Computational Methods in Water Resources, 1994, 431-439.

Fitts, R. 1995. *Uncertainty in deterministic groundwater transport models due to the assumption of macrodispersive mixing: evidence from the Cape Cod and Borden tracer tests*, Journal of Contaminant Hydrology, 1996, 69-84.

Gelhar, L. W., y Axness, C. L. 1983. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resour. Res.* 19:161-80

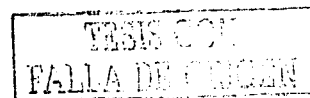
Gelhar, L.W. *Stochastic subsurface hydrology*, Prentice-Hall, New Jersey, 1993

Graham, W., y mcLaughlin, D.B. 1989. *Stochastic analysis of nonstationary subsurface solute transport. 1. Unconditional moments*. *Water Resour. Res.* 25:215-32.

Harris, F.J., *On the use of windows for harmonic analysis with the discrete Fourier transform*, IEEE Proc., 66(1978), pp. 51-83.

Hurts, H. E., *Long Term Storage Capacity of Reservoirs*, Transactions of the ASCE, 116, 770-808, 1951.

Hewett, T. A., *Fractal distribution of reservoir heterogeneity and their influence on fluid transport*, paper presented at Annual Technical Conference and Exhibition, Soc. of Pet. Eng., New Orleans, la., 1986.



Journel, A.G., y Huijbregts, C.J., *Mining Geostatistics*, Academic Press, New York City, 1978.

Kaper, H. G., y M. Garbey (Eds.), *Asymptotic and Numerical methods for Partial Differential Equations With Critical Parameters*, Kluwer Acad., Norwell, Mass., 1993.

Kay S.M. y Marple S.L., *Spectrum analysis – a modern perspective*, IEEE Proc., 69 (1981), pp. 1380-1419.

Kay, S., *Spectral estimation*, in advanced topics in signal processing Chapter 2, J. S. Lim and Oppenheim, A.V., eds., Prentice Hall signal processing series, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1988, pp. 58-122.

Keller, J.B. (1980), *Darcy's law for flow in porous media and the two space method*, in Nonlinear partial differential equations in engineering and applied science, R.L. Sternberg, A.J. Kalinowski and J.S. Papadakis, eds., Marcel Dekker, New York, NY, pp. 429-443.

Lenormand, R., F. Kalaydjian, M. T. Bieber, y J.M. Lombard, *Use of multifractal approach for multiphase flow in heterogeneous porous media: Comparison with CT-Scanning experiments*, SPE pap. 20475, Soc. of Pet. Eng. Richardson, Tex., 1990.

Leonard, A. (1974), *Energy Cascade in Large-Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows*, Adv. in Geophysics, 18^a, 237-248.

Lim., J.S. y Malik, N.A., *A new algorithm for two-dimensional maximum entropy power spectrum estimation*, IEEE Trans. Acoust. Speech Signal. Process., ASSP-29 (1981), pp. 401-413.

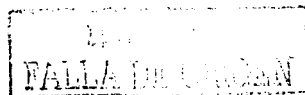
Mandelbrot, B. B., *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, New York, 1983.

Mandelbrot, B. B., y Wallis, J. R., *Noah, Joseph, and Operational Hydrology*, Water Res. Res., 4,5, 909-918, Oct. 1968.

Mandelbrot, B. B., y Wallis, J. R., *Some long-run properties of geophysical records*, Water Resour. Res., 5, 321-340, 1969a.

Mandelbrot, B. B., y Wallis, J. R., *Robustness of the rescaled range R/S in the measurement of noncyclic long-run statistical dependence*, Water Resour. Res., 5, 967-988, 1969b.

Mukhopadhyay, S., *The effect of correlation and large-scale heterogeneities on flow and transport in porous media and fractured rocks*, Ph. D. thesis, Univ. Of South Calif. Los Angeles, 1995.



Mellor, G. L., and Yamada, T. 1974. *A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers*. J. Atmos. Sci. 31:1791-806.

Naylor, A.W. and Sell G.R., *Linear operator theory in engineering and science*, Applied mathematical science, 40, Springer-Verlag, New York-Heidelberg-Berlin, 1989.

Neuman, S.P., 1994. *Generalized scaling of permeabilities: validation and effect of support scale*. Geophysical Research Letters 21 (3), 349-352.

Neuman, S. P., Winter, C. L., and Newman, C. M. 1987. Stochastic theory of field-scale Fickian dispersion in anisotropic porous media. *Water Resour. Res.* 23:453-66.

Nitsche, L.C. y Brenner, H. *Eulerian kinematics of flow through spatially periodic models of porous media*, Arch. Rational Mech. Anal., 107 (1991), pp. 225-292.

Rodríguez-Iturbe, I., Mejía, J. M., y Dawdy, D.R., *Streamflow simulation, 1, A new look at Markovian models, fractional Gaussian noise, and crossing theory*, Water Resour. Res., 8, 921-939, 1972.

Rajaram, H., y Gelhar, L. W. 1993. *Plume scale-dependent dispersion in heterogeneous aquifers. 1. Lagrangian analysis in a stratified aquifer*. Water Resour. Res. 29: 3249-60.

Rose, H. A. 1977. Eddy diffusivity, eddy noise, and subgrid-scale modelling. J. Fluid Mech. 81: 719-34.

Rubin, Y. 1991. *Transport in heterogeneous porous media: prediction and uncertainty*. Water Resour. Res. 27:1723-38.

Sahimi, M., and Mehrabi, A.R., 1995. *Unpublished Report to The National Iranian Oil Company*.

Serra, J.: *Les structures Gigognes: Morphologie Mathématique et Interpretation Métallogénique*, Mineralium Deposita (June 1968) 3, No.2, 135-54.

Sposito, G., Jury, W. A., y Gupta, V. K. 1986. Fundamental problems in the stochastic convection-dispersion model of solute transport in aquifers and field soils. *Water Resour. Res.* 22:77-88.

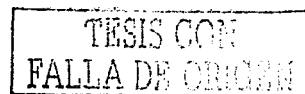
Sposito, G., y Barry, D. A. 1987. On the Dagan model of solute transport in groundwater: foundational aspects. *Water Resour. Res.* 23:1867-75

Stearns, S. 1975. *Digital signal analysis*. Rochelle Park: Hayden. 280 pp.

Tompson, A. F. B., y Gray, W. G. 1986. *A second-order approach for the modeling of dispersive transport in porous media. 1. Theoretical development.* Water Resour. Res. 22:591-9.

Yaglom, A.M., *An introduction to the theory of stationary random functions*, Dover, Mineola, NY, 1962.

Zemanian 1987. *Distribution theory and transform analysis*, Dover, Mineola, NY.



Apéndice A: filtros espaciales

La técnica de LES no involucra el uso de promedios ensamble para obtener las ecuaciones del flujo del agua subterránea en escala grande. LES aplica una operación de filtrado espacial (Leonard, 1974) a las ecuaciones primitivas del flujo para obtener las ecuaciones en escala grande. La idea es filtrar las escalas pequeñas de las variables del flujo y de las propiedades del medio, en la misma forma en que el ruido de alta frecuencia (escalas pequeñas) se filtra de una señal eléctrica.

Como un ejemplo, considérese la siguiente señal:

$$f(t) = 2\text{sen}(2\pi t) + \text{sen}(6\pi t) \quad (\text{A.1})$$

En la figura A.1 se puede observar que este senoide tiene dos escalas, una de 1 Hz y otra de 3 Hz.

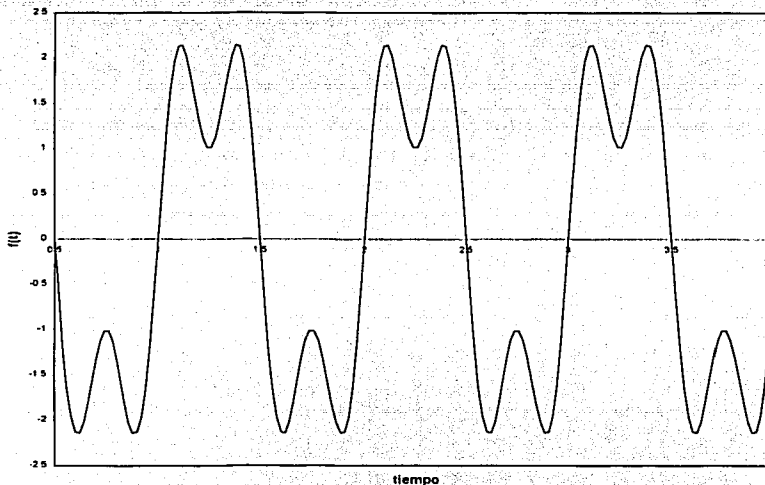


Figura A.1. Señal de entrada para un filtro de paso bajo.

En la figura A.2 se muestra el senoide filtrado con un filtro de paso bajo; es decir, que deja pasar las frecuencias bajas y elimina las frecuencias altas. La frecuencia que se obtiene es de 1-Hz, eliminándose la de 3-Hz.

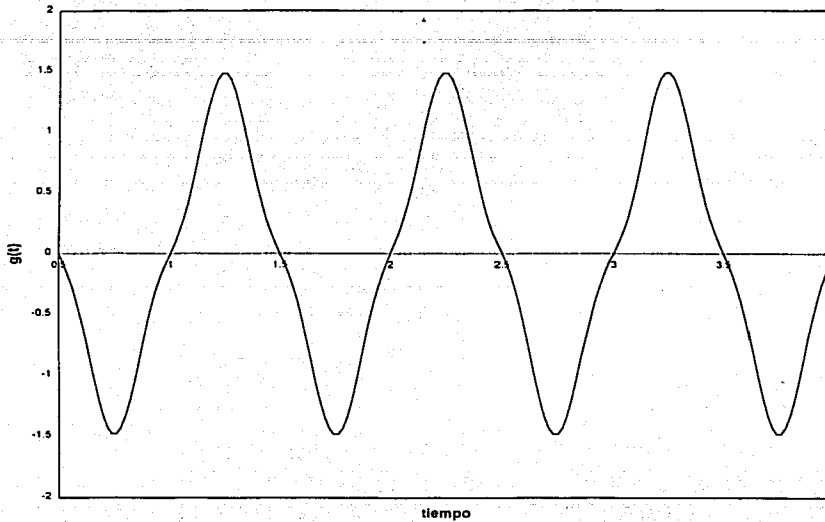


Figura A.2 Señal de salida al aplicar un filtro de paso bajo.

Un filtro en tres dimensiones se puede representar con filtros unidimensionales, tanto en el espacio de Fourier como en el espacio real respectivamente, como

$$\mathbf{G}(x) = \prod_{i=1}^3 G_i(x_i) \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{\mathbf{G}}(f) = \prod_{i=1}^3 \hat{G}_i(f_i) \quad (\text{A.3})$$

Un filtro es isotrópico si G_1 , G_2 , y G_3 son idénticos. En adelante se considerarán solamente filtros isotrópicos, aunque el análisis es esencialmente el mismo para filtros anisotrópicos (Aldama, 1992a).

Un filtro de uso común entre los investigadores del agua subterránea es el asociado con un volumen promediado (Nitsche y Brenner, 1991), el cual en una dimensión es conocido como *el filtro de caja* cuya transformada de fourier es (figura A.3 y figura A.4)

$$G(x) = \begin{cases} 1/\lambda & |x| \leq \lambda/2 \\ 0 & |x| > \lambda/2 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\hat{G}(k) = 2 \frac{\text{sen}(\lambda k/2)}{\lambda k} \quad (\text{A.5})$$

donde λ es el ancho del filtro. La ventaja de éste filtro es su simplicidad en el espacio real.

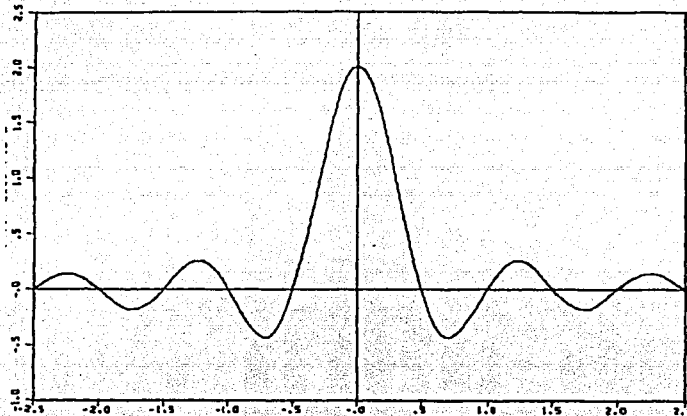


Figura A.3: Filtro ideal unidimensional adimensional, $\lambda G(x_j)$, como una función de la longitud adimensional, x_j / λ

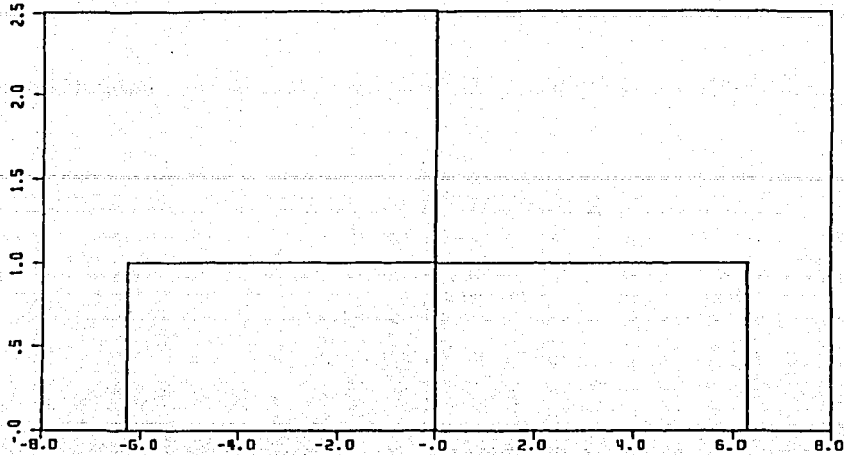


Figura A.4 Filtro ideal en el espacio de Fourier, $\hat{G}(k_x)$, como una función del número de onda adimensional, λk_x

Otro filtro que es muy popular en el medio subterráneo es el Gaussiano, el cual es similar tanto en el espacio real como en el espacio de Fourier,

$$G(x) = \left(\frac{\gamma}{\pi \lambda^2} \right)^{1/2} \exp\left\{ -\gamma x^2 / \lambda^2 \right\} \quad (\text{A.6})$$

$$\hat{G}(k) = \exp\left\{ -\frac{\lambda^2 k^2}{4\gamma} \right\} \quad (\text{A.7})$$

donde γ es una constante arbitraria. El filtro Gaussiano decae rápidamente y remueve los números de onda fuera del intervalo $[-2\pi/\lambda; 2\pi/\lambda]$.

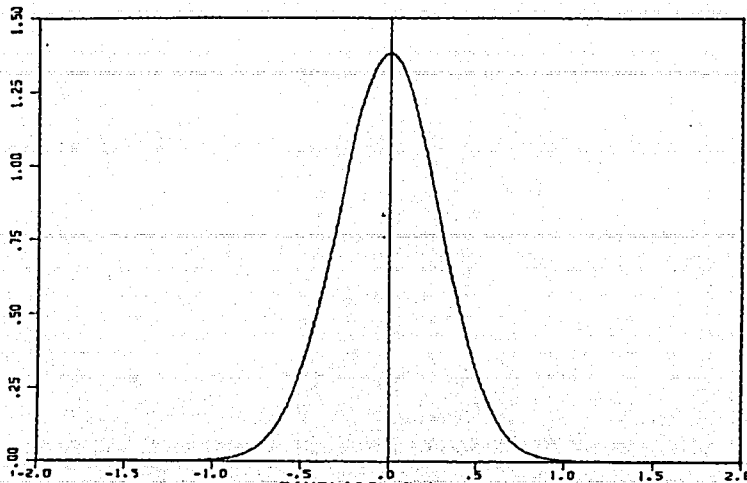


Figura A.5 Filtro Gaussiano unidimensional adimensional, $\lambda G(x_j)$, como una función de la longitud adimensional x_j/λ

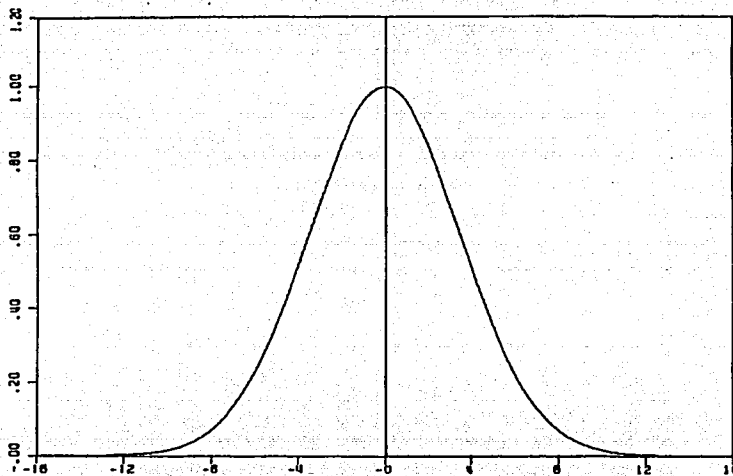


Figura A.6 Filtro Gaussiano en el espacio de Fourier, $\hat{G}(k_j)$, como una función del número de onda adimensional λk_j

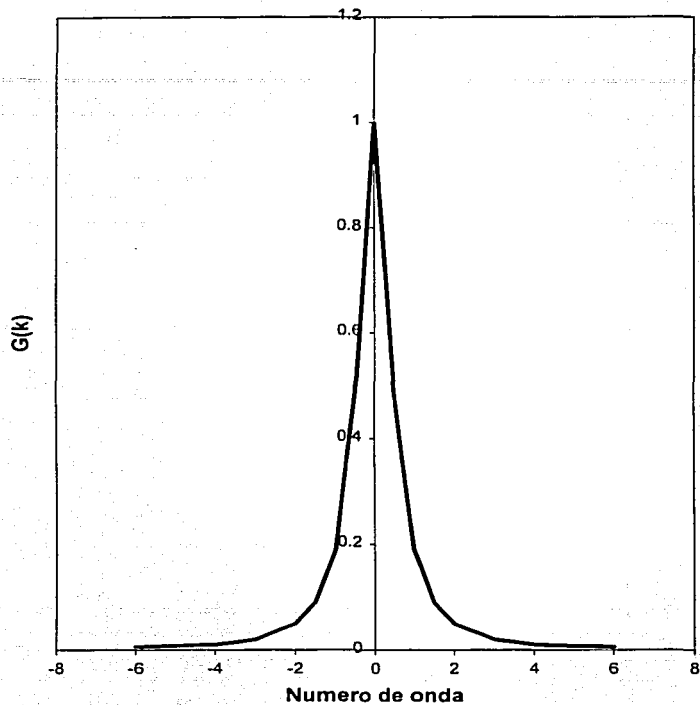


Figura A.7 Filtro de Butterworth en el espacio de Fourier, $\hat{G}(k_j)$, como una función del número de onda k_j

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice B: Antecedentes matemáticos

En este apéndice definimos las funciones de Schwartz. Se describen algunas propiedades de estas clases y se presentan los teoremas correspondientes. Esta teoría se presenta detalladamente en los libros de (Champeney, 1987; Folland, 1976; Zemanian, 1987).

B.1. Clases de Schwartz

Existen varias definiciones de la transformada de Fourier, cada una asociada con una clase distinta. La teoría es particularmente elegante y simple cuando la transformada de Fourier se restringe a las clases de Schwartz $S=S(\mathbb{R}^n)$ (Folland, 1976). Esta clase también es conocida como la clase de funciones de prueba de rápido descenso (Zemanian, 1987) y la clase de funciones buenas (Champeney, 1987). Las funciones de la clase de Schwartz, junto con sus derivadas, decrecen en el infinito mucho más rápido que cualquier potencia de x . Todas las funciones son C^∞ , infinitamente diferenciables. Aún más, una función $\phi \in C^\infty$ está en una clase de Schwartz si y sólo si, para todos los enteros no negativos (a_1, a_2, \dots, a_n) y (b_1, b_2, \dots, b_n)

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x_1^{a_1} x_2^{a_2} \dots x_n^{a_n} \frac{\partial^{b_1+b_2+\dots+b_n} \phi(x)}{\partial x_1 \partial x_2 \dots \partial x_n}| < \infty \quad (\text{B.1})$$

B.2. Propiedades de la clase de Schwartz

La clase de Schwartz es cerrada bajo diferenciación, multiplicación y convolución. Esto significa que la derivada de una función de S está en S ; el producto de funciones de S está en S , y la convolución de funciones de S está en S . Es decir, que las derivadas de todos los órdenes están limitadas. S es denso en el

espacio de Lebesgue $\zeta^p, 1 \leq p < \infty$, lo cual indica que los límites de las funciones de S convergen a funciones en ζ^p . Por último, la transformada de Fourier es un *isomorfismo* de S a S , $FT: S \rightarrow S$. Esto es, la transformada de Fourier es un mapeo lineal uno a uno, de tal forma que los elementos en S son transformados hacia S .

Restringiendo nuestro análisis a la funciones en S , se tiene la consecuencia de que la transformada de Fourier de los productos, convoluciones y derivadas, todas existen y están bien definidas. Aún más, podemos realizar estas operaciones tanto en el espacio real como en el espacio de Fourier. Podría parecer que S es una clase muy restringida; sin embargo, se puede aproximar cualquier función en $\zeta^p, 1 \leq p < \infty$ a la precisión que se quiera, usando funciones de S .

B.3. Teoremas

Las integraciones son en el sentido de Lebesgue (Champeney, 1987; Friedman, 1981). Se presentan los siguientes teoremas sin prueba:

Teorema 1. Existencia

Supóngase que $\phi \in S$. Luego la transformada de Fourier, $\hat{\phi}$ de ϕ , se puede definir en todos los reales f por

$$\hat{\phi}(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \exp(-2\pi i x \cdot f) dx \quad (\text{B.2})$$

y $\hat{\phi}$ estará en S . En cada x

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\phi}(f) \exp(2\pi i x \cdot f) df \quad (\text{B.3})$$

y denotamos que ϕ y $\hat{\phi}$ son un par de transformadas de Fourier escribiendo $\phi \leftrightarrow \hat{\phi}$.

Teorema 2. Diferenciación

Supóngase que $\phi \leftrightarrow \hat{\phi}$ es un par de funciones de Fourier en S . Para $n = 1, 2, 3, \dots$ supóngase que $\phi^{(n)}$ y $\hat{\phi}^{(n)}$ son la n th derivada de ϕ y $\hat{\phi}$: Lo siguiente son pares de Fourier en S para $n = 1, 2, 3, \dots$

$$(-2\pi i x)^n \phi(x) \leftrightarrow \hat{\phi}^{(n)}(f) \quad (\text{B.4})$$

$$\phi^{(n)}(x) \leftrightarrow (2\pi i f)^n \hat{\phi}(f) \quad (\text{B.5})$$

Teorema 3. Convolución y producto

Supóngase que $\phi \leftrightarrow \hat{\phi}$ y $\psi \leftrightarrow \hat{\psi}$ son pares de funciones de Fourier en S . Luego $\phi * \psi$, $\hat{\phi} * \hat{\psi}$, $\phi \hat{\psi}$ y $\hat{\phi} \psi$ están en S y

$$\phi * \psi \leftrightarrow \hat{\phi} \hat{\psi} \quad (\text{B.6})$$

$$\phi \hat{\psi} \leftrightarrow \hat{\phi} * \psi \quad (\text{B.7})$$

donde $\phi * \psi(x) = \int \phi(x - x') \psi(x') dx'$ denota convolución.

Teorema 4. Parseval

Supóngase que $\phi \leftrightarrow \hat{\phi}$ y $\psi \leftrightarrow \hat{\psi}$ son pares de funciones de Fourier en S .

Luego

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \psi^*(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\phi}(f) \hat{\psi}^*(f) df \quad (\text{B.8})$$

donde $(\cdot)^*$ denota conjugado complejo.

Si $\psi = \phi$ se tiene la fórmula

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\phi}(f)|^2 df \quad (\text{B.9})$$

Apéndice C: Análisis espectral

El análisis espectral se puede abordar desde un punto de vista determinístico o probabilístico. En un marco determinístico, la meta del análisis es estimar la distribución de la energía con respecto a la frecuencia, para una función de energía finita. En un marco probabilístico, se estima la distribución de la potencia con respecto a la frecuencia, para la función de autocorrelación de un proceso estocástico estacionario. El marco determinístico se desarrolla con base en la transformada de Fourier de la función de la energía finita. El marco probabilístico requiere análisis complejos y una hipótesis ergódica para que se pueda implementar en la práctica. Para las señales que se están considerando, muestreo discreto, los estimadores no paramétricos de las dos perspectivas son idénticas después de una normalización.

Considere una función determinística F que representa una cantidad física, tal como la conductividad hidráulica o el flujo del agua subterránea. Si esta función es absolutamente integrable

$$\int_{-\infty}^{\infty} |F(s)|^2 ds < \infty \quad (C.1)$$

o F tiene energía finita. En estas condiciones (Champeney [1987]), la transformada de Fourier \hat{F} de F existe y está definida por (B.1).

La densidad espectral de la energía (ESD) E_{FF} de la función determinística F se define como el cuadrado del módulo de la transformada de Fourier de la función (Kay and Marple [1981]),

$$E_{FF}(f) = |\hat{F}(f)|^2 \quad (C.2)$$

donde f representa la frecuencia. El nombre de densidad espectral de energía es motivado por el teorema de Parseval

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} |F(s)|^2 ds = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{F}(f)|^2 df \quad (\text{C.3})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} E_{FF}(f) df \quad (\text{C.4})$$

donde ε se considera como una energía positiva. La densidad espectral de la energía E_{FF} es una función que caracteriza la distribución de ε con la frecuencia.

Se puede representar un muestreo discreto F_n de la función F , multiplicando F por una secuencia de funciones de delta de Dirac centradas en puntos equidistantes. La transformada de Fourier de esta función es (Champney [1987])

$$\hat{F}^s(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} F(x) \delta(x - n\Delta x) \Delta x \right] e^{-2\pi i x f} dx \quad (\text{C.5})$$

$$= \Delta x \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} F_n e^{-2\pi i f n \Delta x} \quad (\text{C.6})$$

$$E_{FF}^s(f) = |\hat{F}^s(f)|^2 \quad (\text{C.7})$$

Los datos discretos F_n se derivan vía $F_n = wF$, donde w es una función de ventana definida en términos de la delta de Dirac en (C.5). En este punto se puede introducir la transformada de Fourier discreta para una muestra de N puntos discretos (Bracewell [1965]).

$$\hat{F}_m = \sum_{n=0}^{n=N-1} F_n e^{-2\pi i n m / N}, \quad m = 0, \dots, N-1 \quad (\text{C.8})$$

$$F_n = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{m=N-1} \hat{F}_m e^{2\pi i n m / N}, \quad n = 0, \dots, N-1 \quad (\text{C.9})$$

En esta representación, tanto la secuencia discreta F_n y la transformada de Fourier discreta \hat{F}_m son periódicas y basadas en un número finito de muestras.

La densidad espectral de energía discreta, se define como

$$E_{FF}^*(m) = |\hat{F}_m|^2 \quad (\text{C.10})$$

para $m = 0, \dots, N-1$. En general $E_{FF} \neq E_{FF}^s \neq E_{FF}^*$ debido al intervalo de muestreo finito, el cual tiene el efecto de estimar el espectro de energía de una versión truncada y una a la cual se le aplicó una ventana. Ambas E_{FF}^s y E_{FF}^* , se conocen como *periodogramas* (Kay y Marple [1981]).

En el marco probabilístico, los procesos aleatorios de energía finita en un dominio acotado tienen interpretación espectral. Un proceso aleatorio de energía finita se puede representar en una expansión ortonormal Karhunen-Loeve, en términos de un operador de covarianza (Naylor y Sell [1989]). Los valores característicos del operador de la covarianza son el espectro del proceso.

La interpretación espectral más convencional de los procesos aleatorios se aplica a procesos estacionarios. Los procesos estacionarios por lo general no tienen energía finita ni una transformada de Fourier clásica. Se ha desarrollado otra metodología definida en términos de la función de correlación R_{FF}

$$R_{FF}(x) = E[F(x+s)F(s)] \quad (\text{C.11})$$

El teorema de la representación espectral (Yaglom [1962]) relaciona la transformada de Fourier de R_{FF} a la densidad espectral (PSD)

$$S_{FF}(f) = \int_{-\infty}^{\infty} R_{FF}(x) e^{-2\pi i x f} dx \quad (\text{C.12})$$

donde S_{FF} es la densidad espectral. En la práctica R_{FF} es desconocido a priori. Por lo tanto se recurre a la hipótesis ergódica y R_{FF} en (C.11) se estima de promedios espaciales, resultando la siguiente definición de la PSD (Kay and Marple [1981])

$$S_{FF}(f) = \lim_{X \rightarrow \infty} E \left\{ \frac{1}{2X} \left| \int_{-X}^X F(x) e^{-2\pi i x f} dx \right|^2 \right\} \quad (\text{C.13})$$

donde se requiere el valor esperado y la hipótesis ergódica para lograr convergencia de S_{FF} .

Si se usa una muestra discreta F_n de F , se puede definir otro estimador como (Kay [1988])

$$S_{FF}(f) = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=0}^{N-1} F_n e^{-2\pi i n f / N} \right|^2 \quad (\text{C.14})$$

donde $-1/(2\Delta x) \leq f \leq 1/(2\Delta x)$ y $f = n / \Delta x N$.

Para reducir la varianza de este periodograma es necesario realizar promedios locales de S_{FF} en la frecuencia o promediar realizaciones múltiples.

Los estimadores del periodograma de la densidad espectral de la energía determinística y la densidad espectral de la potencia difieren solamente por una constante de normalización $1/N$. La interpretación del periodograma se puede interpretar ya sea en el marco probabilístico o determinístico. Sin embargo, la entrada de datos se adapta a la interpretación que se busca. Si se adopta una perspectiva probabilística, las componentes determinísticas o no estacionarias se remueven.

También existen otros estimadores que se basan en un modelo que tiene una forma de densidad espectral de potencia. La estimación de la PSD se reduce a un ajuste de parámetros. Estos métodos paramétricos han producido mejores estimaciones con menos datos que el periodograma (Kay[1988]). La mejora en las estimaciones se logra al usar todos los datos para estimar unos pocos parámetros. En este sentido, un periodograma toma N datos y ajusta un modelo con N parámetros. Esta es una de las razones por la que la estimación de un periodograma se debe suavizar.

La ventaja de un periodograma es que es un estimador no paramétrico sin suposiciones en la forma del modelo y que se calcula con mucha facilidad usando una Transformada Rápida de Fourier. Los métodos paramétricos pueden producir sistemas lineales de ecuaciones que para campos grandes puede significar un esfuerzo computacional muy considerable (Lim y Malik [1981]).

Los temas más importantes en relación al uso de periodogramas son el control del drenado espectral y la reducción de la varianza de la estimación. El drenado espectral resulta de la ventana de caja de una muestra de datos finita. Esto tiene el efecto que la potencia de una frecuencia dada drena hacia una frecuencia vecina y contamina la estimación. La varianza del periodograma no se puede

reducir incluyendo más datos porque entonces se necesitaría estimar más parámetros. Es común que el drenado se controle multiplicando los datos originales por una ventana que tiene mejores características de drenado (Harris [1978]).

Debido a que los campos que se analizan son bidimensionales, las densidades espectrales son funciones de dos coordenadas en la frecuencia. Dado que es más fácil comparar una representación unidimensional que una bidimensional, se integran la densidad bidimensional sobre la magnitud en frecuencia para producir una componente isotrópica unidimensional

$$E(f) = \int_0^{2\pi} S(f, \theta) f d\theta \quad (\text{C.15})$$

$$f \equiv (f_1^2 + f_2^2)^{1/2} \quad (\text{C.16})$$

donde S es la densidad espectral de la potencia y θ es una coordenada de frecuencia radial. Esto es análogo a la definición del espectro de energía que se usa en la teoría de la turbulencia (Beran [1968]). Sin embargo, la función $E(f)$ solamente se puede interpretar como la estadística de la densidad espectral de la potencia bidimensional.

Apéndice D: Espectro de la simulación condicional

La metodología geoestadística consiste en interpretar la distribución espacial de la variable verdadera $Z_o(x)$, como una realización particular de una función aleatoria $Z(x)$. Una simulación consiste en tomar una realización $Z_s(x)$ de esta función aleatoria $Z(x)$.

Considere el valor verdadero $Z_o(x)$ y su valor kriging $Z_{oK}(x)$ deducido de los datos conocidos. Estos dos valores difieren por un error desconocido:

$$Z_o(x) = Z_{oK}(x) + [Z_o(x) - Z_{oK}(x)] \quad (D.1)$$

Considere una realización $Z_s(x)$. Cuando se aplica kriging a la misma configuración de datos disponible, se produce un error kriging $[Z_s(x) - Z_{sK}(x)]$ isomórfico al verdadero error $[Z_o(x) - Z_{oK}(x)]$ e independiente de $Z_{oK}(x)$.

Donde isomórfico significa que tienen el mismo valor esperado y los momentos de segundo orden son iguales.

Para obtener una simulación condicional, el error kriging desconocido $[Z_o(x) - Z_{oK}(x)]$ se reemplaza por el error $[Z_s(x) - Z_{sK}(x)]$ (Journel, 1978),

$$Z_{sc}(x) = Z_{oK}(x) + [Z_s(x) - Z_{sK}(x)] \quad (D.2)$$

Considérense los valores numéricos $Z_{sc}(x)$ y $Z_{sc}(x+h)$, en dos puntos x y $x+h$. La variabilidad entre estas dos cantidades es caracterizada por el

variograma $2\gamma(x, h)$, el cual se define como el valor esperado de la variable aleatoria $[Z_{sc}(x) - Z_{sc}(x+h)]^2$,

$$2\gamma(x, h) = E\{[Z_{sc}(x) - Z_{sc}(x+h)]^2\} \quad (D.3)$$

Substituyendo los puntos x y $x+h$ en (D.2)

$$Z_{sc}(x) = Z_{oK}(x) + [Z_s(x) - Z_{sK}(x)] \quad (D.4)$$

$$Z_{sc}(x+h) = Z_{oK}(x+h) + [Z_s(x+h) - Z_{sK}(x+h)] \quad (D.5)$$

Substituyendo (D.4) y (D.5) en (D.3)

$$2\gamma(x, h) = E\{[(Z_{oK}(x) + [Z_s(x) - Z_{sK}(x)]) - (Z_{oK}(x+h) + [Z_s(x+h) - Z_{sK}(x+h)])]^2\} \quad (D.6)$$

rearrreglando términos

$$2\gamma(x, h) = E\{[Z_{oK}(x) - Z_{oK}(x+h)]^2 + E\{([Z_s(x) - Z_{sK}(x)] - [Z_s(x+h) - Z_{sK}(x+h)])^2\} \quad (D.7)$$

la ecuación (D.7) representa el variograma de la simulación condicional

Por otro lado considérese la función aleatoria Z_o en los puntos x y $x+h$. El variograma de esta función es igual a

$$2\gamma(x, h) = E\{[Z_o(x) - Z_o(x+h)]^2\} \quad (D.8)$$

Substituyendo los puntos x y $x+h$ en (D.1)

$$Z_o(x) = Z_{oK}(x) + [Z_o(x) - Z_{oK}(x)] \quad (D.9)$$

$$Z_o(x+h) = Z_{oK}(x+h) + [Z_o(x+h) - Z_{oK}(x+h)] \quad (D.10)$$

Substituyendo las expansiones en el variograma (D.8)

$$2\gamma(x, h) = E\{[Z_{oK}(x) - Z_{oK}(x+h)]^2 + E\{([Z_o(x) - Z_{oK}(x)] - [Z_o(x+h) - Z_{oK}(x+h)])^2\} \quad (D.11)$$

reemplazando el error kriging desconocido $[Z_o(x) - Z_{oK}(x)]$ por un error kriging isomórfico e independiente $[Z_s(x) - Z_{sK}(x)]$, el variograma es igual a

$$2\gamma(x, h) = E\{[Z_{oK}(x) - Z_{oK}(x+h)]^2 + E\{([Z_s(x) - Z_{sK}(x)] - [Z_s(x+h) - Z_{sK}(x+h)])^2\} \quad (D.12)$$

La ecuación (D.12) representa el variograma de la función Z_o , la cual es igual a la ecuación (D.7) que representa el variograma de la función Z_{sc} .

Por lo tanto, el variograma de la función verdadera Z_o y el variograma de la simulación condicional Z_{sc} son iguales.

La siguiente ecuación establece la relación entre el variograma y la covarianza (Armstrong, 1998)

$$\gamma(h) = C(0) - C(h) \quad (D.13)$$

Así mismo,

$$C(0) = \sigma^2 \quad (D.14)$$

donde σ^2 representa la varianza

Dado que los variogramas de la función verdadera y la simulación condicional son iguales, por lo tanto

$$\sigma_o^2 - C_o(h) = \sigma_{sc}^2 - C_{sc}(h) \quad (D.15)$$

Condicionando a que las varianzas sean iguales $\sigma_o^2 = \sigma_{sc}^2$

$$C_o(h) = C_{sc}(h) \quad (D.16)$$

Por lo tanto, la covarianza de la función verdadera Z_o y la covarianza de la simulación condicional Z_{sc} son iguales.

La covarianza también se puede expresar como la Transformada de Fourier Inversa del espectro de energía (Gelhar, 1993)

$$C(h) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega h} S(\omega) d\omega \quad (D.17)$$

Substituyendo (D.17) en (D.16)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega h} S_o(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega h} S_{sc}(\omega) d\omega \quad (D.18)$$

Por lo tanto, el espectro de la función verdadera Z_o y el espectro de la simulación condicional Z_{sc} son iguales.