UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

CENTRO INTERAMERICANO DE RECURSOS DEL AGUA



"IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA DEL MÉTODO EULERIANO-LAGRANGIANO DEL ADJUNTO LOCALIZADO (ELLAM) EN DOS DIMENSIONES"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS DEL AGUA

P R E S E N T A

HUMBERTO SALINAS TAPIA

DIRECTOR DE TESIS: Dr. JAIME MAX GÁRFIAS SOLIZ

TOLUCA, MÉXICO OCTUBRE 1999

Universidad Autónoma del Estado de México
UAEM *Facultad de Ingeniería*

Ciudad Universitaria, Toluca, Méx., a 20 de septiembre de 1999.

Ing. HUMBERTO SALINAS TAPIA
P r e s e n t e.

En contestación a su solicitud transcribo a continuación el tema que, aprobado por esta Dirección propuso el Dr. Jaime Max Garfias Soliz, con el fin de que lo desarrolle como Tesis para la presentación de su Examen de Grado de la **MAESTRIA EN CIENCIAS DEL AGUA.**

"IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA DEL MÉTODO EULERIANO -LAGRANGIANO DEL ADJUNTO LOCALIZADO (ELLAM) EN DOS DIMENSIONES"

CAPITULO I	INTRODUCCION
CAPITULO II	ECUACIONES DE FLUJO Y TRANSPORTE EN MÚLTIPLES FASES
CAPITULO III	METODO DEL ADJUNTO LOCALIZADO
CAPITULO IV	MÉTODOS DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN LA ZONA SATURADA
CAPITULO V	SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE FLUJO EN LA ZONA NO SATURADA
CAPITULO VI	SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN ADVECCIÓN-DISPERSIÓN EN UNA DIMENSIÓN
CAPITULO VII	SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN ADVECCIÓN-DISPERSIÓN EN DOS DIMENSIONES
CAPITULO VIII	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES
	BIBLIOGRAFIA

Asimismo, para la aprobación de la Tesis y demás trámites deberá sujetarse al Reglamento respectivo de esta Institución.

A T E N T A M E N T E
"PATRIA, CIENCIA Y TRABAJO"
"1999, XXX Aniversario Luctuoso del Lic. Adolfo López Mateos"

M. en I. ÁNGEL ALBITER RODRÍGUEZ
D I R E C T O R

FACULTAD DE INGENIERIA

c.c.p. Archivo.

DEDICATORIAS

A MIS PADRES

JOSÉ SALINAS MARTÍNEZ
JUANA TAPIA REYES

Con cariño, admiración, respeto, por brindarme todo su apoyo, por guiarme en el camino correcto y por tener plena confianza en mí.

A MIS HERMANOS

LAURO, SUSANA, L. HERIBERTO, JACOBA, J. MIGUEL, M. ANTONIO, JUAN JOSÉ, y A. ALEJANDRO

Por su apoyo incondicional.

A MIS SOBRINOS

AL Dr. JAIME GÁRFIAS SOLIZ

Porque confío en mi y por la disposición de dirigir esta tesis.

A MI NOVIA

JUANA CORTÉS GARCÍA

Por tu compañía, por la confianza, el apoyo y amor que me has brindado.

A MI AMIGA

Lic. RUTH HERNÁNDEZ PÉREZ

Por su amistad incomparable y por todo el apoyo brindado en la realización de esta tesis.

A MIS AMIGOS PERO EN ESPECIAL A:

Ing. *JOSÉ FLORES MORÁN*

AGRADECIMIENTOS

AL CONACyT

Por el apoyo recibido en la realización de esta tesis, con el proyecto No. 0390B-T CONACyT. "Muchas Gracias"

A LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO

Por el apoyo recibido en la realización de la Maestría. "Muchas Gracias"

AL CENTRO INTERAMERICANO DE RECURSOS DEL AGUA

Por las facilidades otorgadas para la realización de la Maestría en Ciencias del Agua. "Muchas Gracias"

AL Dr. JAIME GÁRFIAS SOLIZ

Por todo el apoyo brindado, por tener plena confianza, por la paciencia y disposición de dirigir esta tesis, así como por todos los conocimientos compartidos sin barreras. "Muchas Gracias"

A LA Lic. RUTH HERNÁNDEZ PÉREZ

Por la paciencia al revisar la tesis, y por sus sabios consejos en cuestión de redacción y ortografía. "Muchas Gracias"

A LA C.P. M. MERCEDES GONZALES PINEDA

Por el apoyo brindado en la revisión ortográfica de la tesis. "Muchas Gracias"

RESUMEN

En los últimos años ha cobrado gran importancia la contaminación de los acuíferos, por lo que, ha puesto de manifiesto el estudio del transporte de contaminantes, principalmente los métodos de solución de las ecuaciones que rigen este fenómeno. En este trabajo se plantean las ecuaciones que describen el comportamiento del flujo del agua subterránea, en múltiples fases. En una fase se considera únicamente el agua como fluido (zona saturada), en dos fases se considera además del agua la fase aire, generando un sistema en múltiples fases (zona no saturada). Estas ecuaciones son planteadas en una dimensión para la zona saturada, y en una y dos dimensiones para la zona no saturada. El objetivo principal de este trabajo, es la implementación numérica de la ecuación de transporte de contaminantes en múltiples fases, la cual es planteada primeramente en una dimensión para la zona saturada, y posteriormente, en una y dos dimensiones para la zona no saturada.

Existen diferentes métodos numéricos utilizados en la solución de la ecuación de transporte en la zona saturada; tales como el método de Diferencias Finitas, el método del Elemento Finito, el método de Características y el método Modificado de Características; los cuales presentan buenas soluciones respetando el criterio del número de Courant y de Peclet. Por otra parte, se ha realizado la reducción de orden de la ecuación de transporte mediante una transformación de coordenadas, cuya solución es obtenida aplicando el método del Adjunto Localizado; los métodos antes mencionados, no presentan la propiedad de conservación de masa, por lo que, el método que presenta está propiedad es el método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado, el cual realiza un tratamiento sistemático de las fronteras que son integradas en el esquema numérico en forma sencilla.

Para la solución de la ecuación de transporte en la zona no saturada, se describen dos métodos: el método del Elemento Finito de Galerkin (FEM), utilizando una integración reducida con la opción "*Lumped*", y el método Euleriano Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM). Cada uno de estos métodos son aplicados a una y dos dimensiones. El método del Elemento Finito, para incrementos de tiempo grandes, presenta deterioro en la solución, además de no tener la propiedad de conservación de masa. Estas deficiencias no se presentan en el método ELLAM cuya propiedad principal es la conservación de masa, debido a que realiza un tratamiento sistemático de las fronteras, además no está restringido por el número de Courant y Peclet en la discretización de las mallas. En dos dimensiones, el método ELLAM aplicado a la ecuación en la forma conservativa, no presenta ventaja con respecto a FEM, sin embargo, con la aplicación de la combinación de la forma conservativa y no conservativa, el método (ELLAM) presenta mayor ventaja en la conservación de masa, y en el esfuerzo computacional.

ÍNDICE

Capítulo I

INTRODUCCIÓN 1

1.1. Origen y distribución del agua subterránea 2
1.2. Poblemática de la contaminación 4
1.3. Estado de la investigación 15
1.4. Objetivo Principal 18
1.5. Objetivos específicos 18
1.6. Metodología 19

Capítulo II

ECUACIONES DE FLUJO Y TRANSPORTE EN MÚLTIPLES FASES 21

2.1. Introducción 21
2.2. Ecuaciones de Flujo en múltiples fases 22
2.2.1. Ley de darcy 24
2.2.2. Relaciones constitutivas. 26
2.2.2.1. Relación saturación-presión 27
2.2.2.2. Relación permeabilidad relativa-saturación y presión-saturación 27
2.2.3. Formulación de la ecuación de doble presión 29
2.2.4. Formulación de la ecuación de presión-saturación 31
2.2.4.1. Ecuación de presión 32
2.2.4.2. Ecuación de saturación 33
2.3. Ecuación de transporte en múltiples fases 34
2.3.1. Partición del contaminante 37
2.3.2. Sorción. 37
2.3.3. Equilibrio vapor-líquido 39
2.3.4. Transferencia de masa en equilibrio 39
2.3.5. Transferencia de masas en no equilibrio 40

Capítulo III

MÉTODO DEL ADJUNTO LOCALIZADO 42

3.1. Introdución 42
3.2. Formulación del método del Adjunto Localizado (LAM) 43
3.3. Formulación variacional del método LAM 47
3.4. Ejemplos ilustrativos 51
3.4.1. Algoritmo 1. El valor de la función y su derivada 59
3.4.2. Algoritmo 2. El valor de la función únicamente 60
3.4.3. Construcción de las funciones de peso 60

Capítulo IV

MÉTODOS DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE EN LA ZONA SATURADA 63

4.1. Introducción 63
4.2. Método de Diferencias Finitas 65
4.3. Método de Características (MOC) 68
4.4. Método Modificado de Características (MMOC) 71
4.5. Ejemplo 1 72
4.6. Ejemplo 2 76
4.7. Método Euleriano-Lagrangiano de Adjunto Localizado (ELLAM) 80
4.8. Ejemplo 3 88
4.9. Reducción del orden de la ecuación de advección-difusión 94
4.10. Ejemplo 4 100

Capítulo V

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE FLUJO EN LA ZONA NO SATURADA 104

5.1. Introducción 104
5.2. Solución numérica de la ecuación de flujo en una dimensión 106
5.2.1. Esquema de la iteración de Picard 106
5.2.2. Discretización espacial utilizando el Método del Elemento Finito de Galerkin 109
5.2.3. Esquema concentrado en el tiempo (Esquema "*Lumped*") 113
5.2.4. Condiciones de frontera 115
5.2.5. Balance de masa 117
5.3. Solución numérica de la ecuación de flujo en dos dimensiones 118
5.3.1. Definición del elemento patrón y funciones base. 120
5.3.2. Integrales elementales 122
5.3.3. Esquema "*Lumped*" 125
5.3.4. Condiciones de Frontera 126
5.4. Ejemplo numérico en una dimensión 127
5.5. Ejemplo numérico en dos dimensiones 136

Capítulo VI

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN ADVECCIÓN-DISPERSIÓN EN UNA DIMENSIÓN 141

6.1. Introducción 141
6.2. Método del Elemento Finito 143
6.2.1. Esquema "*Lumped*" del método del elemento finito (FEM) 148
6.2.2. Analisis de Fourier 149
6.3. Método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) 151
6.3.1. Formulación de la ecuación 151
6.3.2. Implementación de método ELLAM 154

6.3.3. Definición de subdominios y funciones de peso. 157
6.3.4. Funciones base 160
6.3.5. Integrales interiores 162
6.3.6. El subdominio como volumen de control y balance de masa en ELLAM 165
6.3.7. Integrales temporales 166
6.3.8. Término de dispersión 167
6.3.9. Condiciones de frontera. 168
6.3.10. Balance de masa. 169
6.4. Resultados númericos en una dimensión 170

Capítulo VII

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN ADVECCIÓN-DISPERSIÓN EN DOS DIMENSIONES 183

7.1. Introducción 169
7.2. Solución de la ecuación de transporte en dos dimensiones por el método del Elemento Finito (FEM) 184
7.2.1. Integrales elementales 186
7.2.2. Esquema "*Lumping*" en la componente espacial 190
7.2.3. Análisis de Fourier de la ecuacion de transporte en dos dimensiones. 191
7.2.4. Balance de masa 193
7.3. Solución de la ecuación de transporte en dos dimensiones por ELLAM 194
7.3.1. Formulación ELLAM 194
7.3.2. Definicion de subdominios 195
7.3.3. Definición de funciones prueba y test 197
7.3.4. Integrales al interior 201
7.3.5. ELLAM como volumen de control. 202
7.3.6. Implementación numérica de la ecuación de tranporte en forma conservativa, utilizando ELLAM en dos dimensiones 203
7.3.7. Integrales temporales 204
7.3.8. Esquema "*Lumping*" en el método ELLAM 207
7.3.9. Término de dispersión 208
7.3.10. Condiciones de frontera 209

7.3.11. Formulación de la ecuación de transporte en su forma no conservativa utilizando el método ELLAM. 214
7.4. Resultados numéricos en dos dimensiones 215

Capítulo VIII

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES 225

BIBLIOGRAFÍA 228

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Procesos del ciclo hidrológico....2

Figura 1.2. Clasificación de acuíferos....3

Figura 1.3. Fuentes de contaminación del agua subterránea....5

Figura 1.4. Representación esquemática de la contaminación en múltiples fases....12

Figura 2.1. Estructura conceptual de la zona no saturada....22

Figura 2.2. Esquematización del transporte de contaminantes en múltiples fases....35

Figura 3.1. Definición del dominio de solución....43

Figura 3.2. Representación esquemática de las funciones de peso $w^i(x)$....56

Figura 4.1. Discretización de la malla para el método de Diferencias Finitas....67

Figura 4.2. Ilustración del Método Modificado de Características....72

Figura 4.3. Comparación de la solución de la ecuación de transporte mediante el método analítico y numérico, (a) y (b), t=10 días, (c) y (d), t= 5e-5 días....75

Figura 4.4. Conceptualización del modelo en 1 dimensión para los métodos MOC y MMOC....76

Figura 4.5. Comparación de la solución analítica y numérica de la ecuación de transporte de contaminantes dominada por advección, para un tiempo, t=0.8 días, con diferentes incrementos de tiempo en la solución (a) Δt=0.001, (b) Δt =0.027, (c) Δt =0.057 y (d) Δt =0.08....78

Figura 4.6. Comparación de la solución analítica y numérica de la ecuación de transporte de contaminantes dominado por dispersión, para un tiempo, t=0.8 días, con diferentes incrementos de tiempo en la solución (a) Δt=0.001, (b) Δt =0.027, (c) Δt =0.057 y (d) Δt =0.08....79

Figura 4.7. (a) Funciones Test generales al interior, y (b) definiciones geométricas asociadas....86

Figura 4.8. (a) Función Test $w_i^{n+1}(x,t)$ y (b) definición geométrica asociada....87

Figura 4.9. Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica al interior del dominio....91

Figura 4.10. Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica en la frontera de entrada de flujo. 92

Figura 4.11. Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica en la frontera de salida de flujo. 93

Figura 4.12. Comparación de la solución mediante el método del adjunto localizado de la ecuación transformada 101

Figura 5.1. Funciones base. 111

Figura 5.2. Transformación de coordenadas desde el sistema de coordenadas global (x,y) al local (ξ,η) 121

Figura 5.3. Funciones base ϕ_3 121

Figura 5.4. Representación esquemática de la columna de experimentación (Touma y Vauclin, 1986) 130

Figura 5.5. Comportamiento del flujo para diferentes tiempo considerando Δt=1 s, a). Flujo de agua, b). flujo de aire 132

Figura 5.6. Comportamiento de las cargas de presión para diferentes tiempos, considerando Δt=1 s. a). Flujo de agua, b). Flujo de aire 133

Figura 5.7. a).- Comparación de las cargas de presión de agua y aire, b).- Comportamiento del contenido de humedad para diferentes tiempos 134

Figura 5.8. a).- Infiltración acumulada en diferentes tiempos b).- Comportamiento de la conservación de masa 135

Figura 5.9. Discretización espacial y representación de las condiciones iniciales y de frontera, considerando infiltración desde la fuente en forma uniforme. 138

Figura 5.10. Comportamiento de las cargas de presión (cm) para t= 25 horas a) Agua, b). Aire 139

Figura 5. 11. a). Comparación del contenido de humedad (color), con el comportamiento del flujo del aire (líneas) b). Comparación de las cargas de presión de aire (líneas) y del agua (color) 140

Figura 6.1. Discretización del dominio de solución 144

Figura 6.2. Discretización del dominio $\Omega_{x,t}$ en subdominios de solución 153

Figura 6.3. Ejemplo de la función c, donde la segunda derivada es integrable. Las flechas con cabeza sólida representan la función Delta 159

Figura 6.4. Definición de la función Test w_i 161

Figura 6.5. Definición de la Función Prueba o Base (ϕ) 161

Figura 6.6. Modificación del subdominio Ω_i para las fronteras de entrada de flujo. 164

Figura 6.7. Modificación del dominio para la fronteras de salida de flujo..... 164

Figura 6.8. Subdominio Ω_i como volumen de control. 165

Figura. 6.9. Representación esquemática de la columna de experimantación (Touma y Vauclin , 1986) 173

Figura 6.10. Comportamiento de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes con diferentes incrementos de tiempo Δt, aplicando el método FEMM para un tiempo de simulación de 1000 seg y Δz=1.0 cm; a). Δt=1-100 seg. b). Δt=100- 1000 seg..... 177

Figura 6.11. Comportamiento de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes con diferentes incrementos de tiempo Δt, aplicando el método ELLAM para un tiempo de simulación de 1000 seg y Δz=1.0 cm; a). Δt=1-100 seg. b). Δt=100- 1000 seg..... 178

Figura 6.12. Comportamiento de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes con diferentes incrementos de tiempo Δt, aplicando el método FEM para un tiempo de simulación de 1000 seg y Δz=0.2 cm; a). Δt=1-100 seg. b). Δt=100- 1000 seg..... 179

Figura 6.13. Comportamiento de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes con diferentes incrementos de tiempo Δt, aplicando el método ELLAM para un tiempo de simulación de 1000 seg y Δz=0.2 cm; a). Δt=1-100 seg. b). Δt=100- 1000 seg..... 180

Figura 6.14. Comparación de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes entre los métodos FEM y ELLAM, con diferentes incrementos de tiempo Δt y tiempo de simulación de 1000 seg; a). Δz=1 cm. b). Δz=0.2 cm..... 181

Figura 6.13. Balance de masa de la solución numérica de la ecuación de transporte de contaminantes, para FEM y ELLAM. a). Balance de masa para flujo. b). Balance de masa para concentración..... 182

Figurra 7.1. Discretización del dominio de solución. 185

Figura 7.2. Ejemplo de los subdominios en t^{n+1} para nodos en esquina, laterales y al interior. 198

Figura 7.3. Definición del subdominio Ω_i . El dominio es rectangular en t^{n+1}, pero puede ser irregular en t^n. 199

Figura 7.4. Definición del subdominio Ω_i que intersecta la frontera del dominio $\Omega_{x,t}$ 199

Figura 7.5. Modificación del subdominio para las salidas de flujo. 200

Figura 7.6. Conservación de masa en el subdominio de salida de flujo 203

Figura 7.7. Localización de los puntos del subdominio para la subrutina del proceso regresivo 206

Figura 7.8. División de un subdominio dentro de segmentos a lo largo de las fronteras entre elementos. 210

Figura 7.9. Lados del subdominio mostrando los puntos que corresponden a la figura 7.6. El área marcada ilustra el plano usado para definir la normal del lado. 213

Figura 7.10. Valor nodal de c en t^{n+1} apareciendo en la aproximación del término de dispersión para el subdominio j. 213

Figura 7.11. Discretización espacial del medio y representación de las condiciones iniciales y de frontera, considerando infiltración desde la fuente en forma uniforme. 216

Figura 7.12. Comportamiento de los contaminantes en la zona no saturada, para t=25 hrs a). combinación FEM conservativo-no-conservativo, b) FEM sin la combinación conservativo-no-conservativo 220

Figura 7.13. Comportamiento del contaminantes en la zona no saturada, para t=25 hrs a). combinación ELLAM conservativo-no-conservativo, b) ELLAM sin la combinación conservativo-no-conservativo 221

Figura 7.14. Comparación de la solución con y sin combinación conservativa/no-conservativa de la ecuación de transporte de contaminantes en la zona no saturada, para t=25 hrs a). FEM, b) ELLAM 222

Figura 7.15. Comparación de la solución de la ecuación de transporte de contaminantes en la zona no saturada, para t=25 hrs, con los métodos FEM y ELLAM a). Combinación Conservativa/no-conservativa, b) Sin combinación Conservativa/no-conservativa. 223

ÍNDICE DE CUADROS

Cuadro 1.1. Limites permisibles del agua para consumo humano en *mg/l* 6

Cuadro 1.2. Procesos importantes en el transporte de contaminantes disueltos 9

Cuadro 1.3. Propiedades físicas y químicas de algunos compuestos (contaminantes) 13

Cuadro 4.1. Principales ventajas y desventajas de los diferentes métodos de solución 102

Cuadro 6.1. Ventajas y desventajas de los métodos FEM y ELLAM en la solución de la ecuación de transporte en una dimensión en la zona no saturada 176

Cuadro 7.1. Ventajas y desventajas de los métodos FEM y ELLAM en la solución de la ecuación de transporte en dos dimensiones en la zona no saturada 220

SIMBOLOGÍA

A1, A2	cantidad de masa en los niveles de tiempo correspondiente
B1, B2	flujo a través de las fronteras
c	concentración del contaminante
$CMAX$	concentración máxima
$CMIN$	concentración mínima
Cu	número de Courant
C_w	contenido de humedad específica.
$\hat{C}_w$	aproximación numérica de C_w
D	coeficiente de dispersión
D^*	coeficiente de dispersión efectivo
D1,D2	flujo difusivo
DCCELL	gradiente de concentración
D_d	coeficiente de difusión molecular
dS	diferencial de línea
E	número de intervalos
F_α	fuentes o sumideros de fluido en la fase α.
g	aceleración de la gravedad.
H(x)	función de Heaviside
H_w y H_a	aproximaciones numéricas de las cargas de presión h_w y h_a
h_w y h_a	cargas de presión
i,j	índices para los nodos
J	Jacobiano
K	tensor de permeabilidad absoluto
k	tensor de permeabilidad intrínseca del medio
$k_{r\alpha}$	permeabilidad relativa de la fase α
l	longitud y ancho del dominio
L	operador diferencial
L^*	adjunto del operador L
m	nivel de iteración

n	porosidad
n	índice del tiempo
N	número de puntos
n	vector normal
Nc	valor truncado del número de Courant
P, B, J, Q^*, C^*, K^*	funciones bilineales
Pe	número de Peclet
p_α	presión del fluido α,
q_α	flujo volumétrico (flujo de Darcy) de la fase α,
R	término de reacciones químicas,
S_α	saturación de la fase α,
t	tiempo
t^*	tiempo en la intersección de la frontera
u	solución aproximada
$\underline{\mathbf{v}}$	vector velocidad
v	velocidad
$w(x)$	función de peso
x,z	coordenada espacial
Δt	incremento de tiempo
Δx	incremento de espacio
Θ_w	aproximación numérica del contenido de humedad
Ω	dominio de solución
α	fase de aplicación (aire (a) y agua (w))
$\delta(x)$	función Delta de Dirac
$\phi(x)$	función base
λ_α	grado de reacción de la fase α
μ_α	viscosidad dinámica del fluido α
θ_w	contenido de humedad
θ_α	contenido de flujo volumétrico en la fase α
ρ_{ow}	densidad del agua a presión y temperatura estándar
ρ_α	densidad de la fase α
τ	tortuosidad del medio poroso

φ	ángulo
∇	gradiente
$x_l^i(t),\ x_c^i(t),\ x_r^i(t)$	funciones características
z_1^e y z_2^e	coordenadas de las fronteras de un elemento
R_∂ y R_Σ	funciones bilineales
$\partial\Omega$	frontera del dominio
Σ	frontera del subdominio
x_i^*	punto de integración en t^n
x_i	punto de integración en t^{n+1}
ρ	densidad del fluido
α_L y α_T	representan las dispersividad longitudinal y transversal
(x,z)	coordenadas del sistema global
(ξ,η)	coordenadas del sistema local

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Existe una creciente preocupación mundial por los efectos negativos del desarrollo económico sobre los recursos hídricos. El abasto fijo mundial de agua en todas sus formas (vapor, líquido y sólido) es enorme. Sin embargo, sólo una pequeña fracción de la misma está disponible como agua dulce, y ésta se encuentra distribuida de manera poco uniforme. Un 97% del volumen de agua en la tierra se encuentra en los mares y océanos, el cual es inutilizable para las actividades humanas y para la mayor parte de los procesos industriales, excepto para los procesos de enfriamiento.

El 3% restante es agua dulce, de la cual un 2.997% se encuentra en los polos y glaciares en forma de hielo, o es agua subterránea situada a demasiada profundidad, por lo que resulta demasiado costoso extraerla. Esto significa que sólo un 0.003% del volumen de agua total en la tierra es de fácil acceso y se encuentra en lagos, humedad del suelo, agua subterránea aprovechable, vapor de agua atmosférico y corrientes fluviales. En la actualidad, una cuarta parte de los países del mundo sufren escasez de agua dulce.

Si el problema de la cantidad es un asunto preocupante, la calidad constituye un problema mayor. Tal vez la primera pregunta sea: ¿qué es un contaminante del agua?. Tendemos a aceptar la noción de que un contaminante del agua es cualquier organismo vivo, mineral o compuesto químico cuya concentración limita o impide los usos benéficos del agua

(Sagardoy, 1992). Esta noción de contaminante entraña el hecho de que pueda aceptarse un cierto nivel de contaminación, siempre que no obstaculice los usos benéficos del agua.

1.1. ORIGEN Y DISTRIBUCIÓN DEL AGUA SUBTERRÁNEA

El origen del agua subterránea es uno de los problemas que más ha preocupado al hombre desde los tiempos más remotos, además es considerada como el agua contenida en suelos y formaciones geológicas. El agua subterránea proviene de la infiltración directa en el terreno debido a las lluvias, a la fusión de la nieve e indirectamente de los ríos y lagos; ésta se introduce hacia las zonas profundas del subsuelo para ser almacenada como agua subterránea y después aflorar en manantiales, ríos o en los océanos. El agua, antes de internarse en el subsuelo, debe tener una circulación entre el océano, los cuerpos de agua superficiales, la atmósfera y la tierra, referida al ciclo hidrológico (figura 1.1).

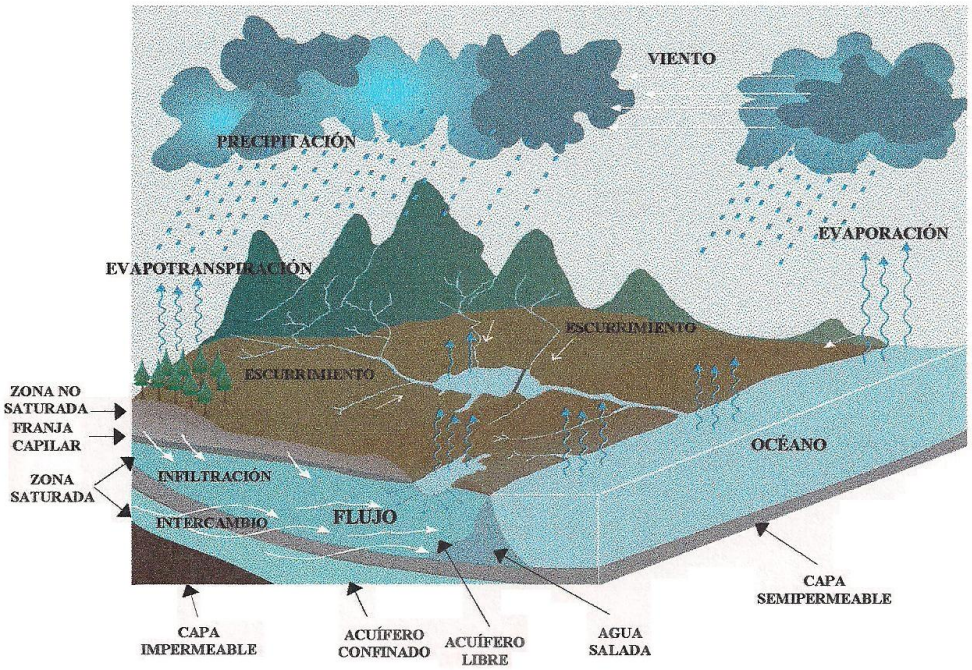


Figura 1.1. *Procesos del ciclo hidrológico*

El agua que no es retenida en la superficie de la tierra viaja a través de los espacios vacíos del subsuelo, hasta acumularse en una capa que dificulte parcial o totalmente su paso. El movimiento del agua subterránea es la parte más difícil en el estudio del ciclo hidrológico, debido a que ocurre en un ambiente muy complejo entre el suelo y los materiales geológicos. Durante el movimiento, el agua en las zonas cercanas a la superficie del subsuelo (zona no saturada) no llena totalmente los espacios vacíos; solamente forma una película alrededor de las partículas. El exceso de agua se mueve por la acción de la gravedad a través de los espacios vacíos hasta alcanzar las formaciones geológicas que impidan su paso total o parcial, generando una zona de saturación (zona saturada). Por lo tanto, el agua subterránea se reparte en dos zonas bien definidas (figura 1.1): i) zona no saturada (zona de aereación), y ii) zona saturada.

Dentro de la zona saturada se encuentran formaciones geológicas, llamados **acuíferos**, cuyas características principales son almacenar y conducir agua (figura 1.2). Dentro de las formaciones geológicas, los acuíferos son clasificados como: a) acuífero libre (freático), b) acuífero semiconfinado, c) acuífero confinado y d) acuífero artesiano (confinado).

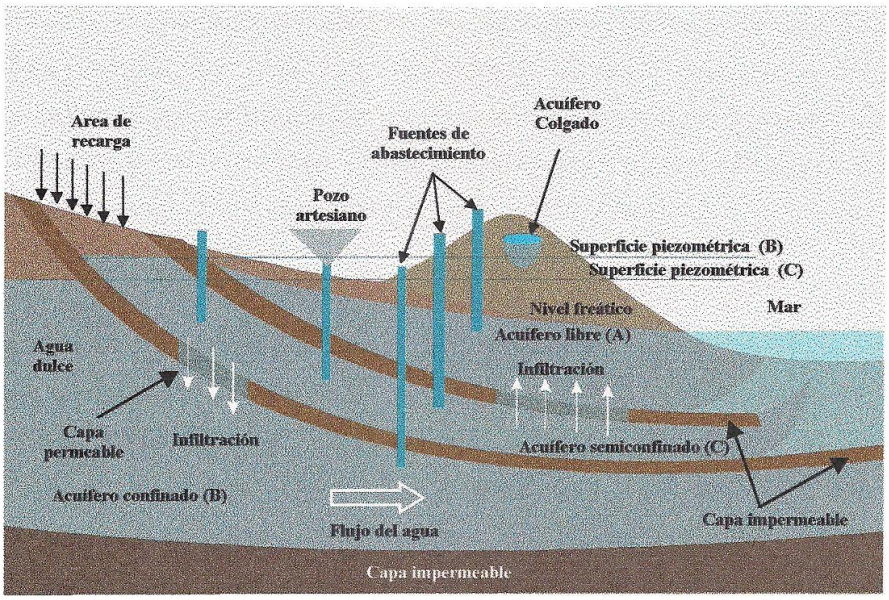


Figura 1.2. ***Clasificación de acuíferos***

1.2. PROBLEMÁTICA DE LA CONTAMINACIÓN

Las aguas subterráneas cumplen un rol importante y, en numerosos casos, vital para el suministro de agua potable de muchas áreas urbanas y rurales en el ámbito mundial. Sin embargo, en la mayoría de los casos se ha prestado poca atención a la prevención de la contaminación de las fuentes de aguas subterráneas y, mucho menos a la protección de los acuíferos en su conjunto. En algunas áreas, principalmente dentro de los grandes centros urbanos o en las áreas circundantes ya se ha producido la contaminación de las aguas subterráneas, creando riesgos potenciales para la salud pública y causando el abandono de las fuentes de suministro existentes, con la consecuente pérdida de inversión financiera y de recursos naturales.

México enfrenta actualmente grandes problemas, entre los que destacan la disminución acelerada de la disponibilidad de agua en las zonas más pobladas y la creciente contaminación de los cuerpos de agua susceptibles de servir como fuentes de abastecimiento. Sin embargo, el desarrollo tecnológico, la necesidad de expansión de las industrias, el desbordante crecimiento sin planificación de las zonas urbanas, y la inconsciencia e ignorancia del hombre, son en conjunto la causa de este complejo problema. Además, México no ha podido enfrentar las consecuencias de un desarrollo acelerado, que ha propiciado un aumento considerable en la extracción y consumo del agua subterránea, provocando su escasez. Por lo que, en un futuro no muy lejano, algunas zonas del país presentarán déficit, planteando un serio desafío a las autoridades a cargo de la administración y distribución del agua.

La contaminación más común de las aguas subterráneas está asociada con el saneamiento de áreas que no cuentan con alcantarillado, con la disposición final de efluentes líquidos industriales, y las actuales prácticas de cultivo agrícola (figura 1.3). El creciente incremento de las concentraciones de nitratos en las aguas subterráneas y los frecuentes episodios de penetración en subsuelo de hidrocarburos halogenádos volátiles, plantean un serio peligro para la calidad del agua potable en relación con los actuales estándares de calidad para su potabilidad (Cuadro 1.1), cuyo principal uso es para consumo humano.

Sin embargo, la mayor contaminación que sufren los acuíferos se debe a los desperdicios domésticos, comerciales e industriales (figura 1.3), que por falta de una planeación por parte de las autoridades para destinar un lugar adecuado para la recepción de este tipo de desperdicios, conlleva a almacenarlos cerca de los acuíferos abastecedores de agua potable, dando lugar a la contaminación del agua.

Es por ello, que hoy en día se han reconocido los aspectos de calidad y cantidad del agua, debido a su importancia e interdependencia. Durante los últimos años se ha hecho mucho énfasis en esta rama de investigación, centrando el interés, no únicamente a problemas de abastecimiento de agua, sino también a problemas de calidad del agua.

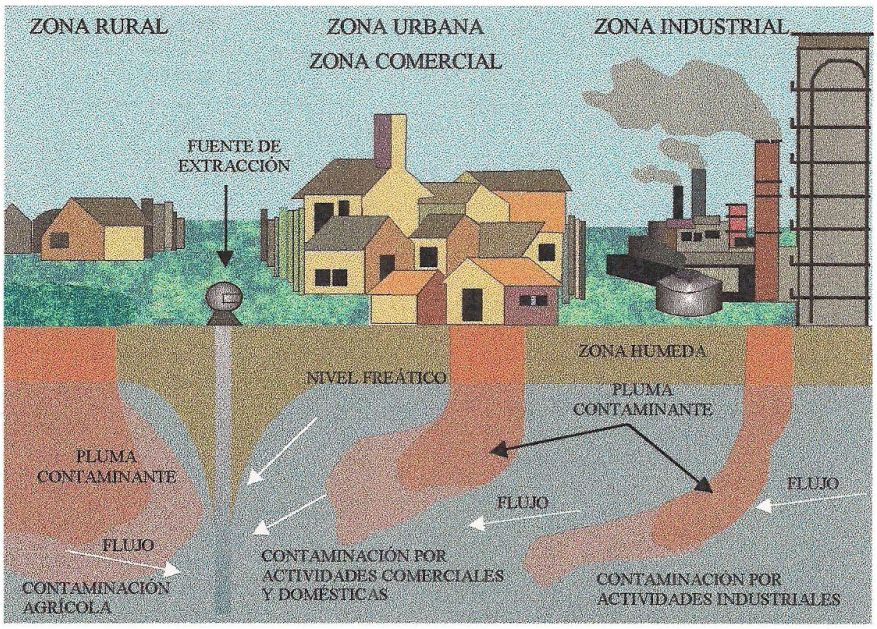


Figura 1.3. ***Fuentes de contaminación del agua subterránea***

Cuadro 1.1. Límites permisibles del agua para consumo humano en mg/l

Compuesto	***Concentración máxima***		
Inorgánicos	***USA[1]***	***NOM-127[2]***	***CNA[3]***
Antimonio (Sb)	0.01	------	0.1
Arsénico (As)	0.05	0.05	0.05
Bario (Ba)	1.0	0.70	1.0
Boro (B)	1.0	------	1.0
Cadmio (Cd)	0.01	0.005	0.01
Cloro (Cl)	250	250	250
Cobre (Cu)	1.0	2.0	1.0
Cromo (Cr^{IV})	0.05	------	0.05
Fierro (Fe)	0.3	0.3	0.3
Flúor (F)	1.4-2.4	1.5	1.5
Hidrógeno de sulfato (H_2S)	0.05	------	------
Manganeso (Mn)	0.05	0.1	0.1
Mercurio (Hg)	0.002	------	0.001
Nitrato (NO_3^-)	45	10	5
Oro (Au)	0.05	------	------
Plomo (Pb)	0.05	0.25	0.05
Selenio (Se)	0.01	------	0.01
Sulfato (SO_4^{2-})	250	400	500
Total de sólidos disueltos	500	1000	------
Zinc (Zn)	5.0	5.0	5.0

continuación del cuadro 1.1.

Compuesto	***Concentración máxima***		
Orgánicos	***USA[1]***	***NOM-127[2]***	***CNA[3]***
2,4,5-TP silvex	0.01	------	------
2,4-D	0.01	50	0.03
Cianuro	0.05	0.07	0.02
Detergentes sintéticos	0.5	------	------
Endrine	0.0002	------	0.001
Extracto de carbón cloroformizado	0.2	------	------
Fenoles	0.001	0.001	0.3
Liandane	0.004	------	------
Metoxicloro	0.1	20	0.03
Tricloroetileno	0.005		0.03
Total de bacterias de coliformes	1 por 100 ml	------	------
Radionucleidos y radioactividad (Actividad máxima permisible)	(pCi/l)	(pCi/l)	(pCi/l)
Radio	5	------	------
Estroncio	10	------	------
Plutonio	50000	------	------
Actividad beta bruta	30	------	------
Actividad alfa bruta	3	------	------

(1). U.S. Enviromental Agency, 1992

(2). NOM-127-SSA1-1994, México, 1996

(3). CNA, México, 1989

La migración de los contaminantes desde la superficie hasta la base de los acuíferos tiende a ser un proceso lento y puede demorar varias décadas antes de que haga contacto en los abastecimientos de las aguas subterráneas. Esto conduce a cierta complacencia en lo que respecta a los riesgos de contaminación del recurso hídrico subterráneo, el cual es fácil de agotar porque se renueva lentamente a la escala humana del tiempo, y la contaminación del agua puede ser considerada permanente. Por lo tanto, la recuperación de los acuíferos contaminados casi siempre resultará una operación costosa y lenta, con frecuencia impracticable, conduciendo al abandono de los escasos recursos de aguas subterráneas con un considerable costo económico.

Los contaminantes ingresan al subsuelo primeramente en la zona no saturada y posteriormente en la zona saturada; pero su estudio se ha enfocado principalmente a la zona saturada. Sin embargo, la zona no saturada juega un papel importante en el estudio de la contaminación de las aguas subterráneas, porque ésta puede ser un recurso importante para la captura, almacenamiento y disminución de contaminantes, además de ser una componente clave en muchos problemas físicos, tales como: el diseño de depósitos de desperdicios, sistemas de limpieza, estudio de gases utilizados en invernaderos y compuestos químicos empleados en la agricultura.

La zona no saturada es por definición un sistema multifásico debido a que se presentan tres fases (figura 1.4): la fase líquida (contaminante o agua), la fase gaseosa (aire o vapor) y la fase sólida (medio). Por lo tanto, el flujo de los fluidos en la zona no saturada es complicado debido a que pueden ser transportados en cada fase por diferentes procesos (cuadro 1.2), siendo los más importantes los procesos de advección y dispersión, además de las reacciones que pueden producir intercambios de masa entre las diferentes fases.

De acuerdo a estudios realizados en la contaminación de acuíferos, los contaminantes que se encuentran más frecuentemente en las aguas subterráneas son los contaminantes orgánicos como son: los líquidos de fase no acuosa más densos que el agua (DNAPLs), los menos densos (LNAPLs). En el cuadro 1.3 se presentan las propiedades de los DNAPLs y LNAPLs, que se encuentran frecuentemente en las aguas subterráneas.

Cuadro 1.2. Procesos importantes en el transporte de contaminantes disueltos

Procesos del transporte	***Definición***	***Impacto en el transporte***
Transporte de masas		
Advección	Movimiento de masa como consecuencia del flujo del agua subterránea.	Provoca que los contaminantes se expandan lejos de la fuente.
Difusión	Es la mezcla de la masa de contaminante con el medio, en respuesta al gradiente de concentración.	Como atenuación del mecanismo de segundo orden en los sistemas de flujo donde la advección y dispersión dominan.
Dispersión	Es la mezcla hidráulica debido a las variaciones de velocidad del flujo en el medio.	Como atenuación del mecanismo que reduce la concentración del contaminante en la pluma.
Transferencia de masas		
Decaimiento radioactivo	Dirección irreversible en la actividad de radionucleidos a través de una reacción nuclear.	Un importante mecanismo para la atenuación del contaminante, comparado con la menor residencia del tiempo.
Sorción	Acumulación de un contaminante en la interfase sólido-líquido.	Es un mecanismo que reduce el porcentaje con el cual el contaminante es aparentemente desplazado.

continuación del cuadro 1.2.

Transferencia de masas químicas	***Definición***	***Impacto en el transporte***
Precipitación y disolución	Este proceso es de adición de contaminantes o remoción de los mismos en una solución, por efecto de reacciones disueltas o creación de varios solutos.	La precipitación del contaminante es un importante mecanismo que puede controlar la concentración del contaminante en solución.
Reacciones ácido/base	Son reacciones que involucran una transferencia de protones (H^+).	Es un control completamente indirecto en el transporte de contaminante para controlar el pH del agua.
Complejación	Es una combinación de cationes y aniones para formar aniones más complejos.	Es un mecanismo importante para incrementar la solubilidad de metales en el agua.
Sustitución / hidrólisis	Es la reacción de componentes orgánicos halogenados con el agua o con un ion del agua (hidrólisis) o con otro ion (sustitución).	Generalmente las reacciones de sustitución/hidrólisis, son realizadas a componentes orgánicos más susceptibles a biodegradación y más solubles.

continuación del cuadro 1.2.

Transferencia de masas químicas	***Definición***	***Impacto en el transporte***
Oxidación / reducción	Son reacciones que involucran una transferencia de electrones e incluyen elementos con más de un estado de oxidación.	Una familia extremadamente importante de reacciones en la retardación del contaminante.
Transferencia de masas biológicamente		
Transformaciones biológicas	Son reacciones que involucran la degradación de componentes, los porcentajes son controlados por la abundancia de microorganismos.	Importante mecanismo para la reducción de contaminantes pero puede no ser correcto para determinados productos.

Los DNAPLs que comúnmente causan contaminación de acuíferos en forma extensiva son los solventes clorados tales como: el Tricloroetileno (TCE), el Tetracloroetileno (PCE), el Ticloroetano (TCA), Metileno clorado (DCM), Cloroformo (TCM) y el Dicloroetileno (DCE); estos tipos de contaminantes, son utilizados frecuentemente para elaboración de resinas, hules, pinturas, barnices, pero principalmente en la industria petroquímica. Los DNPALs se pueden presentar en dos formas distintas, esta son: A) Un DNAPLs con alta densidad, baja viscosidad y alta movilidad, y B) Un DNAPLs con baja densidad, alta viscosidad y baja movilidad.

Los LNAPLs que causan mayor contaminación a los acuíferos, son los productos derivados del petróleo, por ejemplo: el diesel, el petróleo crudo, la gasolina, los aceites, y los productos derivados de la destilación del petróleo. Los contaminantes orgánicos en la

superficie de la tierra pueden percolarse sobre la zona no saturada con mayor facilidad, hasta alcanzar el nivel inferior del acuífero. Dentro de la zona no saturada, el contaminante puede reaccionar con el medio generando vapores contaminantes, los cuales se integran al agua hasta llegar a los acuíferos o bien aflorar en la superficie. Dentro de la zona saturada, el contaminante (LNAPLs) se almacena en la superficie del agua, generando dispersión de contaminantes que se integran al agua por influencia del movimiento del agua (figura 1.4).

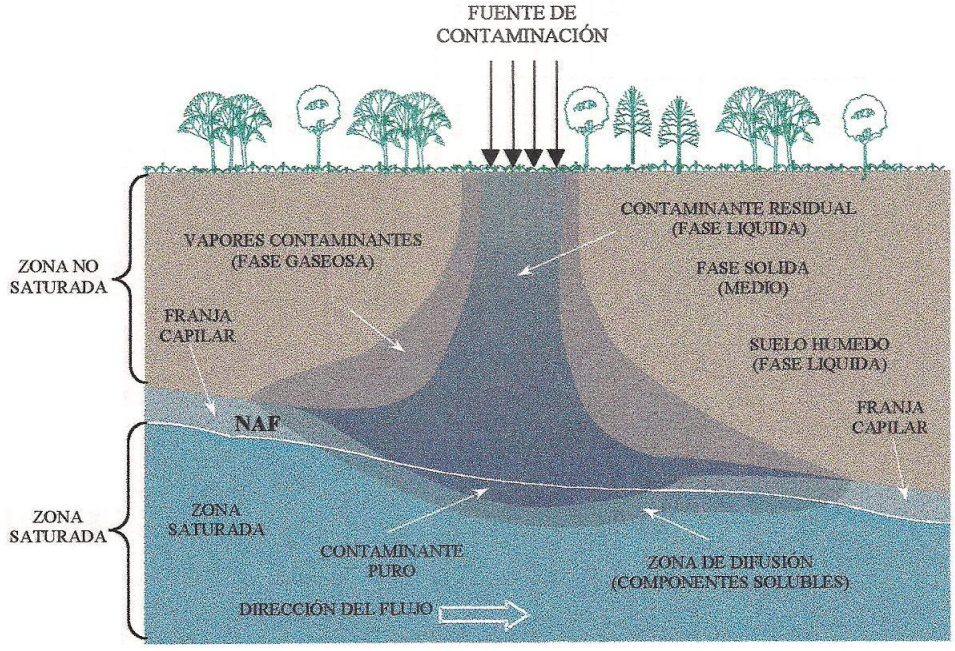


Figura 1.4. ***Representación esquemática de la contaminación en múltiples fases.***

El interés de los estudios de contaminación de las aguas subterráneas no se limita a la detección, evaluación y previsión de su evolución futura, sino, además, incluye el desarrollo e investigación de métodos para limpiar y restaurar los sitios ya contaminados. En este sentido, para comprender los diferentes procesos que intervienen en la contaminación de un acuífero (cuadro 1.2) se deben desarrollar modelos matemáticos y numéricos, que describan los aspectos esenciales del proceso de flujo y transporte de contaminantes.

Cuadro 1.3. Propiedades físicas y químicas de algunos compuestos (contaminantes)

Compuesto	*Presión de vapor (p^o, torr)*	*Solubilidad (mg/l)*	*Constante de Henrry (atm-m^3/mol)*	*Densidad de vapor relativa*	*Punto de Ebullición ^oC*	*Koc (ml/g)*	*Densidad (g/cm^3)*	*Viscosidad absoluta (cP)*	*Viscosidad cinética (cS)*
Dicloroetano	415	21867	0.00212	2.05	41	8.8	1.33	0.44	0.32
Cloroformo	194	8513.5	0.00358	1.80	62	44	1.49	0.56	0.38
Bomodicloroetano	64.2	6716.3	0.00206	1.39	90	61	1.97	1.71	0.87
Dibromocloroetano	17	4051.6	0.00115	1.14	119	84	2.38	------	------
Triclorofluoroetano	6.21	1620.6	0.0888	4.91	23.8	159	1.49	------	------
Tetracloruro de carbono	796	740.21	0.0298	1.62	76.7	439	1.59	0.97	0.61
1,1 Dicloroetano	109	5301.7	0.00543	1.70	57.3	30	1.17	0.5	0.43
1,2 Dicloroetano	221	7129.7	0.0015	1.26	83.5	14	1.25	0.84	0.67
1,1,1 Tricloroetano	82.1	1309.6	0.0167	1.59	------	152	1.35	1.19	0.62
1,1,2 Tricloroetano	124.6	3965.6	0.00108	1.12	113.7	56	1.44	1.76	0.83
1,1,2,2 Tricloroetano	6.36	3061.1	0.000459	1.04	146.4	118	1.16	0.36	1.12
1,1 Dicloroetileno	603	3018.1	0.0255	2.86	31.9	65	1.22	1.72	0.3
1,2 Dibromoetano	13.8	5017.5	0.00068	1.10	131.6	92	2.18	0.48	0.79

Continuación del cuadro 1.3.

Compuesto	*Presión de vapor (p^o, torr)*	*Solubilidad (mg/l)*	*Constante de Henry (atm-m^3/mol)*	*Densidad de vapor relativa*	*Punto de Ebullición ^oC*	*Koc (ml/g)*	*Densidad (g/cm^3)*	*Viscosidad absoluta (cP)*	*Viscosidad cinética (cS)*
cis, 1,2 Dicloroetileno	205	6995.8	0.00374	1.63	60	86	1.28	0.4	0.38
trans, 1,2 Dicloroetileno	315	4389.1	0.00916	1.97	48	59	1.26	0.57	0.32
Tricloroetileno (TCE)	75	1384.9	.00937	1.35	86.7	126	1.46	0.9	0.38
Tetracloroetileno (PCE)	18.9	236.96	0.0174	1.12	121.4	364	1.63	0.87	0.54
bis (2 cloroetil) Éter	1.11	1139.1	0.00013	1.004	178	14	1.22	------	1.98
bis (2, cloroisopropil) Éter	0.73	1049.3	0.00011	1.0003	189	61	1.11	------	------
2 Cloroetilvinileter	34.3	15148.0	0.00025	1.01	108	6.6	1.05	------	------
Clorobenzeno	11.7	44.52	0.0039	1.04	132	330	1.11	0.8	0.72
o-Diclorobenzeno	1.39	135.84	0.00198	1.01	179	1700	1.31	1.41	1.28
m-Diclorobenzeno	2.25	133.91	0.00325	1.01	172	1700	1.29	1.08	0.84

1.3. ESTADO DE LA INVESTIGACIÓN

Desde el punto de vista de la modelación matemática y computacional, un aspecto sumamente interesante por su complejidad y que está recibiendo atención internacionalmente, es la migración de contaminantes en el sistema subterráneo, donde la migración, se inicia generalmente en la zona no saturada y continua en la zona saturada. Además, este proceso puede generar una amplísima variedad de procesos dentro del medio, como son: sistemas multifásicos, intercambios fisico-químicos, procesos de advección, dispersión, sorción e intercambio químico entre los diferentes compuestos contenidos en el medio.

En el caso del agua subterránea, interesan sobre todo, las ecuaciones que describen el flujo y transporte de contaminantes. El flujo del agua subterránea está gobernado por ecuaciones del primer tipo, en el caso transitorio, y por ecuaciones del segundo tipo, en el caso estacionario; para el transporte de contaminantes, existen diferentes procesos (cuadro 1.2) que son incluidos dentro de la ecuación, pero los más importantes son la advección y difusión en forma conjunta.

Las observaciones de campo, las experimentaciones de laboratorio y *los modelos matemáticos* constituyen las herramientas que permiten comprender y pronosticar el destino de los contaminantes en el subsuelo. Una vez que el problema de transporte de contaminantes ha sido formulado adecuadamente en un modelo matemático, se tiene la posibilidad de dos probables métodos de solución: (1) métodos de solución analítica y (2) método de solución numérica aproximada.

Las técnicas de solución analítica pueden usarse para situaciones simples o bien para una estimación inicial de la extensión del contaminante. Para situaciones que involucran procesos complejos en formaciones heterogéneas y anisotrópicas bajo diversas condiciones iniciales y de frontera (múltiples pozos, múltiples capas, interacciones entre acuíferos y ríos), es necesario recurrir a técnicas numéricas aproximadas.

En la actualidad, los métodos numéricos utilizados para resolver la ecuación que describe el transporte (advección-difusión), son clasificados en tres categorías importantes: (1) Métodos *Eulerianos,* (2) Métodos *Lagrangianos,* y (3) Métodos *Eulerianos Lagrangianos.*

En los métodos Eulerianos, la ecuación gobernante es discretizada por medio de diferencias finitas o elementos finitos con discretización espacial fija. Estas técnicas trabajan bien cuando la difusión es el proceso dominante (es decir, número de Peclet, $Pe<2$) y la concentración es relativamente baja (sin frentes bruscos de contaminación), además son utilizadas en condiciones de saturación. Sin embargo, cuando la advección es el proceso dominante ($Pe>2$), se presentan dificultades numéricas (Pinder y Gray, 1977). En general, las soluciones presentan las siguientes características: (1) oscilaciones no físicas en el dominio con frentes bruscos de contaminación y, (2) alta dispersión numérica.

Una posible alternativa para reducir el error numérico es el uso de una malla sumamente fina, situación que en muchas ocasiones es poco práctica debido al excesivo esfuerzo computacional que implica.

Debido a la naturaleza del transporte, muchas investigaciones se han enfocado al análisis de las características para complementar la descripción del fenómeno y obtener soluciones aceptables. En el caso del transporte advectivo, el empleo de los métodos Lagrangianos presenta mejor aproximación, debido a la deformación de las mallas empleadas para su solución.

Aunque los métodos Lagrangianos son más eficientes que los métodos Eulerianos, presentan la desventaja de las limitaciones ocasionadas por el desplazamiento de mallas deformadas, sin embargo, son eficientes en la solución de la componente advectiva; por lo tanto, una alternativa viable es la combinación de la simplicidad de la malla fija del método Euleriano, con la capacidad de aproximación en el tratamiento de la componente advectiva del método Lagrangiano para generar métodos conocidos como Eulerianos-Lagrangianos entre los que se encuentran el método de Características (MOC) y el método Modificado de Características (MMOC).

Estos métodos son esquemas numéricos que no tienen la propiedad de un tratamiento sistemático de fronteras y, por ende, no garantizan la conservación de masa, siendo necesario el empleo de técnicas que tengan esta propiedad. En los últimos años se han desarrollado diferentes esquemas numéricos con la propiedad de conservación de masa. Celia et al. (1989a), implementaron un procedimiento numérico de solución denominado método de Funciones de Prueba Óptimas (OTF), dicho método se basa en la definición de las funciones de peso que hacen óptima la solución, cuya forma varía según el grado de dependencia de la advección.

Posteriormente, una de las técnicas desarrolladas es el método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) desarrollado por Celia et al. (1990). Este nuevo enfoque incorpora funciones de peso óptimas que conducen a una formulación en espacio-tiempo con las siguientes características: (1) no considera parámetros arbitrarios, (2) no utiliza ninguna partición del operador o técnica de descomposición de las ecuaciones, (3) genera aproximaciones bajo condiciones de conservación de masa, y (4) contiene una estructura general que considera (de manera sistemática) el tratamiento de las fronteras.

Cada uno de estos métodos ha sido desarrollado para el transporte de contaminantes en la zona saturada, sin embargo, pocos se han desarrollado para el flujo del transporte de contaminantes en la zona no saturada. Por lo tanto, esta tesis se enfoca a la formulación del esquema numérico del método Euleriano Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM), desarrollado recientemente por Herrera et al. (1989, 1992, 1993), Celia et al. (1989c, 1990), y Binnig et al. (1992, 1994), aplicado a la zona no saturada con: características singulares, problemas en una y dos dimensiones, ecuaciones coeficientes variables, flujo en estado transitorio, ecuación de transporte sin reacciones, además de un sistema multifásico.

La formulación del método ELLAM en espacio-tiempo consiste en la continuación de las técnicas Eulerianas-Lagrangianas y del método de Funciones de Prueba Óptimas (OTF) (Celia et al. 1989a, b), sobreponiéndose a las principales deficiencias existentes en los métodos Eulerianos-Lagrangianos (Neuman, 1981, 1984; Neuman y Sorek, 1982; Baptista et al. 1984). El desarrollo del método Euleriano Lagrangiano del Adjunto Localizado

(ELLAM) con la propiedad de conservación de masa y considera una forma sistemática para incorporar las condiciones de frontera en el esquema numérico.

1.4. OBJETIVO PRINCIPAL

Dada la importancia que reviste el diagnóstico y la evolución de la migración de contaminantes en el subsuelo, esta investigación se basa particularmente en el método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado, como herramienta eficaz para estudiar el transporte de contaminantes, obteniendo una mejor comprensión del comportamiento temporal y espacial en los diferentes ámbitos del subsuelo. Por lo tanto, el objetivo principal de esta investigación es:

"Sintetizar en primera instancia el conocimiento relativo de la solución numérica de la ecuación de transporte en la zona saturada, para culminar con la implementación del método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) en una dimensión (en la zona saturada y no saturada) y en dos dimensiones (en la zona no saturada)".

1.5. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

De manera sistemática, los objetivos específicos de esta investigación son:

1.- Descripción de las principales ecuaciones matemáticas que describen el flujo del agua subterránea, así como el transporte de contaminantes en los diferentes ámbitos del subsuelo.

2.- Presentación de las diferentes técnicas de solución numéricas que se consideran más eficientes en la solución de la ecuación de transporte en condiciones de saturación.

3.- Presentación enriquecida del esquema numérico del método del adjunto localizado (LAM), aplicado a la solución de la ecuación de transporte.

4.- Descripción general del método Euleriano–Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) para la ecuación de transporte en la zona saturada y no saturada.

5.- Aplicación de diferentes algoritmos de solución de la ecuación de transporte por medio del método ELLAM.

6.- Simulación del flujo y transporte de contaminantes en la zona no saturada en una y dos dimensiones.

1.6. METODOLOGÍA

Para cumplir con el objetivo principal y los objetivos específicos, la metodología llevada a cabo en este trabajo es la siguiente:

- Se ha planteado un modelo matemático basado en la estabilidad física del flujo y transporte en un medio poroso. Las ecuaciones diferenciales gobernantes para este modelo se describen en el Capítulo 2 y son divididas en dos grupos: uno que describe el flujo del fluido y otro que describe el transporte de contaminantes. Estas ecuaciones pocas veces se resuelven analíticamente dadas las limitaciones de los métodos, pero considerando la heterogeneidad de algunos problemas, se emplean los métodos numéricos.

- Los problemas de ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de frontera no homogéneas son muy frecuentes, tal es el caso de la ecuación de transporte. El tratamiento numérico de este tipo de ecuaciones utiliza funciones de peso localizadas que facilitan la solución de las mismas. En el capítulo 3, se realiza el planteamiento del método del Adjunto Localizado para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y posteriormente utilizado como herramienta en la implementación del método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM).

- En el capítulo 4 se presentan métodos de solución en los cuales se han realizado simulaciones en una dimensión con datos hipotéticos para el enfoque Euleriano (método de Diferencias Finitas y Elemento Finito), comparando diferentes procesos de transporte (advección-dispersión), mediante una discretización espacial y temporal fija. También se aplica el enfoque Euleriano-Lagrangiano (Método de Características (MOC) y Método Modificado de Características (MMOC)), tomando para ello un problema hipotético bajo diferentes escenarios que determinen los parámetros adecuados para una solución aceptable de la ecuación de transporte.

- En el capítulo 5 se presenta la solución de las ecuaciones de flujo en dos fases. Estas ecuaciones están escritas en términos de las presiones de aire y agua (utilizadas generalmente en hidrología), también se reformulan con variables dependientes con las presiones medias y/o globales y la saturación del fluido. En este capítulo se desarrolla la forma conocida como ecuación de doble presión, la cual presenta diferentes propiedades matemáticas que son utilizadas para definir el esquema numérico.

- En los capítulos 6 y 7 se formulan las técnicas de solución numérica para la ecuación de transporte de contaminantes en múltiples fases, correspondientes a una y dos dimensiones, respectivamente. Ambos capítulos enfocan su atención al método del Elemento Finito de Galerkin (FEM) y al método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM), para la solución de la ecuación diferencial para el transporte de contaminantes en múltiples fases. Aunque el comportamiento numérico del método del Elemento Finito ha sido estudiado extensivamente y bastante bien entendido, todavía hay puntos que deben ser resueltos. El método ELLAM trata la parte advectiva y la parte difusiva de la ecuación gobernante por separado en un contexto Euleriano-Lagrangiano. Esta técnica es excelente para el desarrollo de los algoritmos numéricos bajo condiciones de conservación de masa.

Capítulo II

ECUACIONES DE FLUJO Y TRANSPORTE EN MÚLTIPLES FASES

2.1. INTRODUCCIÓN

El interés de los estudios de contaminación de las aguas subterráneas no se limita a la detección, evaluación y previsión de su evolución futura, sino además, incluye el desarrollo e investigación de métodos para limpiar y restaurar los sitios ya contaminados. En este sentido y para comprender los diferentes procesos que intervienen en la contaminación de un acuífero, se deben desarrollar modelos matemáticos y numéricos, que describan los aspectos esenciales del proceso de flujo y transporte de contaminantes.

En el caso del agua subterránea, interesan sobre todo, las ecuaciones que describen el flujo y transporte de contaminantes, el flujo del agua subterránea está gobernado por ecuaciones del primer tipo en el caso transitorio, y por ecuaciones del segundo tipo en el caso estacionario. Para el transporte de contaminantes, existen diferentes procesos que son incluidos dentro de la ecuación, pero los más importantes son la advección y difusión en forma conjunta. Cuando la advección predomina sobre la difusión, las ecuaciones de transporte resultantes son quasi-hiperbólicas, lo que propicia que la solución de la ecuación se dificulte.

Cuando en un medio poroso, además del agua, está presente el aire o vapor, entonces se considera un flujo multifásico. Como ejemplo particular de este tipo de fenómenos, tenemos la zona no saturada, compuesta por la fase sólida (medio), la fase líquida (contaminante y/o agua) y la fase gaseosa (aire y/o vapores) (figura 2.1).

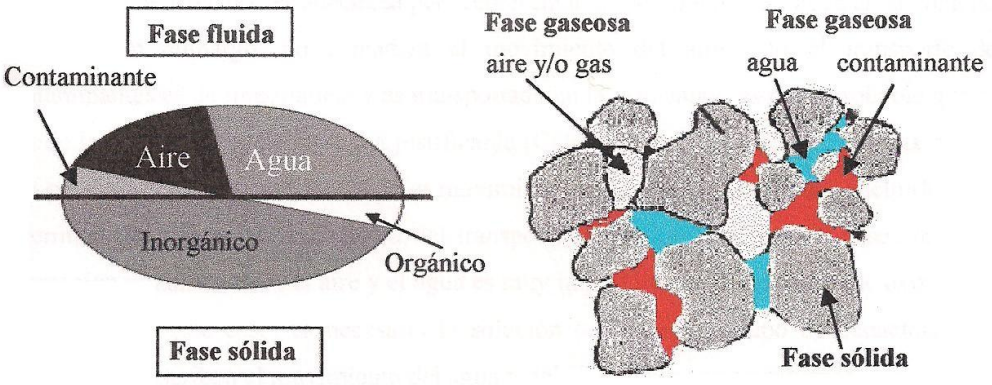


Figura 2.1. ***Estructura conceptual de la zona no saturada***

2.2. ECUACIONES DE FLUJO EN MÚLTIPLES FASES

El sistema multifásico está definido sobre un medio poroso continuo y basado en las leyes de conservación (balance de masa) aplicadas a cada fase. Estas leyes de conservación son determinadas por las relaciones constitutivas dependientes del material. En la zona no saturada son: la presión capilar, la relación de presión-saturación y la relación de permeabilidad-saturación. La combinación de las ecuaciones de conservación de masa y las ecuaciones constitutivas apropiadas, conducen a un grupo de ecuaciones gobernantes para un sistema de flujo multifásico en la zona no-saturada.

En los distintos trabajos que se han realizado sobre la zona no saturada, la ecuación correspondiente a la fase aire es eliminada por suponer que la presión del aire es igual a la

presión atmosférica. Esto es, la ecuación de la fase aire es eliminada de la ecuación de conservación de masa cuando la presión es constante e igual a la presión atmosférica, considerando solamente la fase agua. Por otra parte, si la densidad del agua es constante y se desprecian los cambios de porosidad, el flujo en la zona no saturada puede ser representado por la ecuación de Richards (Hillel, 1980, Molel-Seytoux, 1973).

La ecuación de Richards es adecuada para representar el movimiento del agua en la zona no saturada, sin embargo, no considera el movimiento del aire. Si el transporte de contaminantes es de importancia y es transportado en la fase vapor, es poco probable que el uso de la ecuación de Richards sea justificable (Celia y Binning, 1992a). Mientras que el aire presente efectos significantes en el movimiento del agua, será necesario incluirlo para determinar la componente advectiva del transporte de contaminantes en la fase aire. La interacción dinámica entre el aire y el agua es muy importante en los sistemas de extracción de vapor. En este caso, es necesaria la solución conjunta del grupo de ecuaciones no lineales que describen el movimiento del agua y del aire en la zona no saturada.

La ecuación general del flujo de aire y agua en medios porosos está constituida por un par de ecuaciones diferenciales parciales no lineales (Bear, 1979), representadas por la siguiente expresión:

$$\frac{\partial(n\rho_\alpha S_\alpha)}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho_\alpha q_\alpha) = F_\alpha \qquad (2.1)$$

donde:
- α denota la fase de aplicación de la ecuación en este caso aire (a) y agua (w),
- n porosidad del medio (fase sólida),
- ρ_α densidad de la fase α,
- S_α saturación de la fase α,
- q_α flujo volumétrico (flujo de Darcy) de la fase α,
- F_α fuentes o sumideros de fluido en la fase α.

Esta ecuación es la ecuación general de conservación de masa, donde el primer término describe la cantidad de masa en un volumen de control en un tiempo determinado, el cual es cero si el flujo es en la zona saturada, y el segundo, representa el cambio de flujo en cada volumen. Esta ecuación puede ser dividida en varias componentes con diferentes variables dependientes, así como relaciones constitutivas. Dos de las componentes en que se puede dividir son discutidas más adelante; éstas son: a) enfoque de la doble presión y b) formulación de la presión-saturación.

Para simplificar la ecuación (2.1), en la mecánica de suelos, es válido introducir el concepto de contenido volumétrico de fluido (contenido de humedad) en la fase α, el cual está definido por:

$$\theta_\alpha = nS_\alpha \tag{2.2}$$

sustituyendo este concepto en la ecuación (2.1), ésta se convierte en la siguiente expresión:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \theta_\alpha)}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho_\alpha q_\alpha) = F_\alpha \tag{2.3}$$

2.2.1. LEY DE DARCY

La ley de Darcy es una relación empírica que describe la relación entre el flujo y las presiones individuales de cada fase. La forma general para el caso de un flujo multifásico, está dada por:

$$q_\alpha = -\frac{\mathbf{k}k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g) \tag{2.4}$$

donde:

q_α	flujo volumétrico (flujo de Darcy),
$\mathbf{k}$	tensor de permeabilidad intrínseca del medio,
$k_{r\alpha}$	permeabilidad relativa de la fase α,
μ_α	viscosidad dinámica del fluido α,

p_α presión del fluido α,

ρ_α densidad de la fase α,

g vector de aceleración debido a la gravedad.

En esta ecuación se ha introducido el término de la permeabilidad relativa de la fase α $(k_{r\alpha})$, considerada como una función no lineal de la saturación. Este valor puede variar en un rango que va desde 0, cuando el fluido no está presente, hasta 1 cuando el fluido está presente.

La ley de Darcy es una relación lineal entre el gradiente de presión y el flujo del fluido. Ésta es válida cuando la viscosidad del fluido es dominada por el flujo con velocidades reducidas. La ley de Darcy debe ser modificada para incluir términos adicionales cuando el fluido presenta campos de velocidades altas. Massman (1989) discutió la validación de la ley de Darcy con experimentos de ventilación concluyendo, que la ley presenta buena aproximación para flujos de aire en arenas y gravas, y una aproximación poco confiable en materiales con pequeños poros como son: limos, arcillas y otros materiales de baja permeabilidad.

Para fines prácticos, es común en hidrología y en el estudio de mecánica de suelos introducir el concepto de carga de presión, que consiste en convertir la presión del fluido en su equivalente en altura de columna de agua, definida por:

$$h_\alpha = \frac{p_\alpha}{\rho_\varepsilon g} \tag{2.5}$$

También en algunos casos es necesario introducir el tensor de conductividad ($\mathbf{K}_\alpha$), el cual está relacionado con la permeabilidad, por:

$$\mathbf{K}_\alpha = \frac{\rho_{ow} g \mathbf{k} k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} = \mathbf{K}_{\alpha_s} k_{r\alpha} \tag{2.6}$$

donde:

ρ_{ow} densidad del agua a presión y temperatura estándar;

g magnitud de la aceleración de la gravedad;

$\mathbf{K}_{\alpha_s}$ conductividad (tensor) cuando el medio poroso está saturado con el fluido α.

utilizando estas definiciones; la ley de Darcy (ecuación 2.4) está dada por:

$$q_\alpha = -K_\alpha \left(\nabla h_\alpha - \frac{\rho_\alpha}{\rho_{ow}} \mathbf{n}_z \right) \tag{2.7}$$

donde $\mathbf{n}_z$ es el vector normal unitario en la dirección de la fuerza de gravedad.

2.2.2. RELACIONES CONSTITUTIVAS

Las ecuaciones (2.3 y 2.4), describen las condiciones de flujo del sistema, sin embargo, existen diferentes parámetros que son desconocidos, por lo tanto, es necesario introducir relaciones constitutivas que integren estos parámetros. Estas relaciones constitutivas son escritas de diferentes formas, dando lugar a una serie de variables independientes del sistema. Los cambios más comunes para variables independientes son las presiones individuales de fase y la saturación de la fase. En este capítulo, tres relaciones constitutivas son especificadas: presión-saturación, saturación-permeabilidad relativa y presión-densidad.

La saturación de un fluido es una función obtenida de la diferencia de presión entre los dos fluidos en un medio poroso, conocida como presión capilar (p_c), dada por:

$$p_c \equiv p_\alpha - p_w \tag{2.8}$$

con su correspondiente definición para la carga de presión:

$$h_c \equiv h_\alpha - h_w \tag{2.9}$$

2.2.2.1. RELACIÓN PRESIÓN-SATURACIÓN

Muchas formas funcionales han sido propuestas para describir la relación de presión-saturación, generalmente relaciones empíricas; una de las formas funcionales utilizadas comúnmente es la de van Genuchten (1980):

$$\theta_w = \frac{\theta_{ws} - \theta_{wr}}{\left[1 + (ah_c)^n\right]^{1-1/n}} \tag{2.10}$$

donde $\theta_{ws}, \theta_{wr}, a$, y n son utilizados como parámetros apropiados con un grupo de datos de saturación-presión capilar. Esta forma funcional es preferida por muchos modelistas, dado que no presenta saltos y, por consecuencia, son fáciles de tratar numéricamente.

El contenido de fluido de aire puede ser obtenido a partir del contenido de agua considerando que la suma de los contenidos de aire y agua es igual al volumen de espacios vacíos (porosidad); esto es:

$$\theta_w + \theta_a = n \tag{2.11}$$

o en su forma equivalente con la siguiente expresión:

$$S_a + S_w = 1 \tag{2.12}$$

2.2.2.2. RELACIÓN PERMEABILIDAD RELATIVA-SATURACIÓN Y PRESIÓN-SATURACIÓN

La permeabilidad relativa es una función de la saturación del fluido. Esta función es determinada en forma empírica, pero para evitar la necesidad de medir independientemente la relación permeabilidad relativa–saturación, la forma funcional es frecuentemente especificada en términos de los parámetros de la relación presión–saturación. Por ejemplo,

van Genuchten aplico la teoría de Mualem (1976) para obtener la relación presión-saturación (ecuación 2.10), obteniendo la siguiente ecuación:

$$k_{rw}(\theta_w) = \theta_e^{1/2}\left(1 - \left(1 - \theta_e^{1/m}\right)^m\right)^2 \tag{2.13}$$

donde, θ_e es el contenido normalizado del agua (equivalente a la saturación normalizada) definido por:

$$\theta_e = \frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_{ws} - \theta_{wr}} \tag{2.14}$$

donde, θ_w es el contenido volumétrico del agua, θ_{ws} es el contenido volumétrico del agua en condiciones de saturación y θ_{wr} es el contenido volumétrico residual. van Genuchten no deriva la función de permeabilidad relativa de la fase aire, ésta es derivada por Parker (1987, 1989) quien aplica la teoría de Mualem (1976) para obtener la relación de presión capilar de van Genuchten, esto es:

$$k_{rw}(\theta_w) = \left(1 - \theta_e\right)^{1/2}\left(1 - \theta_e^{1/m}\right)^{2m} \tag{2.15}$$

Touma y Vauclin (1986), experimentaron la medida de las funciones de permeabilidad relativa para no utilizar las relaciones inferidas de la relación presión capilar-saturación. Esta función es la conductividad descrita por:

$$K_w = A_w \theta_w^{B_w} \tag{2.16}$$

$$K_a = K_{as} \frac{A_a}{A_a + h_c^{B_a}} \tag{2.17}$$

para el agua y aire respectivamente, donde A y B son constantes correspondientes a cada fase. Las curvas de presión-saturación y permeabilidad relativa se encuentran en Touma y Vauclin (1986).

En este trabajo, se ha considerado al aire como un fluido compresible y solamente una función de presión de aire, donde la densidad es considerada como función lineal de la presión, esto es:

$$\rho_a = \rho_{0a}\left(1 + \frac{h_a}{h_{0a}}\right) \tag{2.18}$$

donde ρ_{0a} es la densidad de la fase aire en la presión h_{0a}.

2.2.3. FORMULACIÓN DE LA ECUACIÓN DE DOBLE PRESIÓN

Las ecuaciones (2.1 y 2.4) junto con las relaciones constitutivas, especifican el flujo del aire y agua en un medio poroso generando un sistema de ecuaciones con muchos cambios de variables independientes. Uno de los cambios principales es la carga de presión, la cual se convierte en variable dependiente.

Las ecuaciones de balance de masa descritas anteriormente son planteadas como dos ecuaciones, una para la fase agua y otra para la fase aire, expresadas en términos de la carga de presión de cada fase. En esta descripción se considera en primer término la ecuación del movimiento del agua, por lo tanto, si se toma en cuenta los efectos de almacenamiento, la ecuación de balance de masa para la fase agua es modificada, esto es:

$$n\frac{\partial S_w}{\partial t} + S_{sw}S_w\frac{\partial h_w}{\partial t} + \nabla \bullet q_w = F_w \tag{2.19}$$

donde S_{sw} es el coeficiente de almacenamiento específico del agua. Su inclusión garantiza que la ecuación sea válida en la zona saturada, donde la saturación del agua es constante y no existen cambios en el tiempo. En muchos modelos de la zona no saturada, la compresibilidad del agua no es considerada y el término de almacenamiento que está del lado izquierdo, queda fuera de la ecuación, dado que, el cambio de saturación con respecto

al tiempo $\left(\frac{\partial S_w}{\partial t}\right)$, es mucho mayor que el término debido a la compresión del agua y del medio sólido $\left(S_{sw} S_w \frac{\partial h_w}{\partial t}\right)$. En la ecuación anterior se puede observar que el agua es considerada ligeramente compresible, para que $q_w \bullet \nabla \rho_w \approx \rho_w \nabla \bullet q_w$ y el término $q_w \bullet \nabla \rho_w$ no sea considerado. Entonces, sustituyendo la ley de Darcy en la ecuación (2.19), la ecuación para el agua es:

$$n \frac{\partial \theta_w}{\partial t} + S_{sw} \frac{\theta_w}{\phi} \frac{\partial h_w}{\partial t} - \nabla \bullet \left(K_w \left(\nabla h_w - n_z\right)\right) = F_w \qquad (2.20)$$

Si el término de almacenamiento (S_{sw}) es ignorado, entonces, la diferenciación temporal es aplicada al contenido de humedad (θ_w) y la diferenciación espacial es aplicada a la carga de presión (h_w). La ecuación de aire está escrita por expansión de la derivada de tiempo de la ecuación del balance de masa (ecuación 2.3); la derivada de tiempo de la densidad de aire es planteada por sustitución de la ecuación que relaciona la presión de aire y la densidad (ecuación 2.13). Por lo tanto, la derivada de tiempo con respecto al contenido de aire, es remplazada por la derivada con respecto al contenido de agua con la adición de la ecuación (2.9).

Finalmente, la ley de Darcy (ecuación 2.6) es sustituida para el flujo del fluido y la ecuación para la fase aire con estas modificaciones está dada por:

$$\left(n - \theta_w\right) \frac{\rho_{0a}}{h_{0a}} \frac{\partial h_a}{\partial t} - \rho_a \frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \bullet \left(\left(\rho_a K_a\right) \left(\nabla h_w - \frac{\rho_a}{\rho_{0w}} i_z \right) \right) = F_a \qquad (2.21)$$

Las ecuaciones (2.20) y (2.21) representan la formulación de la ecuación de doble presión para flujo del aire y del agua en un medio poroso. Estas ecuaciones son resueltas para las variables h_w y h_a, y posteriormente se aplica la ley de Darcy (ecuación 2.10) para determinar el flujo en cada fase.

Estas ecuaciones pueden ser aplicadas en la zona saturada como en la zona no saturada. En la zona saturada, el aire no presenta mucha importancia, por lo tanto la ecuación (2.21) es ignorada. En tanto que, para la zona no saturada, las ecuaciones de aire y agua son resueltas en forma combinada.

En estas ecuaciones se han considerado dos tipos de frontera para cada fluido, esto es: Condición de primer tipo (condición de Dirichlet) o de condición de carga fija y condición de segundo tipo o de flujo especifico. Cada una de estas condiciones deben ser especificadas en las fronteras del dominio en estudio, para cada fase. También, dentro de las ecuaciones (2.20) y (2.21), aparecen del lado derecho los términos adicionales de fuentes y/o sumideros, los cuales en caso de no existir se consideran nulos. Pero si estos términos son considerados, generalmente se integran al sistema de ecuaciones como datos conocidos.

2.2.4. FORMULACIÓN DE LA ECUACIÓN DE PRESIÓN-SATURACIÓN (FLUJO FRACCIONAL)

Mientras las ecuaciones (2.1) y (2.4) describen apropiadamente la dinámica de las dos fases, esta forma particular de plantear las ecuaciones puede no ser la más atractiva desde el punto de vista numérico, debido a la presencia de frentes de infiltración y movimientos de humedad constante (Ewing y Celia, 1990).

En análisis previos, las variables dependientes en las ecuaciones del flujo en múltiples fases han sido remplazadas por las presiones en cada fase. Para plantear las ecuaciones (2.1) y (2.4) con mayores ventajas en su solución, éstas deben ser escritas en términos de la saturación del agua y la presión global, donde está ultima es una variable no-física la cual es definida utilizando la flujo volumétrico total dado por:

$$q = \frac{\rho_w}{\rho_{0w}} q_w + \frac{\rho_a}{\rho_{0a}} q_a \qquad (2.22)$$

Pero, para ser definida solamente en términos del gradiente de la presión global e independientemente de los gradientes de saturación. Es necesario emplear una forma apropiada (Chavent y Jaffe, 1986) de la presión global, esto es:

$$p = \frac{1}{2}(p_w + p_a) - \int_{s_c}^{S_w}\left(f_w - \frac{1}{2}\right)\frac{dp_c}{dS}\,dS \tag{2.23}$$

donde $p_c(S_c)=0$ y f_w es una función del flujo fraccionado, determinado por:

$$f_w = \frac{\dfrac{\rho_w k_{rw}}{\rho_{0w}\mu_w}}{\dfrac{\rho_w k_{rw}}{\rho_{0w}\mu_w} + \dfrac{\rho_a k_{ra}}{\rho_{0a}\mu_a}} \tag{2.24}$$

Por lo tanto, sustituyendo las ecuaciones (2.23) y (2.24) en la ecuación (2.22), el flujo volumétrico total está dada por :

$$q = -k\left(\frac{\rho_w k_{rw}}{\rho_{0w}\mu_w} + \frac{\rho_a k_{ra}}{\rho_{0a}\mu_a}\right) \left[\left(1 - \frac{\partial}{\partial P}\left(\int_{S_c}^{S_w}\left(f_w - \frac{1}{2}\right)\frac{dp_c}{dS}\,dS\right)\right)\nabla P - \left((1 - f_w)\rho_a + f_w\rho_w\right)g\nabla z\right] \tag{2.24}$$

La función de flujo fraccional (f_w) está desarrollada en Buckley y Leverett (1942) y es equivalente a la relación q_w/q, cuando el fluido es incompresible, en cuya expresión las fuerzas de capilaridad y de gravedad son ignoradas.

2.2.4.1. ECUACIÓN DE PRESIÓN

La ecuación de presión es derivada del desarrollo de la ecuación de balance de masa (ecuación 2.1), para ambas fases (aire y agua), esto es:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n\left(\frac{\rho_w}{\rho_{0w}}S_w+\frac{\rho_a}{\rho_{0a}}(1-S_w)\right)\right)+\nabla\bullet\left(\frac{\rho_w}{\rho_{0w}}q_w+\frac{\rho_a}{\rho_{0a}}q_a\right)=F_a+F_w \tag{2.25}$$

Si $F_w+F_a=0$, y los efectos de compresibilidad no son considerados, la ecuación se reduce a:

$$\nabla\bullet\left(q_a+q_w\right)=\nabla\bullet q=0 \tag{2.26}$$

En una dimensión, esta ecuación es particularmente simple para resolver. Sin embargo, en múltiples dimensiones debe ser resuelta antes que la velocidad total sea definida.

2.2.4.2. *ECUACIÓN DE SATURACIÓN*

Otra ecuación necesaria en el desarrollo de la formulación del flujo fraccionado es la ecuación de saturación, obtenida por derivación de la expresión para q_w en términos de q, y sustituida en la ecuación de balance de masa, dando como resultado la siguiente ecuación (Chavent y Jaffe, 1986) :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial(n\rho_w S_w)}{\partial t}+\nabla\bullet\left(\rho_w f_w q+\rho_w f_w\frac{\mathbf{k}k_{ra}}{\mu_a}(\rho_w-\rho_a)g\nabla z\right)+\\&+\nabla\bullet\left(\rho_w f_w\frac{\mathbf{k}k_{ra}}{\mu_a}\frac{dp_c}{dS_w}\nabla S_w\right)=0\end{aligned} \tag{2.27}$$

De esta ecuación general se desprenden tres grupos de ecuaciones: El primer grupo representa la derivada con respecto al tiempo, el segundo la combinación de fuerzas de los cambios de saturación debido a la velocidad total del fluido y a la dirección de la gravedad, y el tercer término representa la difusión capilar. Para el caso de un fluido incompresible en una dimensión, la ecuación es:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}+ff_w(\theta)q\frac{\partial\theta}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial z}\left(D(\theta)\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)=0 \tag{2.28}$$

donde $\theta=nS_w$ es el contenido de humedad, ff_w es la función modificada del flujo fraccionado planteada por:

$$ff_w(\theta) = f_w(\theta)\left(1 + \frac{kk_{ra}}{\mu_a q}\Delta\rho g\right) \tag{2.29}$$

con $\Delta\rho=\rho_w-\rho_a$, y D es el término de difusión capilar, definido por:

$$D(\theta) = -f_w(\theta)\frac{kk_{ra}(\theta)}{\mu_a q}\frac{dp_c}{d\theta} \tag{2.30}$$

2.3. *ECUACIÓN DE TRANSPORTE EN MÚLTIPLES FASES*

Con el campo de velocidades especificado en cada fase, la ecuación para el transporte de contaminantes es descrita considerando que puede ser transportado en cada fase (figura 2.2) y por consiguiente determinado en cada una de estas. Las ecuaciones son obtenidas del balance de masa, empleando el campo de velocidades obtenido de la ecuación de flujo, el cual se debe transformar en un campo de velocidades promedio, para no considerar las diferencias de velocidades entre los poros del medio. Estas diferencias son consideradas en un proceso dispersivo de tipo Fickian. Las ecuaciones también contienen un término que involucra las reacciones que pueda presentar el contaminante en el sistema. Por lo tanto, el transporte de contaminantes puede ser dividido entre las fases sólida, líquida y gaseosa, y analizado por separado (figura 2.2).

La cantidad del contaminante en cada fase (α) es denotada por la fracción de masa (ω_α), definida por:

$$\omega_a = \frac{\text{masa del contaminante en la fase } \alpha}{\text{masa de la fase } \alpha}$$

Considerando la fracción de masa de un contaminante, la ecuación del balance de masa del transporte de contaminantes, ésta dada por:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \theta_\alpha \omega_\alpha)}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho_\alpha q_\alpha \omega_\alpha) - \nabla \bullet (\theta_\alpha \rho_\alpha D_\alpha \bullet \nabla \omega_\alpha) + \lambda_\alpha \theta_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha = F_\alpha \qquad (2.31)$$

donde:
- θ_α contenido de flujo volumétrico en la fase α (ecuación 2.2),
- q_α flujo volumétrico de la fase α (ecuación 2.2),
- λ_α grado de reacción de la fase α,
- F_α término de fuentes externas para la fase α.

En la ecuación anterior, el primer término describe el cambio de masa del contaminante en el tiempo, el segundo representa el movimiento del contaminante debido al proceso de advección, el tercer término representa la dispersión considerada como de tipo Fickian y el cuarto considera que los contaminantes presentan reacciones con grado de reacción λ, y el término de la derecha de la ecuación, representa las fuentes y sumideros del sistema.

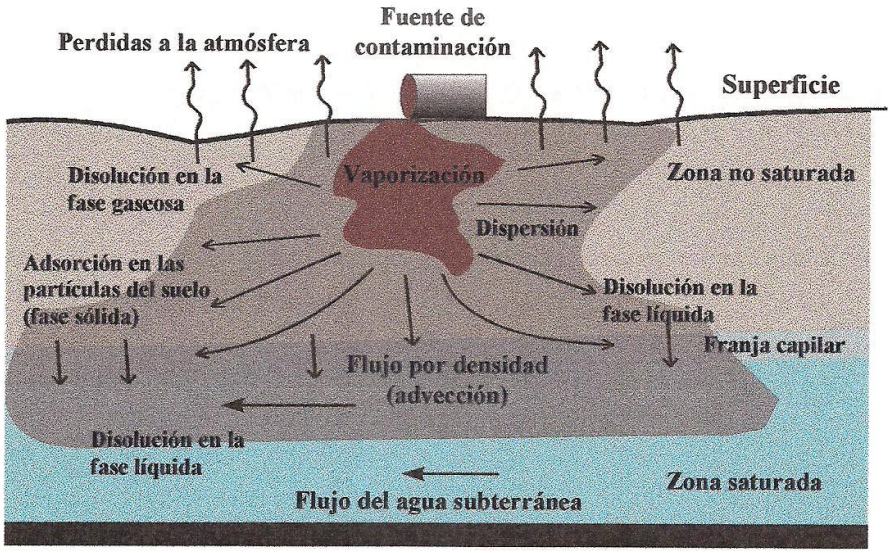


Figura 2.2. ***Esquematización del transporte de contaminantes en múltiples fases.***

El tensor de dispersión en múltiples fases está dado por (Bear, 1979):

$$D_{\alpha_{ij}} = \alpha_{T_\alpha} |\mathbf{v}_\alpha| \delta_{ij} + (\alpha_{L_\alpha} - \alpha_{T_\alpha}) \frac{\mathbf{v}_{\alpha_i} \mathbf{v}_{\alpha_j}}{|\mathbf{v}|} + D_{m_\alpha} \delta_{ij} \tag{2.32}$$

donde:

$D_{\alpha_{ij}}$	componente *i,j*-ésima del tensor de dispersión para la fase α,
α_T, α_L	dispersividad longitudinal y transversal respectivamente,
δ_{ij}	Delta de Kroneker (δ_{ij} =1 con *i=j* y 0 en otro caso),
$\mathbf{v}_\alpha$	velocidad de flujo de la fase α $(\mathbf{v} = q/\theta)$,
$D_{m\alpha}$	coeficiente de difusión molecular de la fase α,
θ	contenido de flujo volumétrico (contenido de humedad),
q	flujo volumétrico (flujo de Darcy).

La ecuación (2.31) está escrita en forma conservativa, pero, por expansión de las derivadas del primer y segundo término y utilizando la ecuación de flujo (ecuación 2.1), la forma no conservativa de la ecuación es:

$$\rho_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \rho_\alpha q_\alpha \bullet \nabla \omega_\alpha - \nabla \bullet (\theta_\alpha \rho_\alpha D_\alpha \bullet \nabla \omega_\alpha) + \lambda_\alpha \rho_\alpha \theta_\alpha \omega_\alpha = F^\alpha \tag{2.33}$$

Esta forma de la ecuación de transporte es útil si se consideran como la parte hiperbólica los dos primeros términos de la ecuación (2.33), es decir:

$$\rho_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \rho_\alpha q_\alpha \bullet \nabla \omega_\alpha = 0 \tag{2.34}$$

suponiendo que la velocidad de advección del contaminante sea $\mathbf{v}_\alpha = \frac{q_\alpha}{\theta_\alpha}$, en cada fase.

Para fines prácticos, antes que usar la fracción de masa del contaminante, es más conveniente usar la concentración volumétrica c_α definida por:

$$c_\alpha = \frac{\text{masa del contaminante en la fase } \alpha}{\text{volumen de la fase } \alpha} = \rho_\alpha \omega_\alpha$$

En este trabajo con preferencia se usará la concentración del contaminante (c), por lo tanto, sustituyendo en la ecuación (2.33) la relación de concentración volumétrica (c_α), la ecuación gobernante es escrita en términos de c, esto es:

$$\theta_\alpha \frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + q_\alpha \bullet \nabla c_\alpha - \nabla \bullet \left(\theta_\alpha D_\alpha \bullet \nabla c_\alpha\right) + \lambda_\alpha \theta_\alpha c_\alpha = F^\alpha \qquad (2.35)$$

La ecuación anterior es la ecuación general para el transporte de contaminantes en múltiples fases.

2.3.1. PARTICIÓN DEL CONTAMINANTE

Como se ha mencionado anteriormente, en la zona no saturada se presentan las tres fases, la fase sólida (medio poroso), la fase líquida (agua) y la fase gaseosa (aire). Por lo tanto, el contaminante se divide en cada una de estas fases, y es analizado y modelado por separado. Sin embargo, cuando se presenta la combinación de fases, también se presentan diferentes procesos de transporte de contaminantes, donde los más importantes para la zona no saturada son: La sorción del contaminante dentro de la fase sólida, la partición del equilibrio vapor-líquido gobernado por la ley de Henry y la transferencia de masa cinética entre fases en este caso aire y agua.

2.3.2. *SORCIÓN*

Muchos contaminantes son adsorbidos dentro de la fase sólida, cuyo grado de movimiento es reducido y determinado por las ecuaciones de transporte. En caso de que exista sorción,

la ecuación de transporte para la fase agua es modificada para incluir un factor de retardación. La principal consideración utilizada en la derivación del factor de retardación, es que el agua actúa como el fluido humedecedor, para que el aire no tenga contacto con la fase sólida. Por lo tanto, se considera una isoterma de equilibrio del tipo Freundlich entre la fase sólida y líquida, esta isoterma tiene la forma:

$$\frac{\text{masa del contaminante en la fase sólida}}{\text{masa de la fase sólida}} = F = k_d c_w$$

donde k_d es conocido como el coeficiente de distribución. El estado de la isoterma que da la concentración del contaminante en la fase sólida es linealmente proporcional para la fase agua. Diferentes valores pueden encontrarse en el texto presentado por Domenico y Schwartz (1990). Utilizando la consideración de que la sorción se produce solamente del agua a la fase sólida, implica que la ecuación para la fase agua sea modificada para incluir la sorción; esto es:

$$\frac{\partial(\theta_w c_w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\theta_s c_s F) + \nabla \bullet (q_w c_w) - \nabla \bullet (\theta_w D_w \bullet \nabla c_w) + \lambda_w \theta_w c_w = F^w \qquad (2.36)$$

Donde se considera que la densidad del agua es constante y ρ_s y θ_s representan la densidad y contenido volumétrico de la fase sólida. Las derivadas temporales de la ecuación son planteadas como:

$$\frac{\partial(\theta_w c_w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\theta_s c_s F) = \frac{\partial}{\partial t}(R\theta_w c_w) \qquad (2.37)$$

donde R es el coeficiente de retardación definido por:

$$R = \left(1 + \frac{\theta_s \rho_s k_d}{\theta_w}\right) \qquad (2.38)$$

Si R es un valor constante en el tiempo, la ecuación general del transporte de contaminantes que considera la sorción, está dada por:

$$R\frac{\partial(\theta_w c_w)}{\partial t} + \nabla \bullet (q_w c_w) - \nabla \bullet (\theta_w D_w \bullet \nabla c_w) + \lambda_w \theta_w c_w = F^w \qquad (2.39)$$

2.3.3. EQUILIBRIO VAPOR-LÍQUIDO

En la sección anterior se describe la sorción de un contaminante dentro de la fase sólida desde la fase líquida. Los contaminantes volátiles muestran la partición entre las fases gaseosa y líquida, esto induce a que la modelación simultánea del transporte de contaminantes entre fases requiera de una descripción del proceso de transferencia de masa. Generalmente se utiliza la consideración donde el contaminante establece una distribución instantánea de equilibrio entre fases. Sin embargo, trabajos recientes (Cho y Jaffe, 1990, 1993), muestran una dinámica significante cuando se muestra la distribución de equilibrio en un tiempo dado. En este caso, el cambio de fase de masa es realizado con la ley de transferencia de masa.

2.3.4. *TRANSFERENCIA DE MASA EN EQUILIBRIO*

En condiciones de equilibrio, la masa es considerada en un cambio instantáneo entre fases. La concentración en cada fase es proporcional a la concentración de la otra fase, relacionada con la ley de Henry's por la siguiente relación:

$$\frac{c_a}{c_w} = H$$

donde H es conocida como la constante de Henry's, cuya relación puede ser planteada en términos de la presión parcial del contaminante en la fase vapor, $P_c = K_H x_c$, donde P_c es la presión parcial del contaminante en la fase aire, K_H es la constante de la ley de Henry's, y x_c es la fracción molar del contaminante en la fase agua. Si la concentración es

directamente proporcional a la concentración del agua, las ecuaciones del balance de masa en la fase individual son incluidas para dar una ecuación en la concentración del agua; esto es:

$$\frac{\partial\left(\left(R\theta_w + H\theta_a\right)\rho_w\omega_w\right)}{\partial t} + \nabla \bullet \left(\left(q_w + Hq_a\right)\rho_w\omega_w\right) - \nabla \bullet \left(\left(\theta_w\rho_w D_w + \theta_a\rho_w HD_a\right) \bullet \nabla\omega_w\right) - \nabla \bullet \theta_a\rho_a D_a\omega_w\nabla H' + \left(\lambda_w\theta_w + H\lambda_a\theta_a\right)\theta_w\rho_w = \left(F^w + F^a\right) \tag{2.39}$$

donde el valor del gradiente H' es muy pequeño y, por lo tanto, no es considerado. Por consecuencia, la ecuación resultante es la siguiente:

$$\frac{\partial\left(\left(R\theta_w + H\theta_a\right)c_w\right)}{\partial t} + \nabla \bullet \left(\left(q_w + Hq_a\right)c_w\right) - \nabla \bullet \left(\left(\theta_w D_w + \theta_a HD_a\right) \bullet \nabla c_w\right) + \left(\lambda_w\theta_w + H\lambda_a\theta_a\right)c_w = \left(F^w + F^a\right) \tag{2.40}$$

Esta ecuación es válida cuando densidad del agua es constante.

2.3.5. TRANSFERENCIA DE MASAS EN NO EQUILIBRIO

Cho y Jaffe (1990) llevaron a cabo una serie de experimentos sugiriendo que el supuesto equilibrio no puede ser del todo válido en un sistema dinámico. Por lo tanto, desarrollaron un modelo de transferencia de fases cinético. En estos experimentos consideraron que el movimiento del contaminante de una fase a otra es determinado por el grado de desequilibrio, por un coeficiente de transferencia de fase cinética, y por el contenido de agua. Para estas transferencias de fases, las ecuaciones representativas son:

$$\frac{\partial c_w}{\partial t} = K\theta_a\left(c_a - Hc_w\right) \tag{2.41}$$

$$\frac{\partial c_a}{\partial t} = -K\theta_a\left(c_a - Hc_w\right) \tag{2.42}$$

donde K es un coeficiente de transferencia de masas. Cuando se usa una transferencia de masas cinética, ésta debe ser utilizada en la ecuación de transporte para ambas fases, esto es:

$$\frac{\partial(\theta_w c_w)}{\partial t} + \nabla \bullet (q_w c_w) - \nabla \bullet (\theta_w \rho_w D_w \bullet \nabla \omega_w) + \lambda_w \theta_w \rho_w \omega_w = K\theta_a(\rho_a \omega_a - H\rho_w \omega_w) \tag{2.43}$$

$$\frac{\partial(\theta_a c_a)}{\partial t} + \nabla \bullet (q_a c_a) - \nabla \bullet (\theta_a \rho_a D_a \bullet \nabla \omega_a) + \lambda_a \theta_a \rho_a \omega_a = K\theta_a(\rho_a \omega_a - H\rho_w \omega_w) \tag{2.44}$$

Estas ecuaciones pueden ser planteadas en términos de la concentración, considerando que la densidad es constante ($\rho_a \nabla \omega_a \approx \omega_a \nabla \rho_a$), entonces las ecuaciones están dadas por:

$$\frac{\partial(\theta_w c_w)}{\partial t} + \nabla \bullet (q_w c_w) - \nabla \bullet (\theta_w D_w \bullet \nabla c_w) + \lambda_w \theta_w c_w = K\theta_a(c_a - Hc_w) \tag{2.45}$$

$$\frac{\partial(\theta_a c_a)}{\partial t} + \nabla \bullet (q_a c_a) - \nabla \bullet (\theta_a D_a \bullet \nabla c_a) + \lambda_a \theta_a c_a = K\theta_a(\rho_a \omega_a - H\rho_w \omega_w) \tag{2.46}$$

Estas son las ecuaciones generales para el transporte de contaminantes para las fases agua y aire respectivamente.

Capítulo III

MÉTODO DEL ADJUNTO LOCALIZADO

3.1. INTRODUCCIÓN

Los problemas de ecuaciones diferenciales parciales con condiciones de frontera no homogéneos son frecuentes. En el tratamiento numérico de este tipo de problemas, el introducir funciones de peso localizadas facilita la resolución de los mismos. En muchos casos, esto se logra cuando se permiten discontinuidades tanto en las funciones de peso como en las funciones de base. Por ello, es importante disponer de una herramienta que permita realizar este tipo de análisis para problemas más generales, que incluyan condiciones de frontera no homogéneas y funciones discontinuas.

Al tratar de extender las fórmulas de Green a funciones discontinuas, es natural recurrir a la teoría de distribuciones o funciones generalizadas. Sin embargo, al utilizar este enfoque, I. Herrera encontró que la incorporación de la estructura de un espacio de Hilbert, o aún, una estructura tecnológica desde el comienzo, da origen a rigidez inconveniente. Por este motivo, prefirió una formulación puramente algebraica, llegando a una formulación muy general (Herrera, 1985), aplicable a cualquier operador lineal. En particular, se ha aplicado a ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, así como a sistemas de tales ecuaciones.

A continuación se explica la manera en que esta metodología se aplica a una sola ecuación diferencial parcial.

3.2. FORMULACIÓN DEL ADJUNTO LOCALIZADO (LAM)

Considere una región Ω y espacios lineales D_1 y D_2, correspondientes a las funciones base y funciones de peso, definidas en Ω (figura 3.1). Se asume que las funciones incluidas en los espacios D_1 y D_2, pueden tener discontinuidades a lo largo de las fronteras interiores, cuya región se denota por Σ. Por ejemplo, en aplicaciones de la Teoría del Método del Elemento Finito, esta región puede ser definida como la unión de todas las fronteras entre los elementos. En el contexto general, el problema considerado es uno donde se prescriben los saltos a lo largo de Σ. Para ello, la ecuación general de valores de frontera con saltos prescritos, está definida por la siguiente ecuación diferencial:

$$L\,u = f_\Omega \qquad en\,\Omega \tag{3.1}$$

donde: Ω puede ser una región puramente espacial o, más general, una región de espacio-tiempo. Ciertas condiciones de frontera y saltos son prescritos en la frontera $(\partial\Omega)$ de Ω y Σ, respectivamente.

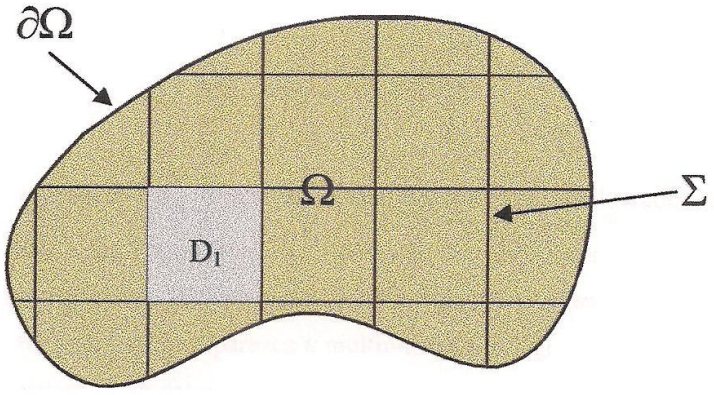


Figura 3.1. ***Definición del dominio de solución.***

Cuando la región Ω es en espacio-tiempo, las condiciones de frontera prescritas incluyen condiciones iniciales. La superficie Σ es la unión de fronteras de Ω, a través de las cuales la solución del problema puede tener discontinuidades.

En el sentido más general, el problema se plantea variacionalmente. Para esto, se introducen los espacios lineales D_1 y D_2 de funciones base u y de peso w definidas en Ω y Σ, respectivamente. Dichas funciones pueden tener discontinuidades de salto en Σ y son lo suficientemente lisas para que $L\,u$ y L^*w estén definidas en Ω y en Σ. La formulación variacional se basa en la propiedad que tiene el adjunto formal L^* *de* L, enunciada en la formulación variacional, de que $wLu - uL^*w$ es una divergencia, es decir:

$$wLu - uL^*u = \nabla \cdot \{\underline{D}(u,w)\} \tag{3.2}$$

Integrando la ecuación (3.2) sobre la región Ω y utilizando el teorema de la divergencia generalizado, se tiene:

$$\int_\Omega \{wLu - uL^*w\}\,dx = \int_{\partial\Omega} R_\partial(u,w)\,dx + \int_\Sigma R_\Sigma(u,w)\,dx, \tag{3.3}$$

donde

$$R_\partial(u,w) = \underline{D}(u,w)\cdot \underline{n}, \tag{3.4}$$

y

$$R_\Sigma(u,w) = -[\underline{D}(u,w)]\cdot \underline{n}. \tag{3.5}$$

En las funciones bilineales (R_∂ y R_Σ) así definidas, quedan involucrados términos "conocidos" asociados a las condiciones de frontera o de salto, y términos en los que aparecen únicamente incógnitas. Por ejemplo, si en la frontera se prescriben condiciones Dirichlet, todos los términos en que aparezca u multiplicada por alguna combinación lineal de valores w y su derivada serán datos, mientras que en los que aparezcan derivadas de u de cualquier orden (mayor que cero), serán incógnitas. Tomando en cuenta esto, una segunda

descomposición que se realiza, es la de los términos de las integrales que se relacionan con las condiciones prescritas, y que las relacionan con términos de los cuales no se tiene información. Esto es algo que usualmente se hace en la Teoría General de las Ecuaciones Diferenciales Parciales al usar fórmulas de Green. La descomposición de la función bilineal $R_\partial(u,w)$, que está relacionada con los términos de frontera, se lleva a cabo de la siguiente manera (indicando por medio de un asterisco el transpuesto de las funciones bilineales, i.e. $C^*(u,w) = C(w,u)$):

$$R_\partial(u,w)) \equiv \underline{D}(u,w)\cdot \underline{n} = B(u,w) - C^*(u,w) \tag{3.6}$$

donde $B(u,w)$ y $C(w,u) = C^*(w,u)$, son dos funciones bilineales. Cuando se consideran problemas de valores iniciales y de frontera, la definición de la forma bilineal depende del tipo de condiciones iniciales y de fronteras. La función $B(u,w)$ tiene la característica de que para cualquier función u que satisfaga las condiciones iniciales y de frontera, $B(u, w)$ es una función lineal de w que no depende de la elección particular de u; denotaremos a esta función lineal con $g_\partial(w)$. Por su parte, la función $C^*(u,w)$ al ser evaluada en funciones u que satisfacen ciertos valores "complementarios de frontera", es una función lineal que depende exclusivamente de w.

De la misma manera, la formulación conveniente de problemas con saltos prescritos requiere de una descomposición de la función bilineal $R_\Sigma(u,w)$, cuya definición es local. La teoría general incluye el tratamiento de operadores diferenciales con coeficientes discontinuos, sin embargo, en esta ocasión solamente se considerarán coeficientes continuos. En este caso, el salto de la función $D(u,w)$ se puede descomponer de la siguiente manera:

$$[\underline{D}(u, w)] = D([u], w) + D(u, [w]), \tag{3.7}$$

donde

$$[u] = u_+ - u_- \qquad \text{y} \quad \dot{u} = (u_+ + u_-)/2. \tag{3.8}$$

Sustituyendo la ecuación (3.7) en la (3.5) obtenemos:

$$R_\Sigma(u,w) = J(u,w) - K^*(u,w), \tag{3.9}$$

donde:

$$J(u,w) = -D([u], \dot{w}) \cdot \underline{n}, \tag{3.10}$$

$$K^*(u,w) = D(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n}. \tag{3.11}$$

La función lineal $K^*(u, \cdot)$, juega un papel similar al de los valores complementarios de frontera $C^*(u, w)$. Una propiedad importante de la función bilineal $J(u,w)$ es que, cuando el salto de u es especificado, esta define una función lineal única de w, la cual es independiente del cambio particular de u. Cuando se consideran problemas de valores iniciales y de frontera con saltos prescritos, la función lineal así definida se denotará por j_Σ.

Introduciendo la notación

$$\langle Pu, w \rangle = \int_\Omega wLu \, dx, \qquad \langle Q^* u, w \rangle = \int_\Omega uL^* w \, dx, \tag{3.12}$$

$$\langle Bu, w \rangle = \int_{\partial\Omega} B(u,w) \, dx, \qquad \langle C^* u, w \rangle = \int_{\partial\Omega} C(u,w) \, dx, \tag{3.13}$$

$$\langle Ju, w \rangle = \int_\Sigma J(u,w) \, dx, \quad \text{y} \qquad \langle K^* u, w \rangle = \int_\Sigma K(w,u) \, dx, \tag{3.14}$$

en donde x denota la medida respecto a la cual se está integrando; la ecuación (3.3) se puede escribir como:

$$\langle Pu,w\rangle-\langle Q^{*}u,w\rangle=\langle Bu,w\rangle-\langle C^{*}u,w\rangle+\langle Ju,w\rangle-\langle K^{*}u,w\rangle. \tag{3.15}$$

Agrupando del lado izquierdo los términos que tienen que ver con los datos y tomando en cuenta que la ecuación (3.15) es una identidad entre funciones bilineales, esto se puede escribir más brevemente como:

$$P - B - J = Q^{*} - C^{*} - K^{*} \tag{3.16}$$

esta identidad se conoce como la fórmula de Green-Herrera para operadores en campos discontinuos (Herrera, 1984 y 1986).

3.3. FORMULACIÓN VARIACIONAL DEL MÉTODO LAM

Hasta ahora no se han introducido en la formulación las condiciones prescritas. Una forma de especificar las condiciones de frontera, es utilizando la relación $B(u,w)=g_{\partial}(w)$ para toda w en D_2, similarmente las condiciones de salto se especifican por medio de $J(u,w)=j_{\Sigma}(w)$. En forma más breve se puede escribir $B(u,\cdot)=g_{\partial}$ en el primer caso, y en $J(u,\cdot)=j_{\partial}$ en el segundo. De hecho, el problema de valores iniciales y de frontera con saltos prescritos, se puede formular desde el punto de vista local por medio de la ecuación (3.1), junto con:

$$B(u,\cdot)=g_{\partial} \quad en\ \partial\Omega \quad y \quad J(u,\cdot)=j_{\partial} \quad en\ \Sigma \tag{3.17}$$

El problema se puede formular variacionalmente como:

$$Pu = f; \qquad Bu=g; \qquad Ju=j, \tag{3.18}$$

donde $f, g, j \in D^{*}_{2}$ y son funcionales lineales definidas como:

$$\langle f,w\rangle=\int_{\Omega} wf_{\Omega}\,dx; \qquad \langle g,w\rangle=\int_{\partial\Omega} g_{\partial}(w)\,dx; \qquad \langle j,w\rangle=\int_{\Sigma} j_{\Sigma}(w)\,dx. \tag{3.19}$$

Las funciones bilineales J y B, son *operadores de frontera* para P *totalmente disjuntos* (los conceptos en cursivas no se explicarán aquí, se pueden encontrar en Herrera (1984, 1885 y 1986), por lo que esta formulación es equivalente a:

$$\langle (P-B-J)u, w\rangle = \langle f-g-j, w\rangle \qquad \forall w \in D_2. \tag{3.20}$$

La ecuación anterior representa "la formulación variacional en términos de los datos", porque Pu, Bu, y Ju están prescritos. Utilizando la fórmula de Green–Herrera (ecuación 3.16), la formulación variacional (ecuación 3.20) se transforma en:

$$\langle (Q^*-C^*-K^*)u, w\rangle = \langle f-g-j, w\rangle \qquad \forall w \in D_2. \tag{3.21}$$

La ecuación anterior representa "la formulación variacional en términos de la información buscada", porque Q^*u, C^*u y K^*u no se prescriben. Las funciones (3.20) y (3.21) son la base del Método del Adjunto Localizado (LAM).

Para plantear un problema en términos de LAM, se aplica el método de residuos pesados y se utiliza la formulación variacional en términos de la información buscada. En el marco de la Teoría Algebraica, esto es equivalente al sustituir el espacio de funciones de prueba, por un subespacio de dimensión finita. Este subespacio es el que genera el sistema finito de funciones de peso. Lo anterior conduce a que la solución aproximada $\hat{u} \in D_1$ satisfaga la siguiente ecuación:

$$\langle (P-B-J)\hat{u}, w^\alpha\rangle = \langle f-g-j, w^\alpha\rangle, \qquad \alpha=1,\ldots,N, \tag{3.22}$$

donde $\{w^1,\ldots,w^N\} \subset D_2$ es el sistema de funciones de peso. La forma específica de las N ecuaciones, depende de las funciones de peso que se elijan y ellas determinan la información contenida en la solución aproximada $\hat{u}$.

La elección de las funciones de peso, y por lo tanto el subespacio de D_2 que se utilice, está sujeto a la manera en que se desee concentrar la información. La formulación variacional en términos de la información buscada, es una herramienta conveniente para hacer el análisis de la información que contiene una solución aproximada. Por lo tanto, las formulaciones variacionales en términos de la información buscada y en términos de los datos, son equivalentes. En este sentido, toda solución $\hat{u}$ de la ecuación (3.22) es solución de:

$$\left\langle \left(Q^* - C^* - K^*\right)\hat{u}, w^\alpha \right\rangle = \left\langle f - g - j, w^\alpha \right\rangle, \qquad \alpha = 1, \ldots, N. \tag{3.23}$$

Los métodos como el del Elemento Finito (FEM), utilizan la formulación variacional (ecuación 3.22), obteniendo en algunos casos métodos equivalentes al LAM. Sin embargo, como se mostrará a continuación, la formulación (ecuación 3.23) tiene la ventaja de proporcionar elementos de juicio para escoger las funciones de peso adecuadas a cada problema.

La solución exacta y la aproximada se relacionan por medio de las ecuaciones (3.23), ya que ambas la satisfacen, por lo que la siguiente ecuación es válida:

$$\left\langle \left(Q^* - C^* - K^*\right)\left(\hat{u} - u\right), w^\alpha \right\rangle = 0, \qquad \alpha = 1, \ldots, N. \tag{3.24}$$

Para obtener, por ejemplo, información de la solución únicamente en las fronteras entre elementos, se deben anular Q^* y C^*. Esto es, las funciones de peso adecuadas para obtener información únicamente en $\sum$ que satisfacen:

$$\left\langle Q^* u, w^\alpha \right\rangle = \int_\Omega u L^* w^\alpha dx \equiv 0, \quad \left\langle C^* u, w^\alpha \right\rangle = \int_{\partial\Omega} C\left(w^\alpha, u\right) dx \equiv 0 \qquad \forall \alpha = 1, \ldots N$$

por lo que cada w^α debe ser solución del problema con condiciones iniciales y de frontera:

$$L^* w^\alpha \equiv 0 \qquad \text{en } \Omega \tag{3.25}$$

$$C(w^{\alpha}, u) \equiv 0 \quad \text{en } \partial\Omega \tag{3.26}$$

En este caso, al sustituir (3.25) y (3.26) en (3.24), se obtiene que la solución aproximada cumple la igualdad $\int_{\Sigma} \mathcal{K}(w,u)\,dx = \int_{\Sigma} K(w,\hat{u})\,dx$. En lo subsecuente, nos referimos a este proceso como "concentrar la información en la funcional K^*".

Se puede hacer una clasificación de la información aún más detallada. En el ejemplo del párrafo anterior, es posible obtener información de la solución únicamente y no de sus derivadas, o de la primera derivada pero no de la solución, ni de las derivadas de orden superior. Para lograrlo, es útil descomponer la función bilineal $\mathcal{K}$ en la suma de las funciones asociadas con las derivadas de u del orden correspondiente $\mathcal{K}^0, \mathcal{K}^1, \ldots$. Esto induce a una descomposición del operador K en las suma $K^0, K^1, \ldots$ donde cada uno de estos operadores está asociado a la función bilineal $\mathcal{K}^0, \mathcal{K}^1, \ldots$. Si por ejemplo, se quiere obtener información de la misma solución únicamente en la superficie de discontinuidades, basta con imponer a las funciones de peso w, además de $Qw=0$, $Cw=0$, las condiciones necesarias para que los operadores $K^1, K^2, K^3 \ldots$, sean cero. De igual forma, es útil descomponer la función bilineal $\mathcal{J}$ en $\mathcal{J}^0, \mathcal{J}^1, \ldots$, etc. y por lo tanto, J en $J^0, J^1, \ldots$, etc. Cuando estas descomposiciones se llevan a cabo, se tiene que:

$$K = \sum_i K^i; \quad J = \sum_i J^i; \quad \mathcal{K} = \sum_i \mathcal{K}^i; \quad \mathcal{J} = \sum_i \mathcal{J}^i; \tag{3.27}$$

Una vez elegido el sistema de funciones de peso que se utilizará, se aproximan las integrales que aparecen en la formulación variacional en términos de la información buscada, de tal forma que se obtenga un sistema de ecuaciones con las incógnitas que correspondan.

En los ejemplos de aplicaciones particulares de LAM a distintos problemas que se han considerado, la solución es única; sin embargo, no se demostrará el resultado. Una

discusión rigurosa de las condiciones bajo las cuales la solución es única requiere del concepto de sistemas TH-completos. Este concepto lo introdujo I. Herrera en publicaciones anteriores (Herrera, 1984; Herrera, 1978), obteniendo conclusiones de gran generalidad, ya que son independientes del orden de las ecuaciones diferenciales y del número de variables involucradas.

3.4. EJEMPLOS ILUSTRATIVOS

El método LAM se aplicó por primera vez a ecuaciones diferenciales ordinarias en Herrera (1985 y 1987). En este trabajo se trató el caso de ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes, obteniéndose resultados que dieron una muestra del poder de esta metodología. Al realizar la aplicación con el propósito de aproximar el valor de la función incógnita o de su derivada en puntos de una malla, se encontraron esquemas de diferencias finitas que proporcionan el valor exacto de las incógnitas en los nodos. A continuación se presenta un ejemplo sencillo que ilustra con detalle algunos de los aspectos mencionados al inicio del capítulo.

Considérese la ecuación diferencial lineal ordinaria de segundo orden,

$$Lu \equiv -\frac{d}{dx}\left(D\frac{du}{dx} - \mathbf{v}\, u \right) + Ru = f \tag{3.28}$$

en el intervalo $\Omega=[0,l]$. La notación que se utiliza en (3.28) es la adecuada para simular el fenómeno físico de transporte con advección y difusión, que es el que nos interesa tratar en la tesis. Las condiciones de frontera pueden ser Dirichlet, Neuman o Robin. Sin embargo, en el ejemplo se tomarán del tipo Dirichlet, esto es, $u\,(0) = u_0$ y $u(l)=u_l$.

Realizando una partición uniforme del intervalo $\Omega=[0,l]$, en $\{0 = x_0, x_1, ..., x_{E-1}, x_E = l\}$, con $x_\alpha - x_{\alpha-1} = h$ para $\alpha = 1, ..., E$. En cada subintervalo $(x_{\alpha-1}, x_\alpha)$, las funciones base y de peso son lo suficientemente diferenciables en cada subintervalo, para que los operadores Lu y L^*w estén definidos y tengan discontinuidades de salto únicamente en los nodos de

participación. En términos de la notación introducida anteriormente, esto significa que la superficie de discontinuidades es $\Sigma = \{x_1, \ldots\ldots, x_{E-1}\}$, y las condiciones de continuidad sobre la función solución u serán:

$$[u] = 0 \quad \text{y} \quad \left[\frac{du}{dx}\right] = 0 \quad \text{en } \Sigma. \tag{3.29}$$

Utilizaremos la formulación variacional en términos de la información buscada (3.21) para plantear el problema. El adjunto formal del operador (3.28) y el operador bilineal $\underline{D}$ son:

$$L^* w \equiv -\frac{d}{dx}\left(D\frac{dw}{dx}\right) - u\frac{dw}{dx} + Rw \tag{3.30}$$

y

$$D(u,w) \equiv u\left(D\frac{dw}{dx} + \mathbf{v}\, w\right) - Dw\frac{du}{dx}. \tag{3.31}$$

La forma de las funciones bilineales J y K depende del valor del vector normal $\underline{\mathbf{n}}$ a Σ. En este caso se puede elegir entre los valores $\underline{\mathbf{n}} = -1$ y $\underline{\mathbf{n}} = 1$; usaremos el valor positivo, porque así la región positiva de Ω coincide con la dirección positiva del eje x. Tomando esto en cuenta, las funcionales asociadas a los saltos (ecuación 3.10) y (ecuación 3.11) son:

$$J^0(u,w) = -[u]\left(D\frac{\dot{dw}}{dx} + V\dot{w}\right), \qquad J^1(u,w) = \dot{w}\, D\left[\frac{du}{dx}\right], \tag{3.32}$$

$$K^0(w,u) = \dot{u}\left[D\frac{dw}{dx} + \mathbf{v}\, w\right], \qquad K^1(w,u) = -[w]\, D\frac{\dot{du}}{dx}, \tag{3.33}$$

en donde J^0, J^1, K^0 y K^1 se obtuvieron de la descomposición ecuación (3.27). En las ecuaciones (3.32) y (3.33), se utiliza una barra cuando es necesario enfatizar que el punto afecta a toda la expresión cubierta por la barra.

Las definiciones de las funciones bilineales *B(u,w)* y *C(w,u)* dependen además de los valores de los vectores normales del intervalo *(0,l)*, del tipo de condiciones de frontera que se especifiquen. Para problemas con condiciones únicamente del tipo Dirichlet, u es prescrita y se tiene dos posibilidades:

$$\mathcal{B}(u,w) = u\left(D\frac{dw}{dx} + \mathbf{v}\,w\right)\underline{\mathbf{n}}, \qquad \mathcal{C}(w,u) = wD\frac{du}{dx}\underline{\mathbf{n}} \quad \text{en } \partial\Omega \tag{3.34}$$

o

$$\mathcal{B}(u,w) = uD\frac{dw}{dx}\underline{\mathbf{n}}, \qquad \mathcal{C}(w,u) = w\left(D\frac{du}{dx} - \mathbf{v}u\right)\underline{\mathbf{n}} \quad \text{en} \quad \partial\Omega \tag{3.35}$$

donde $\partial\Omega = \{0,l\}$ y los vectores normales son $\underline{\mathbf{n}} = -1$ en 0 y $\underline{\mathbf{n}} = 1$ en l. Sin embargo, existen otros dos tipos de condiciones conocidas como de condiciones Neumann o Robin, y la forma de tratar los dos tipos se puede encontrar en (Herrera, 1985; 1993). En lo que sigue utilizaremos únicamente las definiciones de la ecuación (3.34).

Las funciones g_∂ se obtienen de sustituir las condiciones de frontera prescritas en la función B, de lo cual obtenemos:

$$g_\partial(w) = \begin{Bmatrix} -u_0\left(D\dfrac{dw}{dx} + \mathbf{v}\,w\right) & en\ \ x = 0 \\ \\ -u_l\left(D\dfrac{dw}{dx} + \mathbf{v}\,w\right) & en\ x = l. \end{Bmatrix} \tag{3.36}$$

De igual forma, j_Σ es el resultado de sustituir las condiciones prescritas sobre $[u]$ en $\mathcal{J} = \mathcal{J}^0 + \mathcal{J}^1$, de lo cual obtenemos que $j_\Sigma(w) \equiv 0$.

Ahora corresponde decidir qué tipo de aproximaciones queremos obtener y las funciones de peso que son apropiadas para lograrlo. Al aplicar LAM a este problema podemos, por

ejemplo, concentrar la información en los nodos interiores de la partición. Esto es equivalente a concentrar la información en la funcional K^* y eliminar la información que proviene de Q^* y C^*. Las funciones de peso w que concentran la información en la forma deseada, deben satisfacer el problema de condiciones de frontera dado por las ecuaciones (3.25) y (3.26). Para el caso que se analiza, w es solución de:

$$L^* \equiv -\frac{d}{dx}\left(D\frac{dw}{dx}\right) - \mathbf{v}\frac{dw}{dx} + Rw = 0 \quad en\ [0,1], \tag{3.37}$$

$$C(w,u) = wD\frac{du}{dx}\mathbf{n} = 0 \qquad en\ [0\ y\ l] \tag{3.38}$$

La última de estas condiciones se satisface si $w = 0$ en $x = 0$ y en $x = l$. Podemos también elegir entre obtener el valor de la función, el de la derivada de la función, o ambos valores, en los nodos. En este ejemplo desarrollaremos el caso en que concentramos la información en el valor de la función misma en todos los nodos. El esquema para obtener los otros dos casos se puede encontrar en Herrera et al. (1985).

Para obtener únicamente información de la función en los nodos es necesario anular la funcional K^{*1} y evitar que la funcional K^{*0} se anule, esto es:

$$\begin{aligned} K^1(w,u) &= -[w]D\dot{\overline{\frac{du}{dx}}} = 0 \qquad && en\ \Sigma, \\ K^0(w,u) &= \dot{u}\left[D\frac{dw}{dx} + \mathbf{v}w\right] \neq 0 \qquad && en\ \Sigma. \end{aligned} \tag{3.39}$$

la condición requerida se satisface si w es continua ($[w]=0$ en Σ) y tiene primera derivada discontinua ($[dw/dx] \neq 0$ en Σ).

En resumen, las funciones de peso que concentran toda la información en los valores de la solución buscada en nodos interiores, son soluciones del problema de valores iniciales con saltos prescritos, esto es:

$$L^* w = 0, \quad en \quad \Omega; \quad C(w,\cdot) = 0, \quad en \quad \partial\Omega = \{0, l\}; \qquad [w] = 0, \; en \; \Sigma \tag{3.40}$$

La dimensión del espacio de solución de este problema es E-1. Si se utiliza un sistema de peso de E-1 soluciones linealmente independientes (ecuación 3.40), el sistema resultante es de E-1 ecuaciones con E-1 incógnitas de solución única y exacta, pero si la función de peso (w) es 1 en el nodo de interés, la solución es aproximada $(\hat{u})$ e igual a la solución exacta en los nodos.

Cuando los coeficientes de la ecuación son constantes, la ecuación del adjunto homogéneo (ecuación 3.37) es una ecuación lineal con coeficientes constantes que se puede resolver con métodos conocidos. La forma de las soluciones depende de los coeficientes de la ecuación, específicamente de las raíces del polinomio característico. Por ejemplo, cuando este polinomio tiene una sola raíz real ($\mathbf{v}^2 + 4\mathrm{DR} = 0$), las funciones de peso tienen la forma (figura 3.2):

$$w^i(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{h} e^{\xi(x-x_i)} & si \;\; x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \dfrac{x_{i+1} - x}{h} e^{\xi(x-x_i)} & si \;\; x \in [x_i, x_{i+1}], \end{cases} \tag{3.41}$$

donde $\xi = -\mathbf{v}/2D$.

Por lo tanto, el sistema de ecuaciones por resolver se obtiene al sustituir las funcionales obtenidas, con los valores correspondientes de las funciones de peso utilizadas en la formulación variacional (ecuación 3.23). El número de funciones de peso por aplicar está determinado por el número de incógnitas que tenemos, en este caso, E-1 incógnitas requieren de E-1 funciones de peso $\{w^1, \ldots, w^{E-1}\}$.

La formulación variacional en términos de la información buscada que resulta al eliminar la información de las fronteras $\left(\langle C^{*}u, w\rangle \equiv 0\right)$ y del interior $\left(\langle Q^{*}u, w\rangle \equiv 0\right)$, y de aplicar residuos pesados es:

$$\left\langle K^{*}\hat{u}, w^{i}\right\rangle = \left\langle g - f, w^{i}\right\rangle, \qquad i = 1,\ldots, E-1. \tag{3.42}$$

Es importante notar que las integrales sobre la superficie de discontinuidades Σ y sobre la frontera $\partial\Omega$ que aparecen en la formulación variacional en este caso son sumas, ya que la medida de estos conjuntos es cero (recuérdese que $\int dx$ denota la integral respecto a la medida dx).

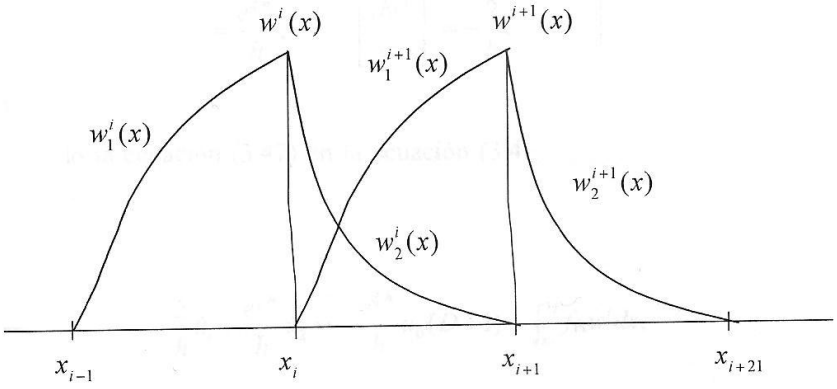


Figura 3.2. ***Representación esquemática de las funciones de peso*** $w^{i}(x)$.

Las funciones de peso (ecuación 3.41) tienen discontinuidades en la derivada en tres puntos, x_{i-1}, x_i y x_{i+1}. Por esto,

$$\left\langle K^{*}\hat{u}, w^{i}\right\rangle = D\sum_{j=i-1}^{j=i+1}\hat{u}_j\left[\frac{dw^{i}}{dx}\right]_j, \tag{3.43}$$

además

$$\langle g, w^i \rangle = u_l D \frac{dw^i}{dx}(l) - u_0 D \frac{dw^i}{dx}(0), \tag{3.44}$$

y

$$\langle f, w^i \rangle = \int_o^l f\, w^i dx. \tag{3.45}$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.43) y (3.45) en (3.42), se tiene:

$$D \sum_{j=i-1}^{j=i+1} \hat{u}_j \left[\frac{dw^i}{dx} \right]_j = u_l D \frac{dw^i}{dx}(l) - u_0 D \frac{dw^i}{dx}(0) - \int_o^l f\, w^i dx. \tag{3.46}$$

y los saltos de la derivada de la i-ésima función de peso (ecuación 3.41) son:

$$\left[\frac{dw^i}{dx} \right]_{i-l} = \frac{e^{\xi h}}{h}, \qquad \left[\frac{dw^i}{dx} \right]_i = -\frac{2}{h}, \qquad \left[\frac{dw^i}{dx} \right]_{i+l} = \frac{e^{-\xi h}}{h}. \tag{3.47}$$

y sustituyendo la ecuación (3.47) en la ecuación (3.46) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$-\frac{2}{h}\hat{u}_i + \frac{e^{\xi h}}{h}\hat{u}_2 = -\frac{e^{\xi h}}{h}u_0(D+1) - \int_{x_0}^{x_2} f_\Omega w^i dx, \tag{3.48}$$

$$\frac{e^{\xi h}}{h}\hat{u}_{i-1} - \frac{2}{h}\hat{u}_i + \frac{e^{-\xi h}}{h}\hat{u}_{i+1} = -\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f_\Omega w^i dx,$$

$$\frac{e^{\xi h}}{h}\hat{u}_{E-2} - \frac{2}{h}\hat{u}_{E-1} = -\frac{e^{\xi h}}{h}u_l(D+1) - \int_{x_{E-2}}^{x_E} f_\Omega w^i dx.$$

El promedio de la solución aproximada $\hat{u}$ no aparece en el sistema de ecuaciones porque se impuso la condición de que ésta fuera continua, con lo que $\hat{u} = u$.

Hasta ahora no se ha introducido ningún espacio de funciones base, esto es, se ha obtenido un sistema de ecuaciones que proporciona la solución exacta en los nodos de la partición $\{x_1, x_2,\ldots, x_{E-1}\}$, sin que intervengan las funciones base. Esto muestra que la información que se obtiene de la solución exacta en una solución aproximada depende exclusivamente de las funciones de peso. En cambio, las funciones base se utilizan para extrapolar la aproximación en los puntos de la malla en toda la región Ω. Si $(\hat{u}_1, \hat{u}_2,\ldots, \hat{u}_{E-1})$ es un vector de valores aproximados de u, y si el conjunto $\{\phi^1,\ldots,\phi^{E-1}\}$ representa a las funciones base, la solución aproximada $\hat{u}$ se expresa como $\hat{u}(x)=\sum_{j=1}^{E-1}\hat{u}_j\phi^j(x)$. Con esto se obtiene una función definida en todo el intervalo.

El método LAM permite trabajar de forma totalmente independiente en el proceso de búsqueda de información (por medio de las funciones de peso), del proceso de interpolación de la información que se obtiene (por medio de las funciones base). Es importante notar que no es necesario presuponer algún tipo de función base al desarrollar el sistema de ecuaciones, y la extrapolación de la información se puede realizar una vez obtenida la aproximación $(\hat{u}_1, \hat{u}_2,\ldots, \hat{u}_{E-1})$. Ésta es otra propiedad importante de la información en términos de la información buscada, ya que los métodos que utilizan la formulación variacional en términos de los datos, para obtener un sistema de ecuaciones lineales, necesitan del desarrollo de la función u en términos de funciones base.

Las aplicaciones de LAM a ecuaciones diferenciales ordinarias con coeficientes variables también introdujeron resultados novedosos. Los métodos que se han obtenido permiten encontrar soluciones tan precisas como se requiera, con un costo computacional relativamente modesto.

Se han utilizado dos propuestas distintas para resolver este tipo de problemas: la primera consiste en que las funciones de peso satisfagan un operador aproximado del operador adjunto en cada intervalo, donde los coeficientes de aquél son polinomios. Esta propuesta se introdujo en el artículo de Celia y Herrera (1989). La segunda consiste en introducir una aproximación a las funciones de peso por medio de polinomios que satisfacen el operador

adjunto homogéneo, únicamente en ciertos puntos de colocación. Esto se propuso por primera vez en el artículo de Herrera (1987).

En la implementación numérica de estos problemas (Herrera et al., 1985; Herrera, 1987) se desarrollaron cuatro algoritmos los cuales buscan información en los nodos únicamente:

Algoritmo 1. El valor de la función y su derivada.
Algoritmo 2. El valor de la función únicamente.
Algoritmo 3. El valor de la derivada de la función únicamente.
Algoritmo 4. El valor de la función en algunos nodos y el de las derivada entre otros.

Para el Algoritmo 1 se obtienen matrices tetradiagonales y para los algoritmos 2 a 4 matrices tridiagonales.

El método se probó con ecuaciones lineales de segundo orden con coeficientes constantes, racionales y combinaciones de funciones exponenciales y trigonométricas. Se obtuvieron algoritmos muy eficientes, que tienen grandes ventajas sobre otros métodos.

3.4.1. ALGORITMO1. El valor de la función y su derivada

Para este caso:

$$k_{i_-}^{0\gamma} u_{i-1} + k_i^{0\gamma} u_i + k_{i_-}^{1\gamma} \frac{du_{i-1}}{dx} + k_i^{1\gamma} \frac{du_i}{dx} = -\left\langle f, w_\gamma^i \right\rangle + O(h') \quad i = 1,..., E-1;\ \gamma = 1,2 \tag{3.49}$$

$$k_1^{0\gamma} u_1 + k_1^{1\gamma} u_1 = \left\langle g_0, w_\gamma^i \right\rangle - \left\langle f, w_\gamma^i \right\rangle + O(h') \qquad \gamma = 1,2 \tag{3.50}$$

$$k_{E_-}^{0\gamma} u_{E-1} + k_{E_-}^{1\gamma} \frac{du_{E-1}}{dx} = \left\langle g, w_\gamma^E \right\rangle - \left\langle f, w_\gamma^E \right\rangle + O(h') \quad \gamma = 1,2 \tag{3.51}$$

donde:

$$k_{i_-}^{0\gamma} = -\left\| q(w_\gamma^i) \right\|_{i-1}; \qquad k_i^{0\gamma} = -\left\| q(w_\gamma^i) \right\|_i;$$

$$k_{i_-}^{1\gamma} = \left\| D(w_\gamma^i) \right\|_{i-1}; \qquad k_i^{0\gamma} = \left\| w_\gamma^i \right\|_i;$$

3.4.2. ALGORITMO 2. El valor de la función únicamente

$$\rho_{i_-} u_{i-1} + \rho_{i_+} u_{i+1} + \rho_i u_i = \sum_{e=1}^{e=i+1} \int_{x_{e-1}}^{x_e} f_\Omega(w^i)\,dx + O(h') \qquad i = 2,\ldots, E-1 \qquad (3.52)$$

$$\rho_{1_+} u_2 + \rho_1 u_1 = \int_{x_0}^{x_2} f_\Omega(w^i)\,dx - \langle g, w^1 \rangle + O(h') \qquad i = 2 \qquad (3.53)$$

$$\rho_{(E-1)_-} u_{E-2} + \rho_{E-1} u_{E-1} = \int_{x_{E-1}}^{x_E} f_\Omega(w^i)\,dx - \langle g, w^{E-1} \rangle + O(h') \qquad i = E-1 \qquad (3.54)$$

donde:

$$\rho_{i_-} = -\left\| q(w^i) \right\|_{i-1}; \quad \rho_i = -\left\| q(w^i) \right\|_i; \quad \rho_{i_+} = -\left\| q(w^i) \right\|_{i+1}$$

para este ejemplo

$$q(w) = D\frac{\partial w}{\partial x} - \mathbf{v}w \qquad (3.55)$$

Los resultados de los algoritmos 3 y 4 son descritos en Herrera et al. (1985).

3.4.3. CONSTRUCCIÓN DE LAS FUNCIONES DE PESO

La construcción de las funciones de peso se debe realizar, de tal forma, que las funciones deben satisfacer la ecuación del adjunto localizado en los N puntos de colocación localizados en cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$ de la partición del intervalo $[0, l]$.

Para cada subintervalo i=1,...,E (caso algoritmo 1), se deben asociar dos funciones linealmente independientes (w_1^i, w_2^i), las cuales deben satisfacer el adjunto de la ecuación. Si se utilizan polinomios de grado G=N+1, la constitución es muy simple. Para w_1^i localizada en el intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ se impone la condición adicional de: $w_1^i(x_{i-1}) = 0$ y tomando $p_1^i = 1$, la función $w_1^i(x) = 0$ se describe como:

$$w_1^i(x) = \sum_{j=1}^{G} p_j^i \xi^j, \qquad \xi = (x\text{-}x_i) \tag{3.56}$$

considerando lo anterior y sustituyendo los datos en el adjunto, éste se transforma en:

$$L^* w_1^i(x) = \sum_{j=1}^{G} \left\{ j(j-1) + \mathbf{v} j\xi + R\xi^2 \right\} \xi^{j-2} p_j^i \tag{3.57}$$

Aplicando la ecuación (3.25) en los puntos de colocación y utilizando $p_1^i = 1$, la ecuación final es:

$$\sum_{j=1}^{G} \left\{ j(j-1) + \mathbf{v} j\xi + R\xi^2 \right\} \xi^{j-2} p_j^i = -\mathbf{v}\xi - R\xi^2 \quad \text{en } N \text{ puntos de colocación} \tag{3.58}$$

La ecuación anterior es de orden NxN y resuelta para N-coeficientes p_2^i,....., p_G^i, donde G=N+1. De manera similar se aplica para $w_2^i(x)$, en este caso es:

$$w_2^i(x) = 0, \qquad w_2^i(x) = \sum_{j=1}^{G} p_j^i \xi^j, \qquad \xi = (x - x_i) \tag{3.59}$$

El sistema (w_1^i, w_2^i) es construido para cada i=1,...,E-1 y aplicado a las ecuaciones (3.49), (3.50) y (3.51), para obtener el algoritmo 1.

En el caso de los algoritmos 2,3, y 4, para cada i=1,…,E-1 la construcción es asociada a una función w^i, con el subintervalo $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Si las funciones satisfacen la ecuación (3.25) junto con las condiciones de frontera y de continuidad (ecuación 3.39), éstas pueden ser determinadas utilizando polinomios de grado G=N+1 donde el procedimiento de obtención de las funciones es similar al del algoritmo 1.

Capítulo *IV*

MÉTODOS DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE EN LA ZONA SATURADA

4.1. INTRODUCCIÓN

El transporte de contaminantes en un medio poroso bajo condiciones de saturación, ha sido descrito por ecuaciones matemáticas, sin embargo, estas ecuaciones requieren ser resueltas mediante métodos analíticos y/o numéricos. Para seleccionar el método adecuado es necesario conocer claramente las condiciones del problema. Algunos problemas de interés práctico presentan fronteras en forma irregular, variabilidad espacial de los coeficientes que aparecen en las ecuaciones diferenciales, condiciones iniciales no uniformes y una forma no analítica de las fuentes (flujo, contaminación). Para estos casos las soluciones analíticas son virtualmente imposibles, excepto para problemas relativamente simples. Por lo tanto, la solución más aceptable para este tipo de problemas es obtenida mediante métodos numéricos.

En la actualidad los métodos numéricos utilizados para resolver la ecuación que describe el transporte de contaminantes, en especial la ecuación de advección-difusión son clasificados

en tres categorías importantes: (1) Métodos *Eulerianos,* (2) Métodos *Lagrangianos,* y (3) Métodos *Eulerianos-Lagrangianos.*

En el método ***Euleriano***, la solución de la ecuación gobernante es obtenida utilizando el método de Diferencias Finitas y/o Elemento Finito con discretización espacial fija. Estos métodos trabajan bien cuando la difusión es el proceso dominante (es decir, número de Peclet, Pe<2) y concentración relativamente baja del contaminante (sin frentes bruscos de contaminación). Sin embargo, cuando la advección es el proceso dominante (Pe>2), se presentan dificultades numéricas (Pinder y Gray, 1977). En general, las soluciones presentan las siguientes características: (1) oscilaciones no físicas en el dominio de frentes bruscos de contaminación, y (2) alta dispersión numérica.

Debido a la naturaleza del transporte advectivo, muchas investigaciones se han enfocado al análisis de características, para complementar la descripción del fenómeno y obtener soluciones aceptables. En este caso, el empleo de los métodos ***Lagrangianos*** constituye una opción atractiva para este tipo de problemas. La ventaja que presentan estos métodos, es la utilización de la deformación de mallas.

Aunque los métodos Lagrangianos son más eficientes que los métodos Eulerianos, éstos presentan la desventaja de las limitaciones ocasionadas por el desplazamiento de mallas deformadas. Sin embargo, son eficientes en la solución de la parte advectiva de la ecuación. En este sentido, una alternativa viable es la combinación de: la simplicidad de la malla fija del método Euleriano, con la capacidad de aproximación en el tratamiento de la componente advectiva del método Lagrangiano, para generar métodos conocidos como Eulerianos-Lagrangianos entre los que se encuentran el método de Características (MOC) y el método Modificado de Características (MMOC).

Más recientemente, Celia et al. (1989a, 1990) implementaron un procedimiento numérico de solución denominado método de Funciones de Prueba Óptimas (OTF). Dicho método se basa en la definición de las funciones de peso que hacen óptima la solución, cuya forma varía según al grado de dependencia de la advección.

Posteriormente, en la misma línea de investigación Celia et al. (1990), presentan el método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM). Este nuevo enfoque incorpora funciones de peso óptimas, que conducen a una formulación en espacio-tiempo con las siguientes características: (1) no considera parámetros arbitrarios, (2) no utiliza ninguna partición del operador o técnica de descomposición de las ecuaciones, (3) genera aproximaciones bajo condiciones de conservación de masa y, (4) contiene una estructura general que considera de manera sistemática el tratamiento de las fronteras.

Por lo tanto, en este capítulo se presenta el análisis de los diferentes métodos de solución de la ecuación de transporte bajo condiciones de saturación, donde se aplican los métodos de: Diferencias Finitas, de Características (MOC), Modificado de Características (MMOC), el método mediante la reducción de orden de la ecuación de advección-dispersión por el método del Adjunto Localizado, y el Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) recientemente desarrollado por Celia et al. (1990) y Herrera et al. (1992, 1993).

4.2. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Las primeras aplicaciones mediante el método de Diferencias Finitas fueron realizadas por Remson (1965) y Pinder y Bredehoeft (1968). Estas aplicaciones fueron enfocadas a una descripción hidrodinámica del flujo del agua subterránea. En la solución por Diferencias Finitas, la distribución de los nodos es regular debido a que el método no acepta irregularidades en la malla. Alrededor de cada nodo existe una región de frontera limitada por las proyecciones de los ejes de coordenadas en estudio. A esta región se le conoce como bloque o celda nodal (figura 4.1).

Para la evaluación del gradiente espacial, la derivada parcial de una variable es expresada en términos de la diferencia entre 2 valores nodales cercanos. Por ejemplo, para la componente x, el gradiente de concentración $\frac{\partial C}{\partial x}$ en los nodos $i \pm \frac{1}{2}$ es evaluado mediante una media aritmética.

$$\frac{C_{i\pm1} - C_i}{x_{i\pm1} - x_i} \tag{4.1}$$

Con la aproximación en diferencias finitas, el valor nodal de C_i es relacionado algebraicamente con los valores de dos nodos cercanos para un problema en una dimensión, y de cuatro para un problema bidimensional, etc. Las componentes de los términos de segundo orden por ejemplo, el coeficiente de dispersión *(D)* en los nodos $i \pm \frac{1}{2}$, es evaluado por una media geométrica, esto es:

$$D_{i+1/2} = \frac{D_{i\pm1} + D_i}{2} \tag{4.2}$$

o bien mediante una media armónica de la siguiente forma:

$$D_{i+1/2} = \frac{\left(\frac{\Delta x}{D}\right)_{i\pm1} + \left(\frac{\Delta x}{D}\right)_i}{\Delta x_{i\pm1} - \Delta x_i} \tag{4.3}$$

donde:

$$\Delta x_i = \left| x_{i\pm\frac{1}{2}} - x_i \right| \qquad \Delta x_{i\pm1} = \left| x_{i\pm\frac{1}{2}} - x_{i\pm1} \right| \tag{4.4}$$

Por lo tanto, las aproximaciones son valores generalizados para un sistema de nodos irregulares. El término advectivo de primer orden en la ecuación de transporte $\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)$, es aproximado por diferencias finitas centrales o mediante un valor relativo central.

$$\frac{C_{i+\frac{1}{2}} - C_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \tag{4.5}$$

donde $C_{i\pm\frac{1}{2}} = 0.5\left(C_{i\pm1} + C_i\right)$, representa el cambio del valor relativo central.

En algunos casos se presenta la inconsistencia física del método, en este caso, es necesario relacionar la velocidad de transporte y el incremento de tiempo para obtener soluciones aceptables, mediante la siguiente expresión:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\mathbf{v}} \tag{4.6}$$

Esta relación no garantiza una solución satisfactoria, no obstante, es útil para diferentes combinaciones de parámetros que muestren oscilaciones inaceptables debidas a fuertes discontinuidades en la solución de la derivada de orden superior. Para pequeñas distribuciones iniciales de concentración, los criterios son generalmente suficientes. En muchos casos es necesario usar pasos del tiempo más pequeños para garantizar una solución aceptable.

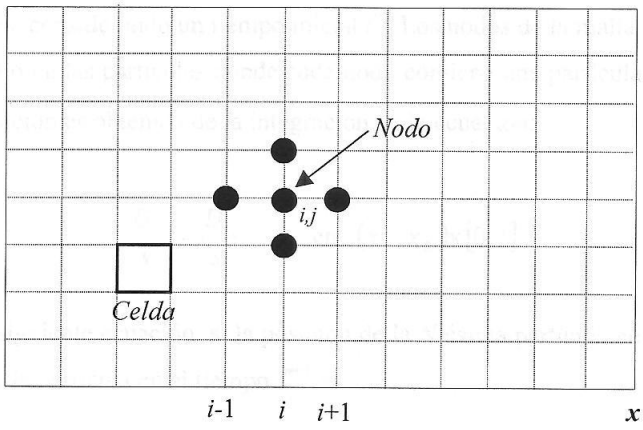


Figura 4.1. *Discretización de la malla para el método de Diferencias Finitas.*

4.3. MÉTODO DE CARACTERÍSTICAS (MOC)

Este método utiliza la técnica del movimiento de partículas para resolver el término de advección, donde la partícula es asociada al movimiento de la concentración de soluto a través del campo de velocidades del agua subterránea. La concentración y la posición en el sistema son asociadas a cada partícula considerando pequeños incrementos de tiempo.

El método de características (MOC), utiliza en sus aproximaciones la técnica del rastreo de partículas, en relación directa con el método de diferencias finitas en bloques centrados implementado por la U.S. Geological Survey para el modelo de transporte de soluto (Konikow y Bredehoeft, 1978). Una de las razones para la aplicación de esta técnica es la minimización de la dispersión numérica.

En el desarrollo que presenta el Método de Características, las partículas son definidas en cada incremento de tiempo (Δt), para que coincidan con los nodos de la malla fija de advección, esto es, considerando un tiempo inicial t^n. Los nodos de la malla son designados con el movimiento de las partículas donde cada nodo contiene una partícula en el intervalo $\left[t^n, t^{n+1}\right]$ y su posición es obtenida de la integración de la ecuación:

$$\frac{D_x}{\mathbf{v}} = \frac{D_t}{s} \qquad \text{en} \quad (x_L, x_R)\text{x}[0,t] \tag{4.7}$$

De acuerdo a la siguiente ecuación, si la posición de la N-ésima partícula en el tiempo t^n es x_N, la posición de la partícula en el tiempo t^{n+1} es:

$$x_N^{n+1} = x_n + \int_n^{n+1} \frac{\mathbf{v}}{s} dt \tag{4.8}$$

donde: $\mathbf{v}$ y s están dadas en x_N^{n+1} y determinadas explícitamente en cada nodo (i). Para un caso en particular si $\frac{\mathbf{v}}{s} = \text{cte}$ o Δt es muy pequeño, las curvas características son líneas

rectas y pueden ser aproximadas como tales. En estas condiciones, el incremento de tiempo es determinado por:

$$\Delta t \leq Cu \min\left(\frac{\Delta x_i}{\mathbf{v}_i}\right) \tag{4.9}$$

donde ***Cu*** es el número de **Courant**, que representa el criterio para la determinación del incremento del tiempo (Δt).

El primer paso del método de características es generar partículas repartidas en una malla uniforme. El número de partículas localizadas en cada celda en el nivel superior o inferior, es de acuerdo como se presente el gradiente de concentración relativo (**DCCELL),** es definido como:

$$\mathrm{DCCELL}_{ijk} = \frac{CMAX_{ijk} - CMIN_{ijk}}{CMAX - CMIN} \tag{4.10}$$

donde:

$CMAX_{i,j,k} = \max_{kk=k-1}^{k+1}\left(\max_{jj=j-1}^{j+1}\left(\max_{ii=i-1}^{i+1}\left(C_{ii,jj,kk}\right)\right)\right)$	Máxima concentración en la vecindad inmediata de la celda (i,j,k);
$CMIN_{\mathrm{i,j,k}} = \min_{kk=k-1}^{k+1}\left(\min_{jj=j-1}^{j+1}\left(\min_{ii=i-1}^{i+1}\left(C_{ii,jj,kk}\right)\right)\right)$	Mínima concentración inmediata de la celda (i, j, k);
CMAX	Máxima concentración de toda la malla;
CMIN	Mínima concentración de toda la malla.

Además, cada partícula es asociada a ciertas condiciones, tales como las coordenadas y la concentración. La concentración media de una celda de diferencias finitas al final de cada paso de transporte debido a la advección ($C_{i,j,k}^{n^*}$), es obtenida por la adición de la

concentración de todas las partículas que son localizadas en la celda y dividida entre el número de partículas, esto es:

$$C_{i,j,k}^{n^*} = \frac{1}{NP_{i,j,k}} \sum_{l=1}^{NP_{i,j,k}} C_l^n \quad \text{si } NP_{i,j,k} > 0 \tag{4.11}$$

Si el número de partículas es cero, la concentración determinada en t^{n+1}, debe ser igual a la concentración de la celda en el nivel de tiempo t^n, debido a que el cambio de concentración sobre una celda debe ser pequeña o dominante por alguna fuente externa.

$$C_{i,j,k}^{n^*} = C_{i,j,k}^n \quad \text{si } NP_{i,j,k} = 0 \tag{4.12}$$

Por otro lado, el término de dispersión es evaluado considerando las concentraciones de un nivel intermedio ($C_{i,j,k}^{n^*}$) y la concentración de un nivel anterior ($C_{i,j,k}^n$) de la siguiente forma:

$$C_{i,j,k}^{\hat{n}} = \omega C_{i,j,k}^{n^*} + (1-\omega) C_{i,j,k}^n \tag{4.13}$$

Donde la concentración ($C_{i,j,k}^{\hat{n}}$) es utilizada para calcular los cambios en la concentración debida a la dispersión durante el paso del tiempo o al final de cada paso, por lo tanto, es representada como:

$$\frac{D\,C_{disp}}{D\,t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \tag{4.14}$$

La ecuación (4.14) es resuelta por el método de Diferencias Finitas explícito, sin embargo, existe un criterio de estabilidad para poder aplicar el método adecuadamente. Este criterio consiste en determinar el tamaño del paso del tiempo (incremento), que de acuerdo con Paeceman (1977), es obtenido con la siguiente relación:

$$\Delta t \leq \frac{0.5}{\left(\frac{D_{xx}}{\Delta x^2} + \frac{D_{yy}}{\Delta y^2} + \frac{D_{zz}}{\Delta z^2}\right)} \tag{4.15}$$

con este criterio y el número de Courant, se establecen los incrementos de tiempo, considerando el más pequeño entre ambos.

4.4. MÉTODO MODIFICADO DE CARACTERÍSTICAS (MMOC)

El método Modificado de Características (MMOC) fue desarrollado para aproximar el término de advección en forma regresiva, sacrificando la eficiencia computacional (Russell y Wheeler, 1983; Cheng, et. al., 1984). El MMOC es similar al MOC, excepto en el tratamiento del término de advección. La técnica del MOC utiliza un número de partículas progresivas en el tiempo, mientras que el MMOC localiza partículas ficticias en los puntos nodales de la malla fija en el tiempo t^{n+1}, entonces, la partícula es rastreada en forma regresiva con la finalidad de encontrar el nivel de tiempo t^n. Por lo tanto, la concentración asociada en este punto es utilizada para aproximar la componente $C_m^{n^*}$ (figura 4.2), de la siguiente manera:

$$C_m^{n^*} = C^n\left(x_p\right) = C^n\left(x_m - d\right) \tag{4.16}$$

donde:

x_p	Posición de la partícula que recorrió desde el punto m sobre el incremento de tiempo.
x_m	Posición del vector en el punto nodal m.
d	Desplazamiento característico o la distancia a lo largo de la trayectoria de la partícula desde x_p a x_m.
$C^n\left(x_p\right)$	Concentración en la posición x_p en el tiempo t^n, generalmente interpolada.

Las curvas características son fijas en un punto en el tiempo t^n, y para encontrar un buen avance en el nivel de tiempo t^{n+1}, el movimiento del punto se realiza mediante métodos de rastreo de partículas que se puedan resolver en tiempos sucesivos y en mallas de características irregulares. Esta solución de la malla en el nivel de tiempo t^{n+1}, es controlada por el método pero no por el flujo.

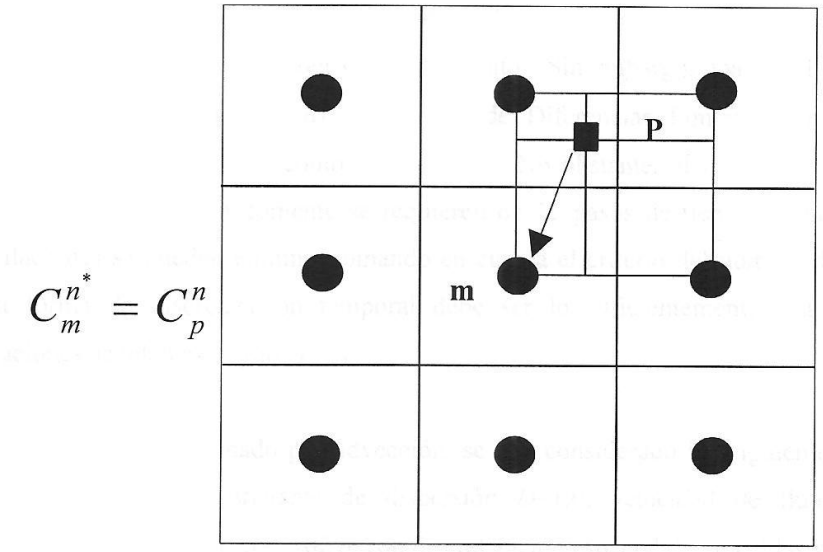


Figura 4.2. *Ilustración del Método Modificado de Características.*

4.5. EJEMPLO 1

De acuerdo con los fundamentos presentados para el método de Diferencias Finitas, se han planteado dos modelos en una dimensión, uno dominado por advección y otro por dispersión. Se ha realizado un análisis de los resultados obtenidos, utilizando para su solución los métodos numéricos de Diferencias Finitas Implícitas y el método del Elemento Finito (descrito en el capítulo 6), comparando éstos con la solución analítica de la ecuación.

Los parámetros físicos para el problema dominado por dispersión son: longitud L=2.5 m, dispersión D=0.01, velocidad v=0.05 m/d y espaciamiento entre nodos Δx= 0.05 m. El problema es altamente dominado por dispersión debido a que presenta un número de Peclet Pe=0.25.

La figura 4.3a presenta los resultados para un tiempo de simulación de 10 días y se observa que para un número de Courant Cu=0.1 correspondiente a un incremento de tiempo Δt=*0.1d* y *100* pasos de tiempo, el ajuste es bueno, tanto por el método de Diferencias Finitas, como por el método del Elemento Finito. Sin embargo, cuando el incremento de tiempo es mayor (Δt=*0.91 d*), el método de Diferencias Finitas presenta dispersión numérica (figura 4.3b), así como oscilaciones. No obstante, el tiempo de simulación es menor debido a que únicamente se requieren de 11 pasos de tiempo. Generalmente, las oscilaciones se pueden eliminar tomando en cuenta el criterio del número de Courant, de esta forma, la discretización temporal debe ser lo suficientemente fina para obtener soluciones aceptables (figura 4.3a).

Para el problema dominado por advección, se han considerado los siguientes parámetros: longitud L=1.0 m, coeficiente de dispersión D=1.0, velocidad de flujo v=10^4 m/d, espaciamiento de malla Δx= 0.02 m con discretización espacial de 50 celdas y un tiempo de simulación de t=5x10^{-5} d, el problema es fuertemente dominado por advección con número de Peclet, Pe= 200.

En la figura 4.3c y 4.3d, se muestran los resultados de la solución para estas condiciones. Haciendo énfasis en la utilización de una discretización de la malla de acuerdo a las características del modelo, se puede observar que para un número de Courant Cu= 0.5, se tiene un incremento de tiempo Δt= 10^{-5} d correspondiente a 100 pasos de tiempo (Figura 4.3c). La aplicación del método de Diferencias Fintas no es confiable debido a que presenta dispersión numérica además de oscilaciones, en tanto, el método del Elemento Finito presenta únicamente dispersión numérica.

Una discretización temporal más grande, permite obtener resultados menos confiables para ambos métodos (figura 4.3d). No obstante, la dispersión numérica es más alta debido a que el número de Courant es mayor a la unidad, Cu=2.27, correspondiente a Δt= 4x10^{-6} d y 11 pasos de tiempo, provocando mayor inestabilidad en la solución, pero sin la presencia de oscilaciones.

En resumen, se puede decir que le método de Diferencias Finitas y del Elemento Finito, son aceptados para problemas dominados por dispersión, pero no así para problemas dominados por advección que requieren de nuevas técnicas de solución.

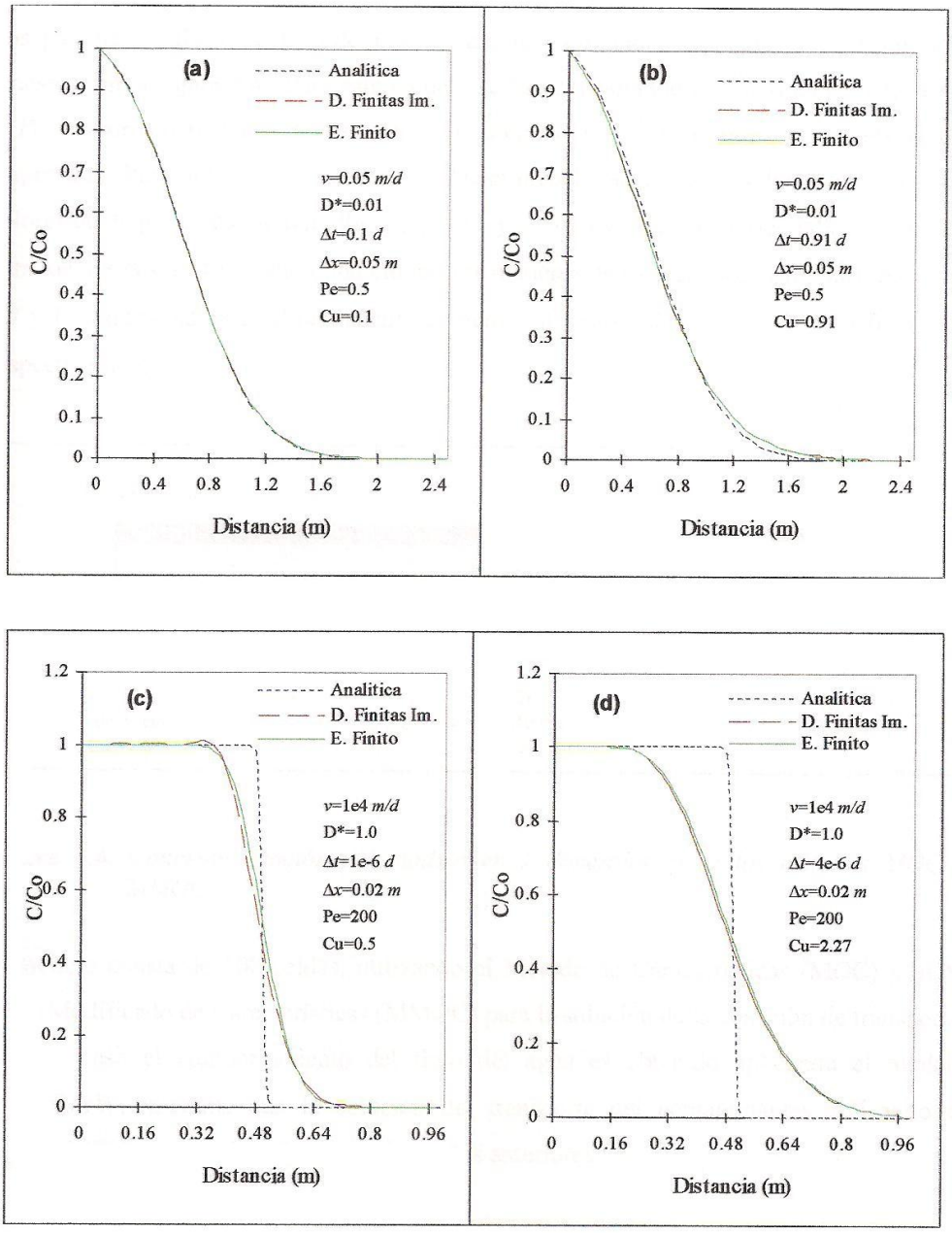


Figura 4.3. *Comparación de la solución de la ecuación de transporte mediante el método analítico y numérico, (a) y (b), t=10 días, (c) y (d), t= 5e-5 días.*

4.6. EJEMPLO 2

Los parámetros físicos del modelo, así como las condiciones iniciales y de frontera se muestran en la figura 4.4. Para este modelo se han considerado números de Peclet, Pe=20 y Pe=2, correspondientes a los casos: i). dominado por advección, y ii). advección-dispersión. Para obtener los números de Peclet mencionados, se consideran los siguientes valores de dispersividad longitudinal, α_L = 0.1 y 1, con espaciamiento de malla Δx= 0.2 cm para los dos casos. Con estas condiciones, los números de Courant son: Cu= 0.0125, 0.333, 0.7 y 1, correspondientes al incremento de tiempo de: Δt= 0.001, 0.027, 0.057 y 0.08 días, respectivamente.

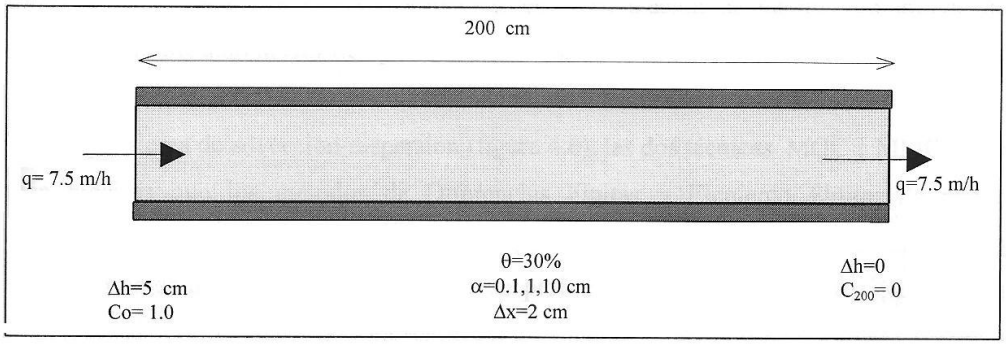


Figura 4.4. *Conceptualización del modelo en 1 dimensión para los métodos MOC y MMOC.*

El modelo consta de 100 celdas, utilizando el Método de Características (MOC) y el M étodo Modificado de Características (MMOC) para la solución de la ecuación de transporte. En este caso el comportamiento del flujo del agua es obtenido aplicando el modelo MODFLOW, mientras que la solución del transporte del contaminantes aplicando el modelo MT3D, haciendo referencia a los datos anteriores.

Para problemas dominados por advección, los números de Peclet son muy altos (figura 4.5), no así los números de Courant que deben ser pequeños. Una solución aceptable con estas características se presenta cuando la discretización de la malla es muy fina en la parte

temporal, sin embargo, el tiempo de simulación es alto, generando un esfuerzo computacional considerable. La figura 4.5 muestra los resultados para el problema dominado por advección, para un tiempo de simulación de 0.8 días. Se puede observar que para números de Courant muy pequeños (Cu=0.0125 y 0.33), el MOC presenta mejor aproximación que el MMOC, principalmente para el primer caso (figura 4.5a), no obstante, las dos técnicas presentan dispersión numérica. Si el número de Courant es cercano a la unidad, las dos técnicas presentan el mismo comportamiento (figura 4.5c y 4.5d), con dispersión numérica y oscilaciones, dando lugar a utilizar incrementos de tiempo pequeños, pero respetando el criterio del número de Courant. En este caso la técnica que presenta mejor aproximación en menor tiempo de simulación es MMOC para un incremento de tiempo de 0.057 correspondiente a un número de Courant de 0.7. La desventaja que presenta MOC para este tipo de problemas es la utilización de un número grande de partículas implicando mayor tiempo de simulación.

Para el problema de advección-dispersión (figura 4.6), las dos técnicas MOC y MMOC son más precisas que los métodos de Diferencias Finitas y Elemento Finito. Se puede considerar que para un problema dominado por dispersión, la aplicación de un método Euleriano es confiable, sin embargo, para un problema de advección-dispersión presenta inestabilidad, por lo que la aplicación de un método Euleriano-Lagrangiano presenta resultados más precisos (figura 4.6), permitiendo una discretización del dominio más flexible comparada con los métodos Eulerianos.

En general, las técnicas MOC y MMOC, tienen la desventaja de requerir una discretización temporal muy fina debido a que están restringidos a un número de Courant menor a la unidad. Además estas técnicas no presentan la propiedad de conservación de masa.

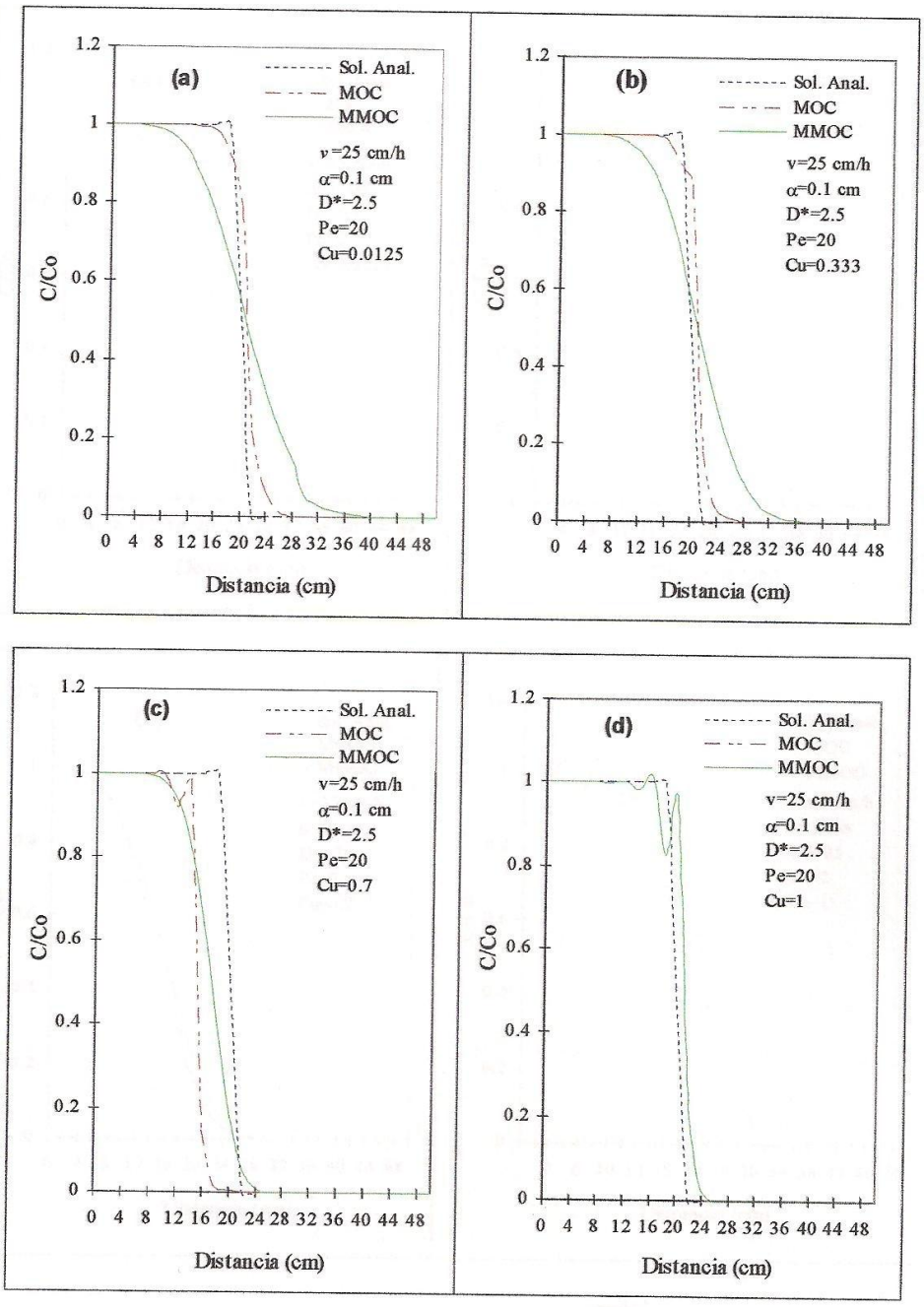


Figura 4.5. *Comparación de la solución analítica y numérica de la ecuación de transporte de contaminantes dominada por advección, para un tiempo de t=0.8 días, con diferentes incrementos de tiempo en la solución: (a) Δt=0.001, (b) Δ t =0.027, (c) Δ t =0.057 y (d) Δ t =0.08.*

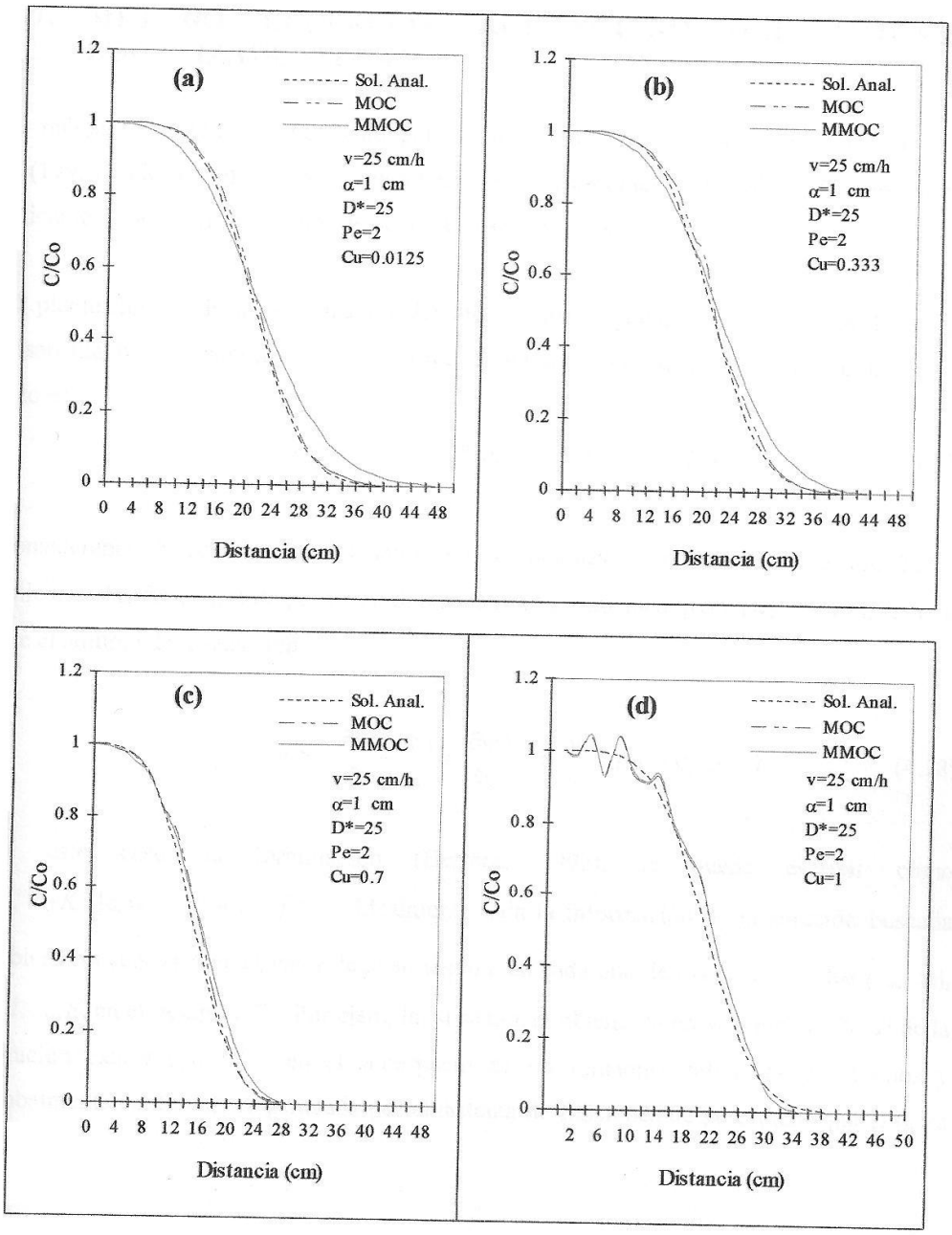


Figura 4.6 *Comparación de la solución analítica y numérica de la ecuación de transporte de contaminantes dominado por dispersión, para un tiempo de t=0.8 días, con diferentes incrementos de tiempo en la solución: (a) Δt=0.001, (b) Δ t =0.027, (c) Δ t =0.057 y (d) Δ t =0.08.*

4.7. MÉTODO EULERIANO-LAGRANGIANO DEL ADJUNTO LOCALIZADO (ELLAM)

El método ELLAM fue propuesto por el Grupo ELLAM en los artículos de Celia et al.(1990) y Herrera et al. (1992), para coeficientes constantes y variables. En este trabajo únicamente se explicará el caso de coeficientes constantes.

El planteamiento de la formulación del método del Adjunto Localizado (LAM), se ha desarrollado en el capítulo 3 en su forma variacional y está dado por la ecuación (3.21), esto es:

$$\langle (Q^* - C^* - K^*)c, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle. \tag{4.17}$$

Considerando la ecuación de transporte en condiciones de saturación (ecuación 2.2) y aplicando las funciones de peso (w), donde el cambio satisface que $Q(w)=0$ en Ω, se tiene que el adjunto de la ecuación es:

$$L^* w \equiv -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial w}{\partial x} \right) - \mathbf{v}\frac{\partial w}{\partial x} + Rw = 0, \text{ en } \Omega. \tag{4.18}$$

En este caso, la formulación (Herrera, 1992), se puede escribir como $\langle (C^* + K^*)c, w \rangle = \langle g + j - f, w \rangle$. Idealmente toda la información de la solución buscada debiera concentrarse en el valor de la solución c en cada uno de los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i=1,\ldots,E$, en el tiempo t^{n+1}. Por ejemplo, si se quiere obtener la proyección $L^2([0, l]$ de la solución exacta $c(x, t^{n+1})$, en el subespacio de las funciones bilineales por tramos y globalmente continuas, es generada por el sistema de funciones de peso dadas por (Figura 4.7a):

$$w^i\left(x, t^{n+1}\right) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{\Delta x}, & x_{i-1} \le x \le x_i \\ \dfrac{x_{i+1} - x}{\Delta x}, & x_i \le x \le x_{i+1}, \end{cases} \tag{4.19}$$

Si se escogen funciones de peso continuas $([w] = 0)$ pero con derivada discontinua $([\partial w/\partial x] \neq 0)$, algunas propiedades que deben tener, son:

a) El soporte de w^i es $\Omega^i = \Omega_1^i \cup \Omega_2^i$ $(i = 1,...E-1)$ (Figura 4.7b)

b) w^i satisface la ecuación 4.52 $(L^* w^i = 0)$ en Ω

c) En $t = t^{n+1}$, w^i se reduce a las funciones lineales por tramos

d) w^i es continua

e) El salto $\left[\dfrac{\partial w^i}{\partial x}\right]$ es constante en $\sum_i$

f) En las fronteras laterales de Ω, se imponen condiciones de frontera que eliminan toda la información $(c(w^i, \cdot) = 0)$.

Por inspección de las ecuaciones (Herrera et al., 1992) se tiene:

$$w^i = 0, \partial_D\Omega; \quad \text{en} \quad \partial_D\Omega; \tag{4.20}$$

$$D\frac{\partial w^i}{\partial x} + \mathbf{v}\, w^i = 0, \text{ en } \partial_N\Omega; \tag{4.21}$$

$$\frac{\partial w^i}{\partial x} = 0, \text{en } \partial_F\Omega. \tag{4.22}$$

Cuando el soporte de w^i no intersecta fronteras laterales, las condiciones se satisfacen automáticamente (ecuación 4.20 a 4.22). Celia *et al.* (1990), utilizaron funciones de peso con coeficientes constantes (Figura 4.7b); esto es:

$$w^i(x,t) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{\Delta x} + \mathbf{v}\dfrac{t^{n+1} - t}{\Delta x}, & (x,t) \in \Omega_1^i, \\ \dfrac{x_{i+1} - x}{\Delta x} + \mathbf{v}\dfrac{t^{n+1} - t}{\Delta x}, & (x,t) \in \Omega_2^i, \\ 0 & \textit{cualquier otro (x, t).} \end{cases} \tag{4.23}$$

Estas funciones de peso satisfacen la ecuación (4.52) y son continuas en Ω ($[w]=0$), y tienen primera derivada discontinua ($[dw/dx] \neq 0$). Pero cuando el soporte Ω^i intersecta las fronteras laterales, no cumplen con la condición *f*).

Tomando en cuenta las ecuaciones es claro que para esta elección, $K^l(w,\ c)$ se anula idénticamente (Herrera et al., 1992), mientras que:

$$K^0\left(w^i, c\right) = \left(1 + \mathbf{v}_\Sigma^2\right)^{-1/2} \overset{\bullet}{c}\left[D\frac{\partial w^i}{\partial x}\right]. \tag{4.24}$$

La última expresión no se anula, a lo más, en tres líneas de discontinuidad: Σ_{i-1}, Σ_i y Σ_{i+1}. Entonces:

$$\left\langle K^* c, w^i \right\rangle = \sum_{j=i-1}^{i+1} \left\langle K_j^* c, w^i \right\rangle. \tag{4.25}$$

donde los saltos son:

$$\left[\frac{\partial w}{\partial x}\right]_{i-1} = \frac{1}{\Delta x}; \qquad \left[\frac{\partial w}{\partial x}\right]_i = \frac{-2}{\Delta x}; \qquad \left[\frac{\partial w}{\partial x}\right]_{i+1} = \frac{1}{\Delta x}. \tag{4.26}$$

Cuando la región Ω^i no intersecta las fronteras laterales, los términos de frontera se anulan y el principio variacional en términos de la información buscada se reduce a $\left\langle \left(C_{n+1}^* + K^*\right)c,\ w^i \right\rangle = \left\langle g_n - f,\ w^i \right\rangle$, entonces, aplicando la ecuación de transporte (ecuación 2.2) se tiene:

$$\begin{aligned} &\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} c(x,t^{n+1})\, w^i\left(x,t^{n+1}\right)dx - \frac{D}{\Delta x}\left\{ \int_{t^n}^{t^{i+1}} c(\beta_{i-1}(t),t)\, dt \right. \\ &\qquad \left. -2\int_{t^n}^{t^{n+1}} c(\beta_i(t),t)\, dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} c(\beta_{i+1}(t),t)\, dt \right\} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}^*} c(x,t^n) w^i(x,t^n)\, dx + \int_\Omega f_\Omega w^i\, dx\, dt \end{aligned} \tag{4.27}$$

donde los términos desconocidos se han agrupado del lado izquierdo de la ecuación y los datos en el derecho. El sistema de ecuaciones que se obtienen en este caso es:

$$\left(\frac{\Delta x}{6}-\frac{D\Delta t}{\Delta x}\right)c_{i-1}^{n+1}+2\left(\frac{\Delta x}{3}+\frac{D\Delta t}{\Delta x}\right)c_i^{n+1}+\left(\frac{\Delta x}{6}-\frac{D\Delta t}{\Delta x}\right)c_{i+1}^{n+1}=$$

$$\int_\Omega f_\Omega w^i dxdt+\Delta x(\beta_1 c_{i-Nc-2}^n+\beta_2 c_{i-Nc-1}^n+\beta_3 c_{i-Nc}^n+\beta_4 c_{i-Nc+1}^n), \qquad (4.28)$$

donde: $c(x_j, t^k)=c_j^k$ (utilizando la notación general), Nc es la parte entera del número de Courant $\left(Cu=\frac{\mathbf{v}\Delta t}{\Delta x}\right)$, $\alpha=1-(Cu-Nc)$ y

$$B_1=\frac{1}{6}-\frac{\alpha}{2}+\frac{\alpha^2}{2}-\frac{\alpha^3}{6},\ \beta_2=\frac{2}{3}-\alpha^2+\frac{\alpha^3}{2},\quad \beta_3=\frac{1}{6}+\frac{\alpha}{2}+\frac{\alpha^2}{2}-\frac{\alpha^3}{2},\quad \text{y}$$

$$\beta_4=\frac{\alpha^3}{6}.$$

Obsérvese que las aproximaciones propuestas concentran toda la información en los nodos y, por lo tanto, únicamente se encontrarán aproximaciones del valor de la solución en estos puntos.

Cuando la región Ω^i intersecta la frontera de entrada, se pueden dar muchos casos distintos. Como un ejemplo, ver el caso ilustrado en la figura (4.8), para condiciones de flujo prescritas. En este caso, la ecuación $\langle (C^*+K^*)c, w\rangle = \langle g-f, w^i\rangle$. Cuando el flujo se prescribe en la frontera $x = 0$ se obtiene:

$$\int_{x_{I-1}}^{x_{I+1}} c(x,t^{n+1})w^i(x,t^{n+1})\,dx+D\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} c_x^{n+1}(x)w_x^{n+1}(x)\Delta t(x)\,dx$$

$$=-\int_{t_{i+1}}^{t_{i-1}^+} w^i\left\{D\frac{\partial c}{\partial x}(0,t)-\mathbf{v}c(0,t)\right\}dt+\int_\Omega f_\Omega w^i dx\,dt, \qquad (4.29)$$

donde $\Delta t = t^{n+1} - t^*(x)$. Con el fin de compartir las ecuaciones e integrando por partes el término difusivo por segunda vez, se obtiene:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} c_x^{n+1}(x) w_x^{n+1}(x) \Delta t(x)\, dx = -D\Big(c_{i-1}^{n+1} w_x^{n+1}(x_{i-1})\, \Delta t(x_{i-1}) - 2\, c_i^{n+1} w_x^{n+1}(x_i)\, \Delta t(x_i)$$
$$+ C_{i+1}^{n+1}\, w_x^{n+1}(x_{i+1})\, \Delta t(x_{i+1}) \Big) - \frac{D}{\mathbf{v}\Delta x}\left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} c^{n+1}(x)\, dx - \int_{x_i}^{x_{i+1}} c^{n+1}(x)\, dx \right). \tag{4.30}$$

Donde los primeros tres términos del lado derecho de la ecuación (4.30) son el resultado de aproximar las integrales sobre las características. Con esto queda claro que la integral sobre la frontera $x = 0$ se ha aproximado con una integral en el tiempo t^{n+1} sobre la región de integración Ω^i, donde se utiliza la relación $dx = \mathbf{v}dt$. Las condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann en las que aparecen como incógnitas el flujo $\left(D\frac{\partial c}{\partial x} - \mathbf{v}C \right)(0,t)$ y el valor de la función $c(0,t)$, se pueden tratar de manera parecida (ver Herrera et al., 1992). Para condiciones Dirichlet en la frontera de salida $x=l$, las contribuciones de frontera se anulan para todas las funciones de peso. La forma de tratar las condiciones de Neumann o de flujo impuesto en la frontera de salida es más complicada en comparación con el método de Celdas ELLAM (Herrera, 1993). Cuando se prescriben condiciones de Neumann, $c\left(l, t^{n+1}\right)$es una incógnita y es necesario introducir una función de peso más para cerrar el sistema. El soporte de esta función es el primero que intersecta a la frontera de salida, con lo que aparece la incógnita $c(l,\ t)$ asociada a la función C_N^*. La formulación variacional $\langle (C^* + K^*)c, w \rangle = \langle g - f, w^i \rangle$ es en este caso:

$$\int_{x_{E-1}}^{x_E} c(x,t^{n+1}) w^i(x,t^{n+1})\, dx - \frac{D}{\Delta x}\left\{ \int_{t^n}^{t^{n+1}} c(\beta_{E-1}(t),t)\, dt \right.$$
$$\left. - 2\int_{t^n}^{t^{n+1}} c(\beta_E(t),t)\, dt + \int_{t^n}^{t_{E+1}^*} c(\beta_{E+1}(t),t)\, dt \right\} - \int_{t_{E+1}^*}^{t^{n+1}} c(l,t)\left(\frac{D}{\Delta x} - \mathbf{v}\, w^i \right) dt$$
$$= \int_{t_{E+1}^*}^{t^{n+1}} c^i D \frac{\partial w}{\partial x}(l,t)\, dt + \int_{\Omega} f_\Omega w^i\, dx\, dt. \tag{4.31}$$

para tratar este término, una posibilidad es interpolar $c(l,t)$ utilizando los valores c_E^n y c_E^{n+1} con lo cual no se añaden incógnitas al sistema de ecuaciones.

Se han probado dos tipos de condiciones iniciales con este método: una discontinuidad de escalón y una gaussiana (Celia et al., 1990), las cuales cruzan las fronteras de entrada y de salida. Describiremos aquí con detalle los resultados numéricos correspondientes al segundo caso.

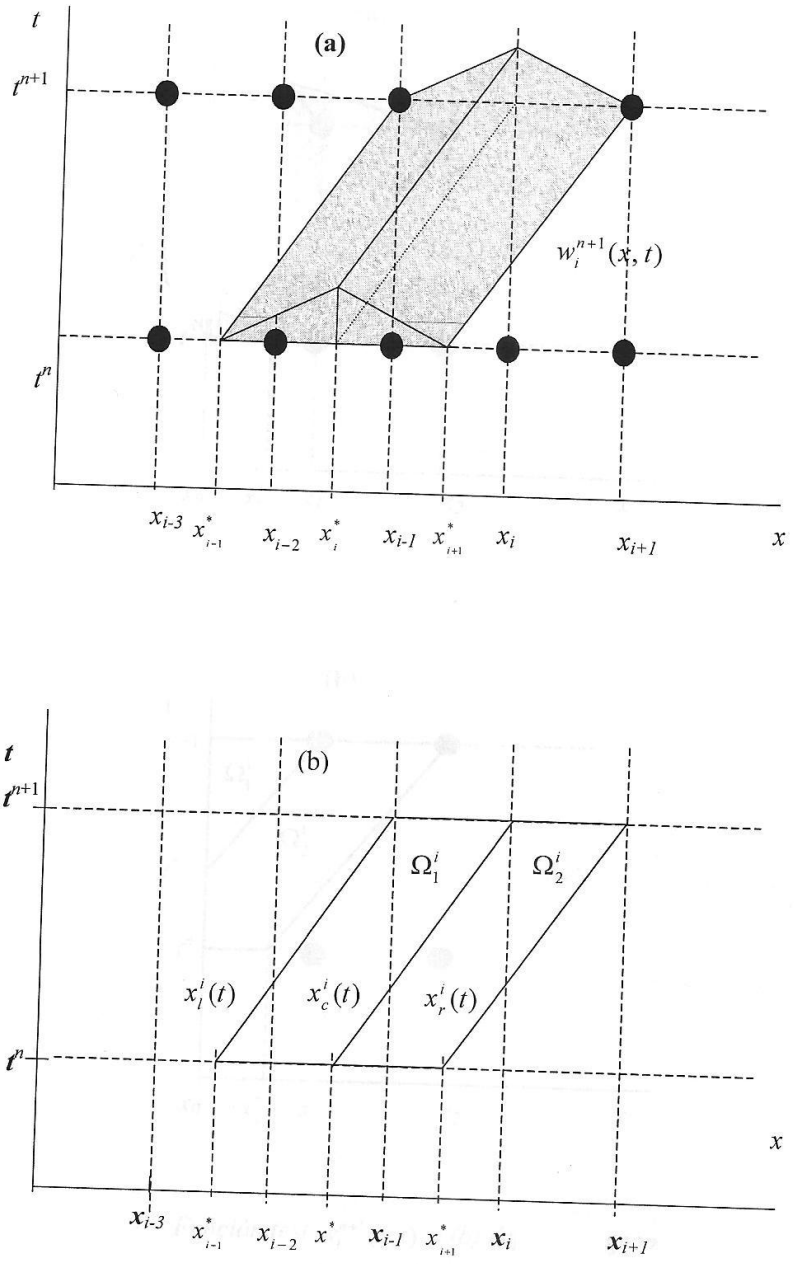


Figura 4.7. *(a) Funciones Test generales al interior, y (b) definiciones geométricas asociadas.*

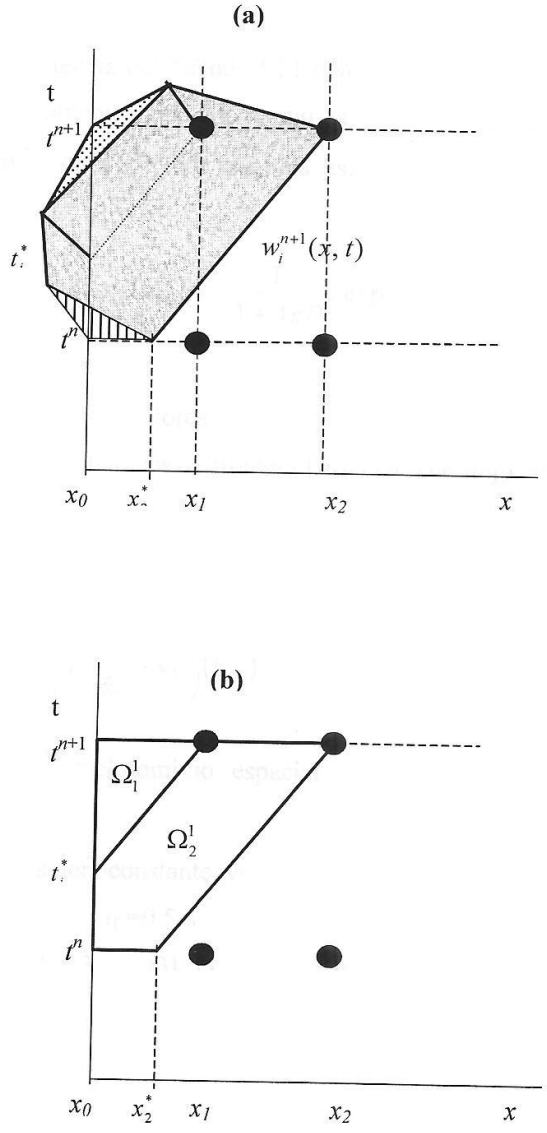


Figura 4.8. *(a) Función test* $w_i^{n+1}(x,t)$ *y (b) definición geométrica asociada.*

4.8. EJEMPLO 3

Para mostrar la eficiencia del método ELLAM, en la solución de la ecuación (4.62), se ha considerado un problema conocido como la campana de Gauss con condición inicial $c(x,0)=\exp(-\pi x^2)$, cuya solución analítica es:

$$c_a(x,t)=\frac{1}{\sqrt{1+4\pi Dt}}\exp\left(\frac{-\pi(x-\mathbf{v}t)^2}{1+4\pi Dt}\right)$$

Se obtiene un problema de valores iniciales y de frontera con la misma solución al cortar el dominio e imponer condiciones de frontera Dirichlet o de flujo, esto es:

$$c(a,t)=c_a(a,t) \text{ o } \left(D\frac{\partial c}{\partial x}-\mathbf{v}c\right)(a,t)=\left(D\frac{\partial c_a}{\partial x}-\mathbf{v}c_a\right)(a,t);$$
$$c(b,t)=c_a(b,t) \text{ o } \left(D\frac{\partial c}{\partial x}-\mathbf{v}c\right)(b,t)=\left(D\frac{\partial c_a}{\partial x}-\mathbf{v}c_a\right)(b,t)$$

Donde $\Omega_x=[a,b]$ es el dominio espacial truncado.

La velocidad se considera constante, **v**=10 m/s. Para la difusión se usó un valor de D=0.1 y un tiempo de simulación t_f =0.5 seg, con número de Peclet, Pe= 500. Se utilizaron tres dominios distintos: I=[-3, 2 1/3], O [2 1/3,9] y N=[-3,9], correspondientes a los casos en que la gaussiana cruza la frontera de entrada, de salida y no cruza la frontera, respectivamente.

Se tomó un Δx=4/15 m, como incremento de distancia correspondiente a un número de Peclet de la malla de Pe=26 2/3. Para verificar la convergencia se hicieron simulaciones también para Δx=4/75 m (Pe=5 1/3), Δx=4/15 m, Δt=0.25 y 0.05 seg (Cu=9 3/8, 1 7/8) y para Δx=4/75 m, Δt=0.25, 0.05, 0.01 y 0.002 seg (Cu=46 7/8,9 3/8, 1 1/7, 3/8). Las integrales que involucran a la condición inicial o condiciones de frontera se desarrollan con las reglas de Lobatto.

En la figura (4.9) se presenta el resultado para el dominio cuando las características no cruzan las fronteras de entrada (tipo N), con condición de frontera del tipo Dirichlet. En la figura (4.9a) se observa el comportamiento a lo largo del tiempo para un incremento espacial de 0.267 y se puede apreciar el error entre la solución analítica y numérica, producto del espaciamiento espacial que provoca dispersión numérica debido a la interpolación empleada para determinar los valores de la variable de interés en los niveles de tiempo iniciales. Sin embargo, para disminuir esta dispersión se optó por reducir el espaciamiento de la malla (Δx=0.053), disminuyendo el error considerablemente (figura 4.9b), y consecuentemente el número de Courant (Cu=9 1/3 a 1 7/8). No obstante, son mayores que la unidad, lo que quiere decir que la implementación es satisfactoria comparada con los métodos anteriores que requieren de números de Courant menores que la unidad. Dentro de este dominio la solución se torna sencilla, debido a que los valores al pie de la característica son conocidos porque se presentan en el nivel de tiempo anterior.

Cuando las líneas características cruzan las fronteras de entrada del domino (tipo I), la solución es más difícil, ya que éstas cortan la frontera en un nivel de tiempo desconocido, pero en este caso el valor de c es conocido y considerado como condición de frontera. Para fines de comparación, se realiza el mismo análisis que en el caso anterior, la condición de frontera no es del tipo de Dirichlet sino de flujo. Se observa en la figura 4.10a y 4.10b, que si la línea característica corta la frontera se presenta mayor dispersión numérica, debido a la incertidumbre en la determinación del punto de cruce de la frontera.

Finalmente, el tratamiento de las fronteras a la salida del flujo (tipo O), se realiza de la misma forma, considerando la condición inicial del tipo Dirichlet y los mismos números de Courant que los casos anteriores, se tiene que el comportamiento es similar, presentando dispersión numérica (figura 4.11) para los valores del número de Courant elevados. Cuando los números de Courant son pequeños se presentan oscilaciones, lo que obliga a reducir el espaciamiento correspondiente al tiempo con la finalidad de eliminar las oscilaciones.

Las aproximaciones implementadas por ELLAM en el interior de la región (tipo *N*), son equivalentes al MMOC (Ewing y Russell, 1981). Por lo que, éste es el punto de referencia que se utiliza en estas pruebas numéricas para evaluar los resultados obtenidos para el dominio donde la gaussiana no cruza las fronteras (dominio N). En términos generales, el orden de error para los dominios *I* y *O* coincide con el del dominio *N*, por lo que se concluye que ELLAM formula "correctamente" el tratamiento de las fronteras para la ecuación de transporte dominada por advección. Sin embargo, en la frontera de salida en algunos casos se presentan pequeñas oscilaciones. Como se puede observar, las soluciones por medio del ELLAM proporcionan buenos resultados, debido al tratamiento de fronteras.

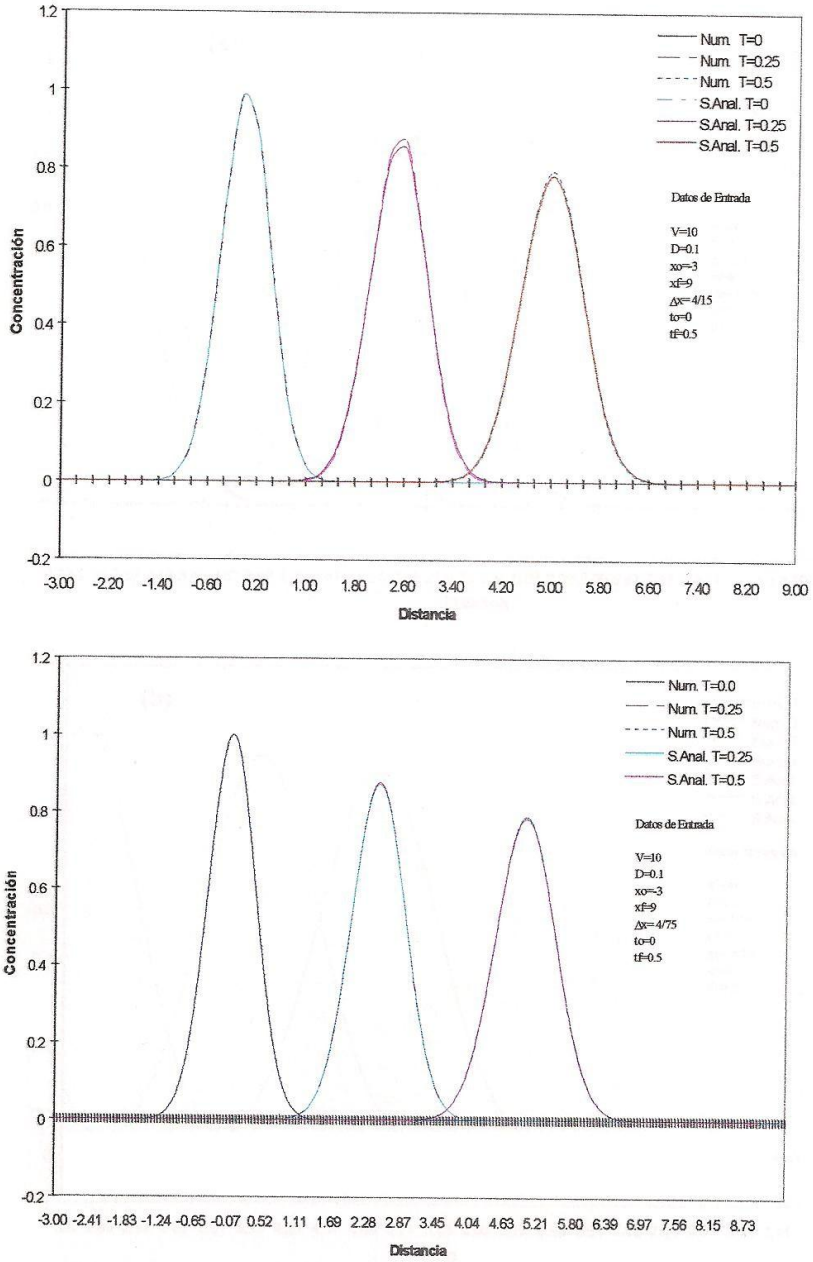


Figura 4.9. *Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica al interior del dominio.*

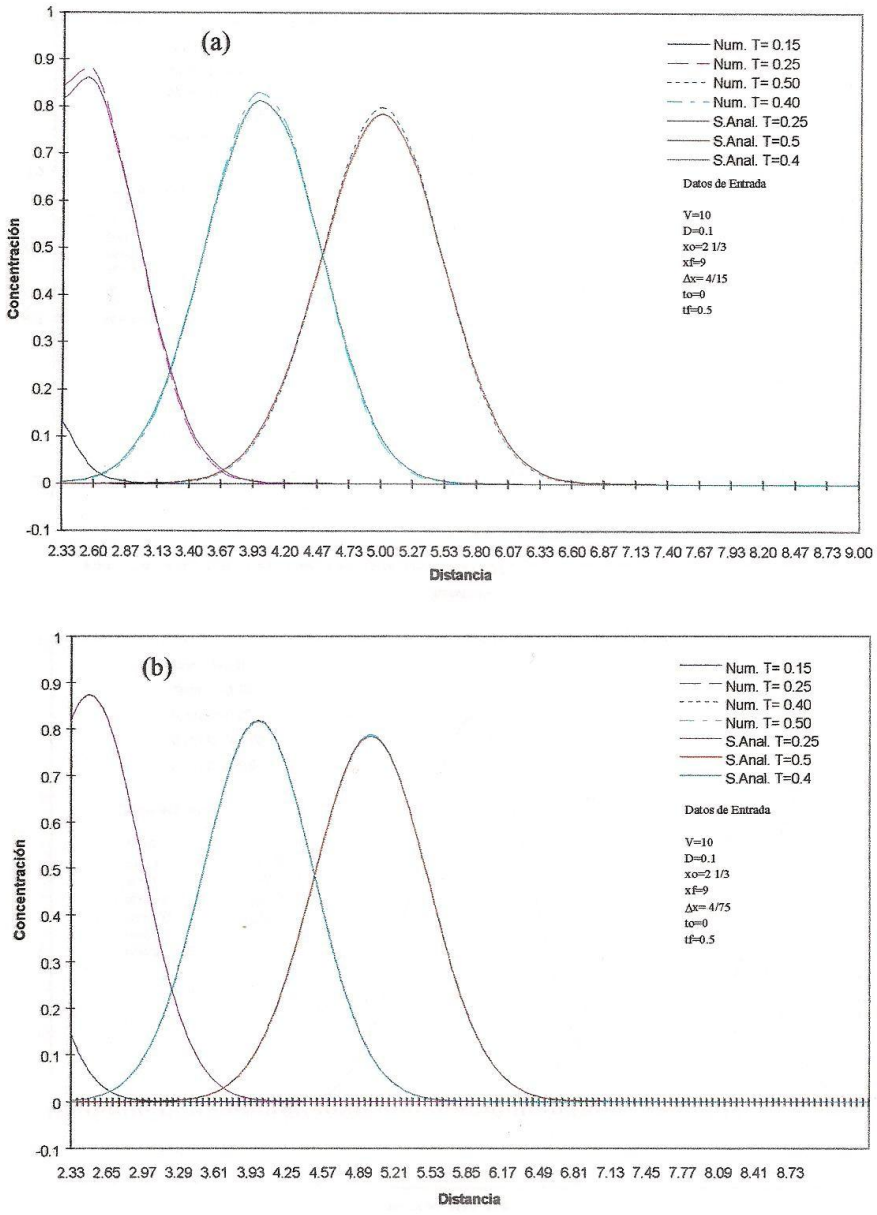


Figura 4.10. *Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica en la frontera de entrada de flujo.*

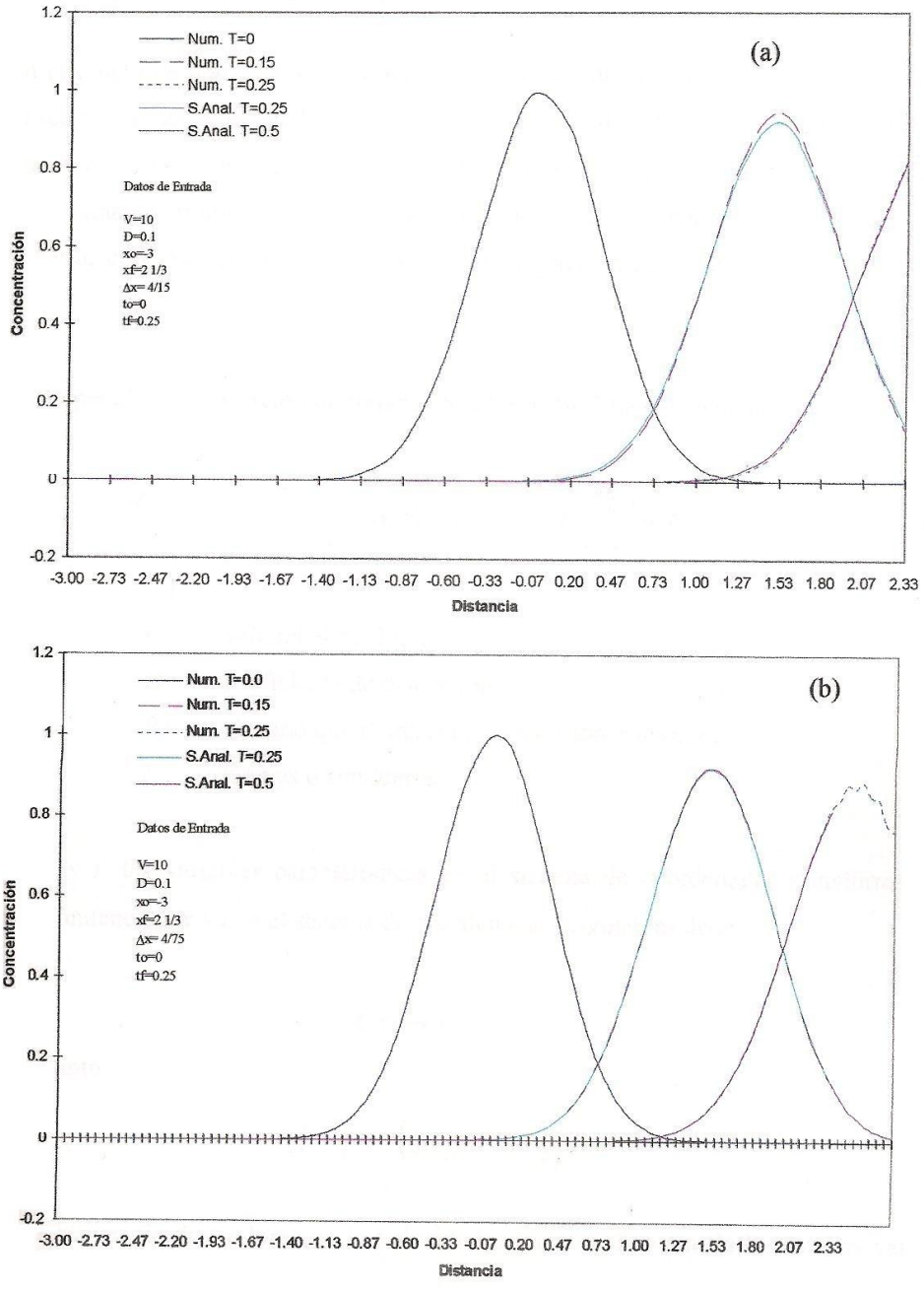


Figura 4.11. *Comparación de la solución ELLAM, con la solución analítica en la frontera de salida de flujo.*

4.9. REDUCCIÓN DEL ORDEN DE LA ECUACIÓN DE ADVECCIÓN-DISPERSIÓN

Con el objeto de aprovechar las ventajas del método de adjunto localizado, se procedió a una reducción del orden de la ecuación de advección difusión, a fin de explorar soluciones alternativas. Este esquema está basado en una transformación de coordenadas completamente implícita en el tiempo, cuyo objeto es obtener una ecuación diferencial ordinaria, con las ventajas que representa su implementación numérica en un esquema LAM.

Sea el operador y la ecuación diferencial de advección-difusión siguiente:

$$Lu = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}\, c) + Rc - \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right) = F, \tag{4.32}$$

donde
- $\mathbf{v}$ velocidad de flujo,
- D coeficiente de dispersión,
- Rc término que representa las reacciones químicas,
- F fuentes o sumideros.

Sean ξ y t' las variables características en el sistema de coordenadas transformado, en correspondencia a x y t en el sistema de coordenadas original, es decir:

$$\xi, t' \rightarrow x, t. \tag{4.33}$$

Por lo tanto

$$x(\xi, t') \rightarrow t(\xi, t') \qquad \frac{\partial x}{\partial t'} = \mathbf{v}; \tag{4.34}$$

Por consecuencia, los valores de la velocidad estarán en función de las nuevas variables características, esto es:

$$\frac{\partial x}{\partial t'}(\xi, t') = \mathbf{v}(x(\xi, t'), t(\xi, t')) \tag{4.35}$$

Integrando la ecuación (4.35) entre t' y t^{n+1}, se obtiene el desplazamiento de una partícula a lo largo de una característica.

$$x(\xi,t') = \xi - \int_{t'}^{t^{n+1}} \mathbf{v}(x(\xi,\tau))\,d\tau; \qquad 0 \le \xi \le l, \qquad t = t' \quad (4.36)$$

Tomando la ecuación (4.32) y su equivalente con la transformación de coordenadas se tiene:

$$\int_{\Omega} Lc\,dxdt = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (Lc)\,Jd\xi\,dt' \quad (4.37)$$

$$dx\,dt \rightarrow J\,d\xi\,dt' \quad (4.38)$$

Donde J representa el Jacobiano y está definido por la siguiente transformación:

$$J = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \xi} & \dfrac{\partial x}{\partial t'} \\ \dfrac{\partial t}{\partial \xi} & \dfrac{\partial t}{\partial t'} \end{vmatrix} \quad (4.39)$$

Remplazando los términos del Jacobiano por sus valores equivalentes, se obtiene el valor correspondiente al Jacobiano de transformación

$$J = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \xi} & \mathbf{v} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \quad (4.40)$$

donde

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)_{t'=t^{n+1}} = e^{-\int_{t'}^{t} \frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau} \quad (4.41)$$

Considerando solamente el término advectivo de la ecuación (4.32) y aplicando el jacobiano a esta expresión, se obtiene lo siguiente:

$$J\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}\,c)=J\left\{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}c+\mathbf{v}\frac{\partial c}{\partial x}\right\}=J\left\{J^{-1}\frac{\partial J}{\partial t'}c+\mathbf{v}\frac{\partial c}{\partial x}\right\}=\frac{\partial J}{\partial t'}c+J\,\mathbf{v}\frac{\partial c}{\partial x} \tag{4.42}$$

Ahora adicionando en un solo término la componente advectiva y la componente temporal, se procede a aplicar la transformación que permitirá eliminar la componente advectiva de la expresión general.

$$J\left\{\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}\,c)\right\}=J\left(\frac{\partial c}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial J}{\partial t'}c=J\frac{\partial c}{\partial t'}+\frac{\partial J}{\partial t'}c=\frac{\partial}{\partial t'}(Jc) \tag{4.43}$$

En la ecuación anterior, el término advectivo ha sido reemplazado por una transformación temporal, tal como se hace en el Método Modificado de Características, es decir:

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial c}{\partial t'} \tag{4.44}$$

Por lo tanto, la expresión que tiene en cuenta el operador diferencial con el correspondiente Jacobiano de transformación tiene la siguiente forma:

$$J\,Lc=\frac{\partial}{\partial t'}(Jc)+J\left\{Rc-\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)\right\}=J\,F \tag{4.45}$$

Remplazando los valores correspondientes al Jacobiano e integrando sobre los límites respectivos se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} &c(\xi,t^{n+1})-J(\xi,t^{n})c(x^{*}(\xi),t^{n})- \\ &\int_{n}^{n+1} e^{-\int_{t^n}^{t^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)-Rc+F\right\}(x(\xi,\tau),\tau)\,d\tau=0 \end{aligned} \tag{4.46}$$

Posteriormente, la ecuación (4.46) es utilizada para obtener el esquema de integración completamente implícito en el tiempo, donde se ha reducido el orden de la ecuación y eliminado la componente advectiva.

$$c\left(\xi,t^{n+1}\right)-e^{-\int_{t^n}^{t^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau}c\left(x^*(\xi),t^*(\xi)\right)-\int_{t^n}^{t^{n+1}}e^{-\int_{t'^n}^{t'^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau}$$
$$\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c^{n+1}}{\partial x}\right)-Rc^{n+1}+F\right\}\left(x(\xi,\tau),\tau\right)=0 \tag{4.47}$$

Considerando coeficientes constantes y el valor de las fuentes o sumideros como nulo ($F=0$), se obtiene la siguiente expresión:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}}e^{-\int_{\tau}^{t'^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x,(\xi,\tau),\tau)d\tau}d\tau\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c^{n+1}}{\partial x}\right)-Rc^{n+1}\right\}-$$
$$c\left(x,t^{n+1}\right)=-e^{-\int_{t'^n}^{t'^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}d\tau}c\left(x^*(x),t^n\right) \tag{4.48}$$

Si se considera la integración en el origen, es decir, en x=0, para tomar en cuenta los términos en la frontera a la izquierda del dominio, se obtiene la siguiente expresión:

$$\left\{\int_{t^*(x)}^{t^{n+1}}e^{-\int_{\tau}^{t'^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau}d\tau\right\}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c^{n+1}}{\partial x}\right)-Rc^{n+1}\right\}-$$
$$c^{n+1}(x)=-e^{-\int_{t^*(x)}^{t'^{n+1}}\frac{\partial v}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau}c\left(0,t^*(x)\right) \tag{4.49}$$

Cuando las características cruzan las fronteras en $x = 0$, entonces el incremento de tiempo Δt es variable y depende del punto de intersección. Para fines de obtener una expresión general, se considera este término como una variable, por lo tanto:

$$\Delta t^*(\xi)=t^{n+1}-t^*(\xi) \tag{4.50}$$

En la ecuación (4.48) y en la ecuación (4.49) existen dos integrales temporales, cuyos valores son los siguientes:

$$e^{-\int_{t^*}^{t^{n+1}} \frac{\partial v}{\partial x}(x,(\xi,\tau))d\tau} = 1 - I + O\left(\Delta t^3\right) \tag{4.51}$$

$$I = \int_{t^*}^{t^{n+1}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\left(x(\xi,\tau),\tau\right) d\tau = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\left(x^*,t^*\right)\Delta t^* + O\left(\Delta t^{*2}\right) \tag{4.52}$$

$$\int_{t^*}^{t^{n+1}} e^{-\int_{\tau}^{t^{n+1}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}(x(\xi,\tau),\tau)d\tau} d\tau = \Delta t^* + O\left(\Delta t^{*2}\right) \tag{4.53}$$

Remplazando estos valores en las ecuaciones (4.48) y (4.49), se obtiene la expresión general completamente implícita en el tiempo con un error $O\left(\Delta t^2\right)$.

$$\Delta t^* \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c^{n+1}}{\partial x}\right) - \left(R\Delta t^* + 1\right)c^{n+1} = \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\left(x^*,t^*\right) - 1\right)c\left(x^*,t^*\right) - F^*\left(x\right) \tag{4.54}$$

En esta ecuación se cumplen las siguientes condiciones:

$$t^*(x) \qquad \text{si } x \le x_L \tag{4.55}$$

$$t^*(x) = t^n \qquad si \;\; x \ge x_L \tag{4.56}$$

$$x^*(x) = 0 \qquad si \;\; 0 \le x \le x_L \tag{4.57}$$

Tomando la ecuación (4.54) y extendiendo la diferencial de segundo orden que incluye al coeficiente de difusión, y considerando como constantes tanto el coeficiente de difusión y la velocidad, se obtiene la expresión equivalente que representa el desplazamiento de un contaminante en una dimensión.

$$\Delta t^* D\frac{\partial^2 c^{n+1}}{\partial x^2} + \Delta t^* \frac{\partial D}{\partial x}\frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} - \left(R\Delta t^* + 1\right)c^{n+1} = \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\left(x^*,t^*\right) - 1\right)c\left(x^*,t^*\right) - F^* \tag{4.58}$$

simplificando:

$$\Delta t^* D \frac{d^2 c^{n+1}}{d x^2} - c^{n+1} = -c\left(x^*, t^*\right) \tag{4.59}$$

La ecuación (4.59) sirve de plataforma para establecer dos casos particulares. El primero considera la situación cuando la característica cruza la frontera entre t^n y t^{n+1}, y el segundo cuando la característica se encuentra en el interior del dominio. El caso cuando la característica cruza la frontera en $x = l$, no se considera en este trabajo ya que se impone una concentración $u=0$ en esta frontera.

Primer caso cuando $x < \mathbf{v}t$

$$\Delta t^* D \frac{d^2 c^{n+1}}{d x^2} - c^{n+1} = -c\left(0, t^*(x)\right) \tag{4.60}$$

donde $-c\left(0, t^*(x)\right)$ es dato de frontera

Segundo caso cuando $x > \mathbf{v}t$

$$\Delta t\, D \frac{d^2 c^{n+1}}{d x^2} - c^{n+1} = -c\left(x^*(x, t^n), t^*\right) \tag{4.61}$$

donde $-c\left(x^*(x,t^n), t^*\right)$ es dato al pie de la característica en el tiempo t^n

Para ambos casos la ecuación está sujeta a las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$c(x,0) = 0 \tag{4.62}$$

$$c(0,t) = 1 \tag{4.63}$$

$$c(l,t) = 0 \tag{4.64}$$

4.10. EJEMPLO 4

Para este ejemplo se han considerado los siguientes parámetros físicos: longitud L=1.0 m, coeficiente de dispersión D=1.0, velocidad de flujo v=10^4 m/d, espaciamiento de malla Δx= 0.02 m, una discretización espacial con 50 celdas y un tiempo de simulación de t=5x10^{-5} d, obteniendo un problema dominado por advección con un número de Peclet, Pe= 200. En la figura 4.12 se muestra el resultado de la solución de la ecuación de transporte para estas condiciones utilizando el método del Adjunto Localizado. Además, haciendo énfasis a la utilización de una discretización de la malla de acuerdo a las características de los datos de entrada, se puede observar que para un número de Courant Cu= 0.5, se tiene un incremento de tiempo Δt= 10^{-5} d, correspondiente a 100 pasos de tiempo.

Si se observan los resultados, la solución no es completamente confiable ya que presenta problemas de dispersión numérica. Es probable que el origen de este problema radique en el tipo de interpolación utilizada al pie de la característica. En investigaciones anteriores (Olivera, 1987), se ha demostrado que una de las fuentes principales de error proviene de la interpolación al pie de la característica. En realidad, la transformación representa una alternativa atractiva en el sentido de la reducción de orden de la ecuación, la cual permite obtener una ecuación diferencial ordinaria, cuya solución es mediante el método LAM.

En resumen, las principales ventajas y desventajas que presentan los diferentes métodos empleados para la solución de la ecuación de transporte en la zona saturada están en el cuadro 4.1.

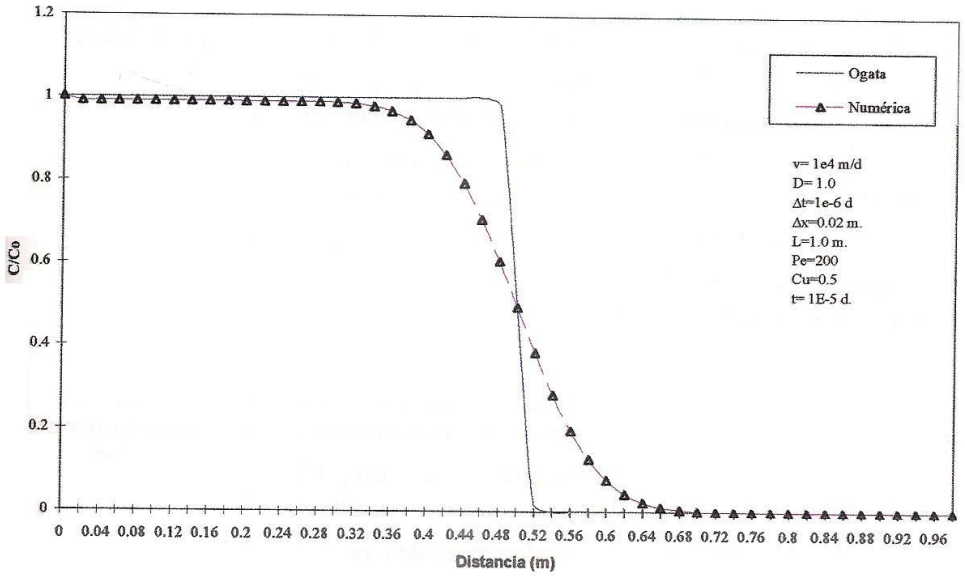


Figura 4.12. *Comparación de la solución mediante el método del adjunto localizado de la ecuación transformada.*

Cuadro 4.1. Principales ventajas y desventajas de los diferentes métodos de solución.

Método	Ventajas	Desventajas
Diferencias Finitas	- Esquema numérico simple - Se aplica a la mayoría de los problemas de contaminación - Utiliza pocos datos de entrada.	- Presenta fuertes oscilaciones y difusión numérica - Esta restringido al número de Courant y Peclet - Emplea mallas regulares - No conserva masa - Se aplica a problemas dominados por dispersión} - Requiere de esfuerzo computacional alto
Elemento Finito	- Esquema numérico simple - Se aplica a la mayoría de los problemas de contaminación - Emplea mallas irregulares - Utiliza más datos de entrada - Reduce las oscilaciones y la difusión numérica.	- Esta restringido al número de Courant y Peclet - No conserva masa - Aplicado a problemas dominados por dispersión - Requiere de esfuerzo computacional alto
Método de Características (MOC)	- Se aplica a problemas de Advección-Dispersión - Se aplica a problemas dominados por Advección - Reduce las oscilaciones y la difusión numérica - Emplea mallas irregulares	- No conserva masa - Requiere de esfuerzo computacional alto. - Esta restringido por el número de Courant.
Método Modificado de Características (MMOC)	- Se aplica a problemas de Advección-Dispersión - Se aplica a problemas dominados por Advección - Reduce las oscilaciones y la difusión numérica - Emplea mallas irregulares - Requiere de esfuerzo computacional bajo	- No conserva masa - Esta restringido por el número de Courant - No realiza tratamiento de fronteras

continuación del cuadro 4.1.

Método	Ventajas	Desventajas
Método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM)	- Se aplica a problemas de Advección-Dispersión - De aplica a problemas dominados por Advección - No presenta oscilaciones - Conserva masa - No esta restringido al número de Courant - Realiza tratamiento de fronteras	- Esquema numérico complejo

Capítulo *V*

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE FLUJO EN LA ZONA NO SATURADA

5.1. INTRODUCCIÓN

La simulación numérica del flujo en múltiples fases en un medio poroso es importante en diferentes ramas de la ciencia e Ingeniería. Entre éstas se encuentran la Hidrología Subterránea, la Mecánica de suelos, la Ingeniería petrolera, etc. El flujo simultáneo del aire y del agua en un medio poroso es un ejemplo de un sistema en múltiples fases. Las ecuaciones que describen este fenómeno, son ecuaciones no lineales y su solución numérica en muchas ocasiones es problemática.

Por lo tanto, en diferentes investigaciones no se considera el movimiento del aire debido a que las presiones producidas son iguales a la presión atmosférica; por lo tanto, el sistema se reduce a una sola fase (agua). Esta última es aproximada en algunas ocasiones con la ecuación de Richards (Milly, 1988), y es aceptada cuando no se tiene presenta la fase aire o bien cuando el movimiento del aire es insignificante. Sin embargo, en situaciones donde el aire obstaculiza el movimiento del agua, éste se constituye en una componente del sistema, lo que implica que el análisis debe realizarse en dos fases (Touma y Vauclin, 1986).

Se han realizado diferentes investigaciones para examinar la retardación del movimiento del agua por efecto de la presencia del aire en un medio poroso. Estas investigaciones han aplicado modelos tales como: Saturación-Presión, presentado por Phuc y Morel-Seytoux (1972); el Modelo de Flujo Fraccional, el cual considera los efectos del aire en el movimiento del agua utilizando una simplificación de la ecuación presentado por Morel-Seytoux y Billica (1985). Cada uno de estos métodos es resuelto aplicando el método de Diferencias Finitas.

Mientras la influencia del aire en el movimiento del agua es una posible razón para el estudio de la zona no saturada como un sistema de dos fases (aire y agua), una segunda y más fuerte, es la modelación del transporte de contaminantes de componentes orgánicos (volátiles) en la zona no saturada.

En general, la ecuación de flujo en múltiples fases es una ecuación no lineal y, particularmente, en la zona no saturada se dificulta su solución por métodos numéricos. La técnica numérica empleada en la solución de la ecuación de flujo en la zona no saturada es desarrollada por Celia y Binning (1992), la cual es una extensión del trabajo de Celia et al. (1990) sobre la ecuación de Richards. Por lo tanto, en este capítulo se realiza primeramente una linearización de la ecuación, utilizando el esquema de iteración de Picard y posteriormente se aplica el método del Elemento Finito con la opción *"Lumped"*, para obtener soluciones libres de oscilaciones. El esquema numérico es desarrollado primeramente en una dimensión y posteriormente en dos dimensiones

5.2. SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE FLUJO EN UNA DIMENSIÓN

La solución de la ecuación de flujo en dos fases en una dimensión está dada en Celia y Binning (1992). Las ecuaciones (2.19) y (2.20) descritas en el capítulo 2, representan el flujo en múltiples fases. Dichas ecuaciones tienen la siguiente forma:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} + S_{sw}\frac{\theta_w}{\phi}\frac{\partial h_w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z}\left[K_w\left(\frac{\partial h_w}{\partial z} - sin\psi\right)\right] = 0 \qquad (5.1)$$

y

$$(\phi - \theta_w)\frac{\rho_{0a}}{h_{0a}}\frac{\partial h_w}{\partial t} - \rho_a\frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z}\left[(\rho_a K_a)\left(\frac{\partial h_a}{\partial z} - \frac{\rho_a}{\rho_{0w}}sin\psi\right)\right] = 0 \qquad (5.2)$$

donde ψ es el ángulo con respecto a la vertical. La ecuación (5.1) representa el flujo en la fase agua y la ecuación (5.2) el flujo de la fase aire.

5.2.1. ESQUEMA DE LA ITERACIÓN DE PICARD

El esquema numérico para la linearización de la ecuación de flujo, está basado en el trabajo de Celia et al. (1990). La parte espacial de las ecuaciones de flujo de agua y aire es discretizada utilizando la aproximación modificada de Picard y la temporal con el esquema regresivo de Euler. Este último es completamente implícito y, de esta manera, la discretización temporal es más estable. La iteración de Picard es utilizada para linearizar las ecuaciones; esto es:

$$\frac{\Theta_w^{n+1,m+1} - \Theta_w^n}{\Delta t} + S_w\frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi}\frac{H_w^{n+1,m+1} - H_w^n}{\Delta t} - \frac{\partial}{\partial z}\left[K_w^{n+1,m}\left(\frac{\partial H_w^{n+1,m+1}}{\partial z} - sin\psi\right)\right] = 0 \qquad (5.3)$$

y

$$\left(\phi - \Theta_a^{n+1,m}\right)\frac{\rho_{0a}}{h_{0a}}\frac{H_a^{n+1,m+1} - H_a^n}{\Delta t} - \rho_a^{n+1,m}\frac{\Theta_w^{n+1,m+1} - \Theta_w^n}{\Delta t}$$
$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\rho_a K_a\right)^{n+1,m}\left(\frac{\partial H_a^{n+1,m+1}}{\partial z} - \frac{\rho_a^{n+1,m}}{\rho_{0w}} sin\psi\right)\right] = 0 \qquad (5.4)$$

donde el superíndice n indica el nivel de tiempo, m el nivel de iteración, $\Delta t=t^{n+1}-t^n$ el incremento del tiempo, Θ_w es la aproximación numérica del contenido de humedad θ_w y H_w y H_a representan las aproximaciones numéricas de las cargas de presión h_w y h_a, respectivamente.

En cada paso de tiempo se realizan diferentes iteraciones para determinar las cargas de presión, durante cada iteración las ecuaciones son resueltas con la finalidad de determinar las cargas en el nuevo nivel de iteración. Los coeficientes no lineales son evaluados utilizando las cargas en el nivel de iteración anterior, de esta manera se obtiene la linearización de la ecuación.

El contenido de humedad (Θ_w^{n+1}) está escrito en el m-ésimo nivel de iteración, pero cuando es multiplicado por $H^{n+1,m+1}$, este no es considerado debido a que las ecuaciones son resueltas para las cargas de presión en el nuevo nivel de iteración (m+1). Por lo tanto, el contenido de humedad en el nuevo nivel está escrito en términos de la carga de presión, el cual se determina con la aplicación de la expansión de las series de Taylor con la siguiente expresión:

$$\Theta_w^{n+1,m+1} \approx \Theta_w^{n+1,m} + \left(\frac{\partial \theta_w}{\partial h_c}\right)^{n+1,m}\left(H_c^{n+1,m+1} - H_c^{n+1,m}\right) \qquad (5.5)$$

donde $\left(\frac{\partial \theta_w}{\partial h_c}\right)^{n+1,m}$ se obtiene por el cambio del contenido de humedad con respecto al cambio en las cargas de presión capilar en el nivel de iteración anterior (m), denotado por $C_{we} = \left(\frac{\partial \theta_w}{\partial h_c}\right)$ y conocido como contenido de humedad específica.

Una forma útil para reformular las ecuaciones (5.3) y (5.4) en términos del incremento de presión en cada nivel de iteración, es utilizando la relación dada por la siguiente expresión:

$$\delta H_\alpha^{n+1,m} = \delta H_\alpha^{n+1,m+1} - H_\alpha^{n+1,m} \tag{5.6}$$

además, si se consideran las series de Taylor (ecuación 5.5), las ecuaciones son planteadas como:

$$\begin{aligned} & C_{we}^{n+1,m} \frac{\delta H_a^{n+1,m} - \delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t} + S_{sw} \frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi} \frac{\delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t} - \frac{\partial}{\partial z}\left[K_w^{n+1,m} \left(\frac{\partial \delta H_w^{n+1,m}}{\partial z} \right) \right] = \\ & = \frac{\Theta_w^{n+1,m} - \Theta_w^n}{\Delta t} - S_{sw} \frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi} \frac{H_w^{n+1,m} - H_w^n}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial z}\left[K_w^{n+1,m} \left(\frac{\partial H_w^{n+1,m}}{\partial z} - sin\psi \right) \right] \equiv R_w^{n+1,m} \end{aligned} \tag{5.7}$$

y

$$\begin{aligned} & \left(\phi - \Theta_w^{n+1,m}\right) \frac{\rho_{0a}}{h_{0a}} \frac{\delta H_a^{n+1,m}}{\Delta t} + \rho_a^{n+1,m} C_{we}^{n+1,w} \frac{\delta H_a^{n+1,m} - H_w^{n+1,m}}{\Delta t} - \\ & - \frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\rho_a K_a\right)^{n+1,m} \left(\frac{\partial \delta H_a^{n+1,m}}{\partial z} \right) \right] == \rho_a^{n+1,m} \frac{\Theta_w^{n+1,m} - \Theta_w^n}{\Delta t} - \\ & - \left(\phi - \Theta_w^{n+1,m}\right) \frac{\rho_{0a}}{h_{0a}} \frac{H_a^{n+1,m} - H_a^n}{\Delta t} + \\ & + \frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\rho_a K_a\right)^{n+1,m} \left(\frac{\partial H_a^{n+1,m}}{\partial z} - \frac{\left(\rho_a^{n+1,m}\right)^2}{\rho_{0w}} K_a^{n+1,m} sin\psi \right) \right] \equiv R_a^{n+1,m} \end{aligned} \tag{5.8}$$

resueltas en cada nivel de iteración para el incremento de presión $\delta H_\alpha^{n+1,m}$. Estas ecuaciones son lineales en $\delta H_\alpha^{n+1,m}$ y aparecen solamente en el lado izquierdo de la ecuación.

Para completar la discretización, es necesario el uso de la formulación "*Lumped*" del método del Elemento Finito de Galerkin para determinar la aproximación espacial utilizando funciones base lineales. Esta discretización mediante la formulación "*Lumped*" de la derivada temporal, es equivalente al esquema aplicado a la componente espacial del método de Diferencias Finitas Centrales en una dimensión, considerando los cambios apropiados para estimar la cond

5.2.2. DISCRETIZACIÓN ESPACIAL UTILIZANDO EL MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO DE GALERKIN

Para presentar la discretización espacial de la ecuación de flujo en múltiples fases (aire y agua), se considera únicamente la ecuación de flujo de la fase agua (ecuación 5.7), resultando la siguiente expresión:

$$\int_{\Omega_z}\left\{C_{we}^{n+1,m}\frac{\delta H_a^{n+1,m}-\delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t}+S_{sw}\frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi}\frac{\delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t}-\frac{\partial}{\partial z}\left[K_w^{n+1,m}\left(\frac{\partial \delta H_w^{n+1,m}}{\partial z}\right)\right]\right\}wdz =$$
$$=\int_{\Omega_z}\left\{\frac{\Theta_w^{n+1,m}-\Theta_w^{n}}{\Delta t}-S_{sw}\frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi}\frac{H_w^{n+1,m}-H_w^{n}}{\Delta t}+\frac{\partial}{\partial z}\left[K_w^{n+1,m}\left(\frac{\partial H_w^{n+1,m}}{\partial z}-\sin\psi\right)\right]\right\}wdz \tag{5.9}$$

donde w es la función de peso aplicada al domino $\Omega_z = [0,l]$, cuyo rango espacial va desde z=0 hasta z=l. La divergencia del flujo de la ecuación es integrada por partes; esto es conveniente para introducir las condiciones de frontera dentro de la ecuación en forma natural:

$$\int_{\Omega_z}\left\{C_{we}^{n+1,m}\frac{\delta H_a^{n+1,m}-\delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t}+S_{swr}\frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi}\frac{\delta H_w^{n+1,m}}{\Delta t}\right\}wdz+$$
$$\int_{\Omega_z}\left\{K_w^{n+1,m}\frac{\partial \delta H_w^{n+1,m}}{\partial z}\frac{\partial w}{\partial z}\right\}dz =$$
$$=\int_{\Omega_z}\left\{\frac{\Theta_w^{n+1,m}-\Theta_w^{n}}{\Delta t}-S_{swr}\frac{\Theta_w^{n+1,m}}{\phi}\frac{H_w^{n+1,m}-H_w^{n}}{\Delta t}\right\}wdz \tag{5.10}$$
$$+\left[q_w^{n+1}w\right]_0^l-\int_{\Omega_z}K_w^{n+1,m}\left(\frac{\partial H_w^{n+1,m}}{\partial z}-\sin\psi\right)\frac{\partial w}{\partial z}dz$$

donde el término:

$$\left[K_w^{n+1,m} \frac{\partial \delta H_w^{n+1,m}}{\partial z} w \right]_0^l \tag{5.11}$$

no es considerado porque, $\delta h_w \rightarrow 0$.

El espacio dimensionalmente finito para las funciones de peso y base es definido por la división del dominio en *N*-1 elementos $\left(z_1^e, z_2^e\right)$, donde z_1^e y z_2^e son las coordenadas de las fronteras (izquierda y derecha) del elemento *e*. Las funciones de peso y base son combinadas para obtener funciones base lineales en el espacio, las cuales son obtenidas en coordenadas locales por:

$$\phi_1(\xi) = \frac{1-\xi}{2}; \qquad \phi_2(\xi) = \frac{1+\xi}{2} \tag{5.12}$$

donde la coordenada local está relacionada con el sistema de coordenadas global por:

$$\xi = \frac{2z - \left(z_1^e + z_2^e\right)}{z_2^e - z_1^e} \tag{5.13}$$

estas funciones son ilustradas en la figura 5.1.

El espacio de prueba es utilizado para aproximar la solución h_ω y los diferentes coeficientes de la ecuación; esto es:

$$h_w(z,t) = \sum_{j=1}^{N} H_{w_j}(t)\phi_j(z) \tag{5.14}$$

$$K_w(h_c) = \sum_{j=1}^{N} K_w(H_{c_j})\phi_j(z) = \sum_{j=1}^{N} K_{w_j}\phi_j(z) \tag{5.15}$$

$$C_{we}(h_c) = \sum_{j=1}^{N} C_{we_j}\phi_j \tag{5.16}$$

$$\theta_w = \sum_{j=1}^{N} \Theta_{w_j}\phi_j \tag{5.17}$$

Las integrales son evaluadas para los elementos principales utilizando la siguiente expresión:

$$\int_0^l dz = \sum_{e=1}^{N-1} \int_{z_1^e}^{z_2^e} dz \tag{5.18}$$

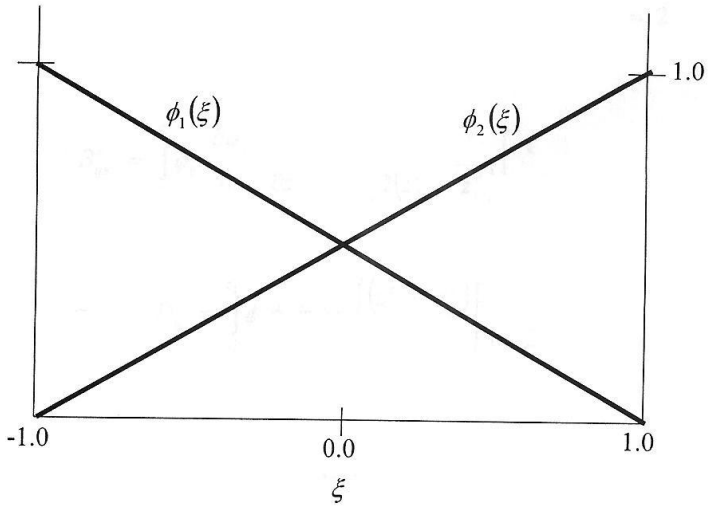


Figura 5.1. ***Funciones base***

Con las definiciones anteriores, las integrales elementales están planteadas como:

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} C_{we_k}^{n+1,m}\frac{\delta H_{a_j}^{n+1,m}-\delta H_{w_j}^{n+1,m}}{\Delta t}A_{ijk}^{e}+\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} S_{sw}\frac{\Theta_{w_k}^{n+1,m}}{\phi}\frac{\delta H_{w_j}^{n+1,m}}{\Delta t}A_{ijk}^{e}+$$
$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} K_{w_k}^{n+1,m}\delta H_{w_j}^{n+1,m}B_{ijk}^{e}=-\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{\Theta_{w_j}^{n+1,m}-\Theta_{w_j}^{n}}{\phi}D_{ij}^{e}-$$
$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} S_{sw}\frac{\Theta_{w_k}^{n+1,m}}{\phi}\frac{H_{w_j}^{n+1,m}-H_{w_j}^{n}}{\Delta t}A_{ijk}^{e}+\left[q_w^{n+1}v\right]_{z_1^e}^{z_2^e}-$$
$$\left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} K_{w_k}^{n+1,m}H_{w_j}B_{ijk}^{e}-\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} K_{w_k}^{n+1,m}E_{ik}^{e}\sin\psi\right) \tag{5.19}$$

donde:

$$A_{ijk}^{e}=\int_{z_1^e}^{z_2^e}\phi_k\phi_j\phi_i dz=\begin{cases}\dfrac{z_2^e-z_1^e}{12}\begin{bmatrix}3 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix} & K=1\\ \dfrac{z_2^e-z_1^e}{12}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix} & K=2\end{cases} \tag{5.20}$$

$$B_{ijk}^{e}=\int_{z_1^e}^{z_2^e}\phi_k\frac{\partial\phi_j}{\partial z}\frac{\partial\phi_i}{\partial z}dz=\left\{\frac{1}{2\left(z_2^e-z_1^e\right)}\right\}\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix} \tag{5.21}$$

$$D_{ij}^{e}=\int_{z_1^e}^{z_2^e}\phi_j\phi_i dz=\left\{\frac{\left(z_2^e-z_1^e\right)}{6}\right\}\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix} \tag{5.22}$$

$$E_{ik}^{e}=\int_{z_1^e}^{z_2^e}\phi_k\frac{\partial\phi_i}{\partial z}dz=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}-1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix} \tag{5.23}$$

representan las matrices elementales. El siguiente paso es ensamblar la matriz global. Por lo tanto, el término de la ecuación para el nodo *i* está dado por:

$$\frac{\overline{C}_{we_{i-1}}^{n+1,m}}{\Delta t}\left(\delta H_{a_{i-1}}^{n+1,m}-\delta H_{w_{i-1}}^{n+1,m}\right)+\frac{\overline{C}_{we_i}^{n+1,m}}{\Delta t}\left(\delta H_{a_i}^{n+1,m}-\delta H_{w_i}^{n+1,m}\right)+\frac{\overline{C}_{we_{i+1}}^{n+1,m}}{\Delta t}\left(\delta H_{a_{i+1}}^{n+1,m}-\delta H_{w_{i+1}}^{n+1,m}\right) \tag{5.24}$$

donde

$$\begin{aligned}\overline{C}_{we_{i-1}}^{n+1,m}&=\frac{1}{12}\left(C_{we_{i-1}}^{n+1,m}+C_{we_i}^{n+1,m}\right)\\ \overline{C}_{we}^{n+1,m}&=\frac{1}{12}\left(C_{we_{i-1}}^{n+1,m}+6C_{we_i}^{n+1,m}+C_{we_{i+1}}^{n+1,m}\right)\\ \overline{C}_{we_{i+1}}^{n+1,m}&=\frac{1}{12}\left(C_{we_i}^{n+1,m}+C_{we_{i+1}}^{n+1,m}\right)\end{aligned} \tag{5.25}$$

Las ecuaciones anteriores indican la aproximación de la derivada temporal distribuida en el espacio a lo largo de los nodos *i*-1, *i*, *i*+1. Celia et al. (1990) y otros autores identifican esta distribución como la fuente principal que provoca oscilaciones en la solución de la ecuación.

5.2.3. ESQUEMA CONCENTRADO EN EL TIEMPO (ESQUEMA "LUMPED")

El esquema "*Lumped*" utilizado para la parte temporal, es el esquema L2 de Milly (1985); donde Milly reemplazó el término:

$$\sum\frac{\delta H_{w_j}^{n+1,m+1}}{\Delta t}\int_{\Omega_z}\hat{C}_{we}\phi_j\phi_i dz \tag{5.26}$$

con el término:

$$\frac{\delta H_{w_j}^{n+1,m+1}}{\Delta t}C_{we_i}^{n+1,m}\int_{\Omega_z}\phi_i dz \tag{5.27}$$

donde $\hat{C}_{we}$ es la aproximación numérica de C_{we}.

La finalidad del esquema *"Lumped"* es diagonalizar la matriz temporal. Por lo tanto, la aproximación de la ecuación (5.24), es reemplazada por:

$$C_{we_i}^{n+1,m} \frac{\delta H_{a_i}^{n+1,m+1} - \delta H_{w_i}^{n+1,m+1}}{\Delta t}$$

el otro término temporal es determinado de la misma forma.

Para un espaciamiento de malla (Δz) constante, la discretización final de la ecuación al interior del nodo *i* es:

$$\frac{C_{we_i}^{n+1,m}}{\Delta t}\delta\left(H_{a_i}^{n+1,m+1} - \delta H_{w_i}^{n+1,m+1}\right) + S_{sw}\frac{\Theta_{w_i}^{n+1,m}}{\phi}\frac{\delta H_{w_i}^{n+1,m}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta z^2}\left[K_{w_i+\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(\delta H_{w_{i+1}}^{n+1,m} - \delta H_{w_i}^{n+1,m}\right)\right.$$
$$\left. - K_{w_i-\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(\delta H_{w_i}^{n+1,m} - \delta H_{w_{i-1}}^{n+1,m}\right)\right] = -\frac{\Theta_{w_i}^{n+1,m} - \Theta_{w_i}^{n}}{\Delta t} - S_{sw}\frac{\Theta_{w_i}^{n+1,m}}{\phi}\frac{H_{w_i}^{n+1,m} - H_{w_i}^{n}}{\Delta t} +$$
$$+ \frac{1}{\Delta z^2}\left[K_{w_i+\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(H_{w_{i+1}}^{n+1,m} - H_{w_i}^{n+1,m}\right) - K_{w_i-\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(H_{w_i}^{n+1,m} - H_{w_{i-1}}^{n+1,m}\right)\right] - \frac{K_{w_i+\frac{1}{2}}^{n+1,m} - K_{w_i-\frac{1}{2}}^{n+1,m}}{\Delta z}\sin\psi \tag{5.28}$$

donde:

$$K_{\alpha_i \pm \frac{1}{2}}^{n+1,m} = \frac{1}{2}\left(K_{\alpha_i \pm 1}^{n+1,m} - K_{\alpha_i}^{n+1,m}\right) \tag{5.29}$$

La ecuación del aire es desarrollada de forma similar, esto es:

$$\left(\phi - \Theta_{w_i}^{n+1,m}\right)\frac{\rho_{0a}}{h_{0a}}\frac{\delta H_{a_i}^{n+1,m}}{\Delta t} - \rho_{a_i}^{n+1,m} C_{we}^{n+1,w}\frac{\delta H_{a_i}^{n+1,m} - H_{w_i}^{n+1,m}}{\Delta t} -$$
$$- \frac{1}{\Delta z^2}\left[\left(\rho_a K_a\right)_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(\delta H_{a_{+1i}}^{n+1,m} - \delta H_{a_i}^{n+1,m}\right)\right] - \frac{1}{\Delta z^2}\left[\left(\rho_a K_a\right)_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,m}\left(\delta H_{a_+}^{n+1,m} - \delta H_{a_{i-1}}^{n+1,m}\right)\right]$$