ESTUDIO DE LA MODELIZACIÓN DEL FLUJO DE AGUAS SUBTERRÁNEAS Y TRANSPORTE DE SOLUTOS SOBRE MEDIOS FRACTALES

Simó, J.A.; Paredes, C.; Borregón, J.L.; Elorza, Fco.J.
Depto. Matemática Aplicada y Métodos Informáticos. E.T.S.I. de Minas. U.P.M.
C/Ríos Rosas 21. Madrid 28003. ESPAÑA. (tel. 3366973; FAX 3367051)

1 Introducción

Las simulaciones del flujo de agua subterránea en la zona saturada y del transporte de solutos por este, se realizan generalmente sobre medios porosos que son considerados homogéneos. Sin embargo, esta simplificación es muchas veces inaceptable. Es por esto por lo que se hace necesario el simular sobre medios heterogéneos, pero al trabajar en estos medios, desde el punto de vista computacional, aparecen problemas numéricos asociados al aumento de la heterogeneidad en el sentido de la irregularidad en su distribución, cuantificada mediante la dimensión fractal.

En este trabajo se van a resolver las ecuaciones de flujo sobre un acuífero confinado y saturado (1), sobre un dominio bidimensional rectangular Ω, para luego aplicar la ley de Darcy (2) y obtener el campo de velocidades asociado a este:

$$S\frac{\partial h}{\partial t} - \text{div}\ (m \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{grad}\, h) = q \qquad (1)$$

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{grad}\, h \qquad (2)$$

Siendo: S el coeficiente de almacenamiento, m el espesor del acuífero confinado y saturado, $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ el tensor de permeabilidades para cada punto $\mathbf{x}$ del acuífero, $h(\mathbf{x},t)$ es la altura piezométrica incógnita del problema, $q(\mathbf{x},t)$ son los caudales de bombeos o inyecciones que se realizan durante el tiempo t en la posición $\mathbf{x}$, y $\mathbf{u}$ es la velocidad del flujo de agua. El problema se completa con la imposición de las condiciones de contorno Neumann y Dirichlet, en la frontera Γ de Ω, e iniciales, que se pueden observar en la figura 1.

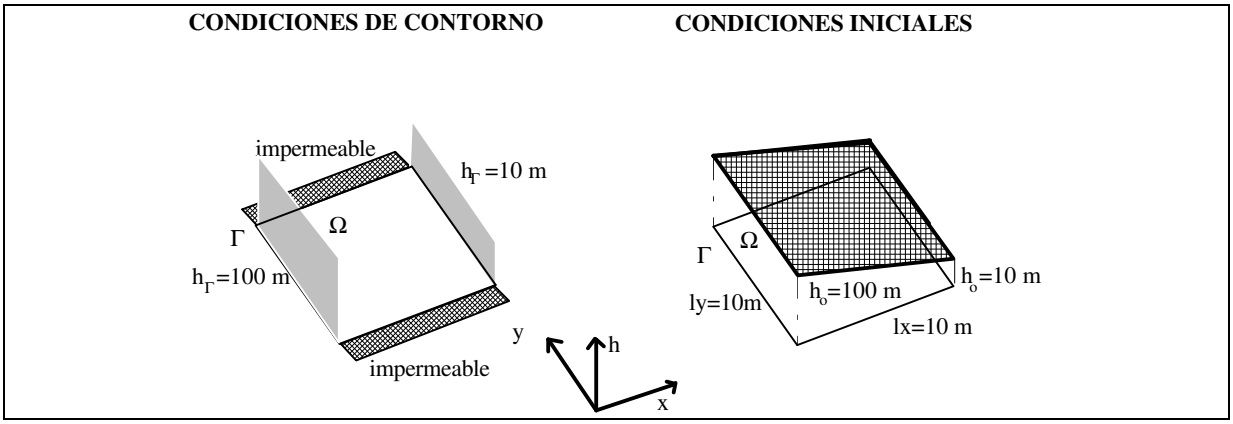


Figura 1. Condiciones de contorno e iniciales asociadas al problema.

Además, se ha supuesto que el dominio de cálculo, donde se va a resolver el problema, es geológicamente heterogéneo, estando definida la heterogeneidad a partir de la log-conductividad hidráulica (log $\mathbf{K}$), que se representará mediante un medio poroso sintético de infinitas longitudes de correlación y de varianza dependiente de la escala, esto es un medio de tipo fractal.

El problema del flujo se resolverá en h(**x**,t) mediante una aproximación de Galerkin sobre el dominio Ω, bidimensional rectangular. Cada bloque de heterogeneidad se discretiza en elementos finitos de Lagrange de tipo P1 a razón de 2, 8 y 18 elementos por bloque (Simó [10]) como se puede observar en la figura 2. Conforme aumenta el grado de discretización de los bloques de heterogeneidad, lo hace también el número de nodos y, con ello, las incógnitas que aparecen en el sistema de ecuaciones lineales resultante. Para resolver este sistema se van a emplear dos métodos iterativos: uno el denominado S.O.R. (método de sobrerelajación) y otro de Gradiente Conjugado, comparándose en este trabajo la efectividad de ambos métodos, variando la dimensión fractal del medio heterogéneo y el grado de discretización señalado del mismo, cuantificando de esta forma la influencia de la heterogeneidad en la resolución del sistema de ecuaciones algebraicas resultante.

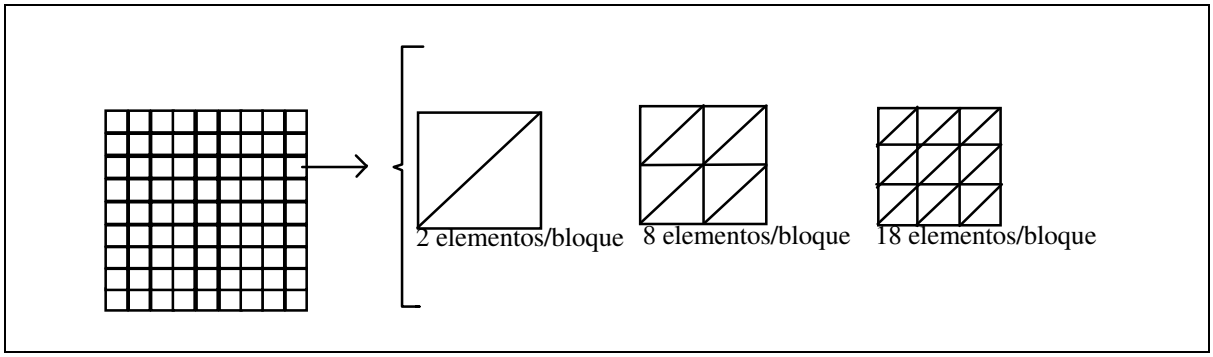


Figura 2.- Discretización de un bloque de heterogeneidad .

2 Simulación de medios heterogéneos

Se han usado los tres medios fractales, que aparecen en la figura 2, en los que se ha variado la dimensión fractal Df del medio, manteniendo la varianza de la generación (Fournier[2], Peitgen[7], Borregón[1] y Paredes[6]):

$$\mathrm{Var}\left[\Psi(\mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{y})\right] = \sigma_{\Psi}^{2}\left|\mathbf{x} - \mathbf{y}\right|^{2H} \tag{3}$$

Siendo $\Psi(\mathbf{x})=\log \mathbf{K}(\mathbf{x})$ y $\mathrm{Df} = \mathrm{E} + 1 - \mathrm{H}$, donde E es la dimensión topológica y H es el parámetro de Hurst.

Se ha partido de medios generados en dominios de 17x17 bloques (figura 2), eligiendo de ellos una zona representativa de 10x10 bloques, como en el caso anterior. El logaritmo de la permeabilidad elegido tiene sigue una distribución $\mathrm{LogN}(\mu_{LN},\sigma_{LN})$ donde se ha escogido valores reales, Isaaks, Srivastava[], para los parámetros media y desviación típica:

- μ_{LN} =2.66 10^{-6} m/s
- σ_{LN} =4.884 10^{-6} m/s

Para pasar a una distribución $N(\mu_N,\sigma_N^2)$ se puede usar (Journel[3]):

$$\mu_N = \mathrm{Ln}\,\sigma_{LN} - \frac{\sigma_N}{2} \qquad\qquad \sigma_N^2 = \mathrm{Ln}\left[1 + \frac{\sigma_{LN}}{\mu_{LN}}\right] \tag{4}$$

Con lo que:

- μ_N =-13.57 m/s
- σ_N^2 =1.04 m/s

Así se han generado tres medios para cada uno de los valores de la dimensión fractal 2,25; 2,5 y 2,75, (figura 3) y por cada uno de ellos las tres discretizaciones presentadas anteriormente en la figura 2 (2, 8 y 18 elementos por bloque).

3 Estudio del problema

Se van a abordar el problema planteado sobre diferentes campos de permeabilidades (figura 3), que conformarán el dominio Ω sometido a un flujo en estado estacionario. Para forzar esta condición de estacionariedad se hace el coeficiente de almacenamiento S numéricamente nulo, con lo que la derivada temporal no influye en la resolución del problema.

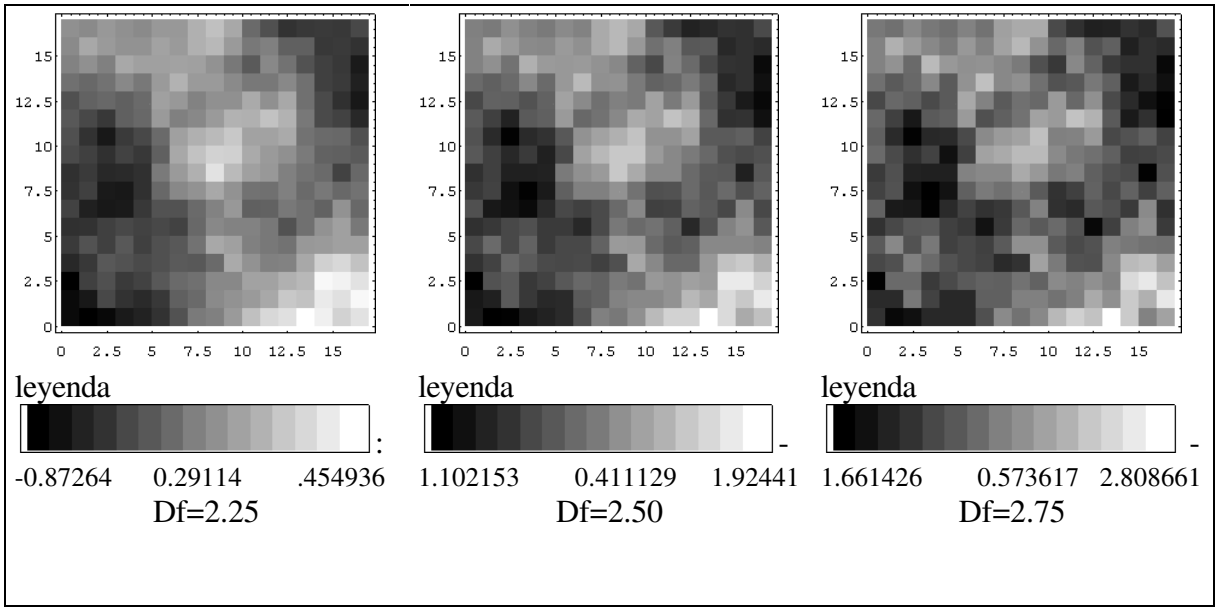


Figura 3. Medios usados en la simulación

Se han realizado los cálculos para un medio constituido por 10x10 bloques de heterogeneidad, definiendo en cada uno de ellos un valor de transmisividad. El medio se ha discretizado, para la resolución del problema de flujo, posteriormente refinando cada bloque en 2, 8 y 18 elementos triangulares (figura 2), tal y como se ha planteado. Previamente se va a reealizar un estudio del factor de relajación óptimo para el método S.O.R sobre un medio homogéneo y distintos grados de discretización; así como un estudio del condicionamiento de la matriz del sistema para el caso del Gradiente Conjugado.

3.1 Estudio del factor de relajación óptimo ω_{opt} para resolución con S.O.R.

Si consideramos el sistema de ecuaciones lineal $\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b}$ resultante para conocer el factor de relajación óptimo ω, o de aceleración de convergencia, se van a tomar tres posibilidades diferentes comparandolas. La manera más directa y fiable de conocerlo es la experimental, si bien por ser un cálculo tedioso y extenso es solo útil para comprobar los otros resultados; ya que para calcular el valor de ω para el cual es mínimo el número de iteraciones, es preciso hacer pasadas sucesivas del código, comparando el número de iteraciones que hace en cada una.

Las otras dos formas de hacerlo se basan en el calculo de las matrices **J**, $\mathcal{L}_1$ y $\mathcal{L}_\omega$. Estas matrices son las del sistema iterativo de Jacobi, de Gauss Seidel y del S.O.R. con factor de relajación ω. Puede calcularse también el ω_{opt} teórico a partir de una expresión en función de su radio expectral o, como en el último caso, mediante la minimización de este. Para obtener las matrices se descompone la matriz **A** en las matrices: diagonal **D**, triangular inferior **L** y triangular superior **U**, de forma que: **A**=**D**-**L**-**U**. Las matrices de los sistemas iterativos antes citados tienen por expresión:

$$\mathbf{J} = \mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \tag{6}$$

$$\mathcal{L}_1 = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \cdot \mathbf{U} \tag{7}$$

$$\mathcal{L}_\omega = \left[(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})\mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{L}\right]^{-1} \cdot \left[(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L}) + \omega \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{U}\right] \tag{8}$$

La matriz del sistema **A** es una matriz simétrica de NxN elementos, donde N es el número de nodos resultante de la discretización espacial. Al tener en cuenta las condiciones de contorno tipo Dirichlet la matriz se debería reducir al ser la solución conocida en los nodos de la frontera que tengan dicha condición (figura 3). Sin embargo, para generalizar la solución del problema se va a usar una técnica de penalización en los nodos antes mencionados y resolver mediante una matriz de NxN en el caso de la resolución mediante Gradiente Conjugado.

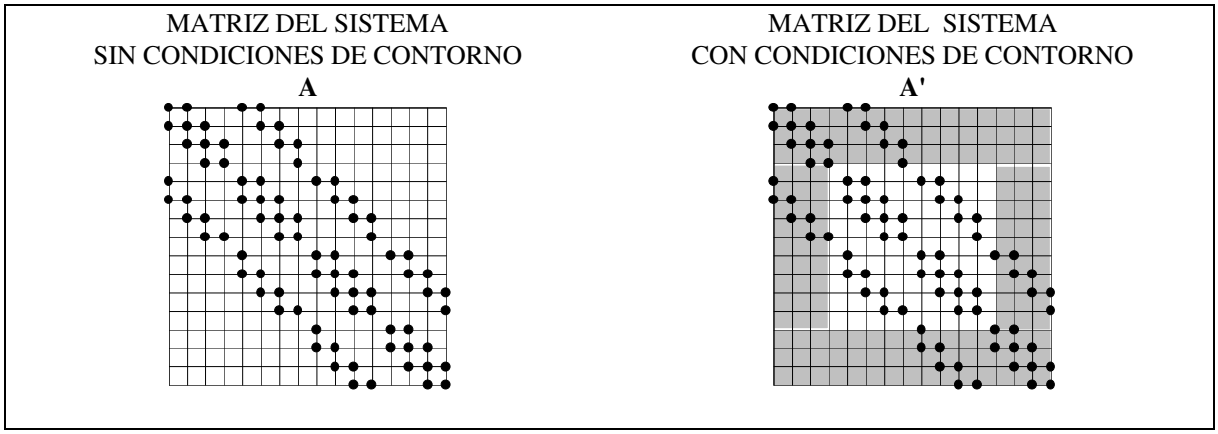


Figura 4. Eliminación de nodos afectados por la condición de contorno.

Una vez calculada la matriz **A** se procederá al cálculo de las matrices antes citadas. Se puede ver en Young [11] que $\omega_{opt.}$ coincide con el $\omega_{opt} = \mathrm{Min}_\omega \rho(\mathcal{L}_\omega)$. Centrandonos en la minimización del radio espectral de la matriz del sistema iterativo $\mathcal{L}_\omega$, $\rho(\mathcal{L}_\omega)$, hay que señalar que este método de calculo se ω_{opt} solo es posible para sistemas con un número limitado de incognitas, ya que dada su expresión es dificil obtener por un lado la propia matriz $\mathcal{L}_\omega$, y por otro los autovalores. Otra forma de calcular el radio espectral $\rho(\mathcal{L}_\omega)$ viene dado por la expresión Young[11]:

$$\rho(\mathcal{L}_\omega) = \begin{cases} \left[\dfrac{\omega \cdot \rho(J) + \sqrt{\omega^2 \rho(J) - 4 \cdot (\omega - 1)}}{2}\right]^2 & \text{si } 0 < \omega < \omega_{opt} \\ \omega - 1 & \text{si } \omega_{opt} < \omega < 2 \end{cases} \tag{9}$$

Finalmente se puede obtener ω_{opt} a partir de cualquiera de las expresiónes de la tabla 1. Estos métodos conllevan la dificultad de calcular numéricamente los autovalores de matrices muy grandes, acumulandose un error que luego se podra reflejar en el ω_{opt} calculado.

Matriz	Forma de cálculo
J	$\omega_{opt} = \dfrac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(J)^2}}$
$\mathcal{L}_1$	$\omega_{opt} = \dfrac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(\mathcal{L}_1)}}$

$\mathcal{L}_{\varpi}$	$\varpi_{opt} = Min_{\varpi}\rho(\mathcal{L}\varpi)$

Tabla 1. Distintas formas de cálculo de ϖ_{opt}.

La forma de la curva experimental que representa la evolución de $\rho(\mathcal{L}_{\omega})$ en función de ω se puede observar en la figura 5.

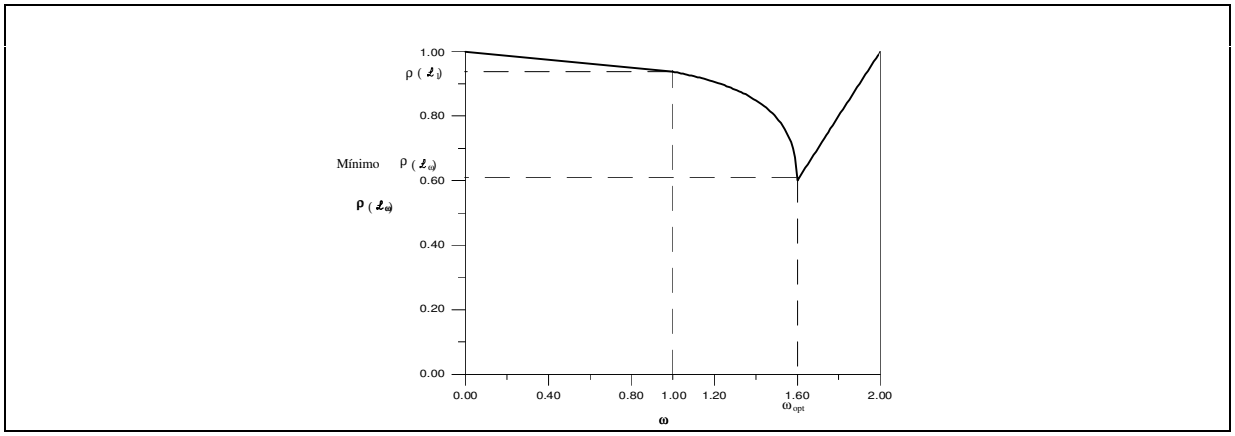


Figura 5. Representación de $\rho(\mathcal{L}\omega)$ en función de ω.

3.1.1 Estudio para un medio homogéneo y distintas discretizaciones

Si ensayamos la evolución del ω_{opt} para el caso del medio homogéneo la tendencia es al crecimiento de ω_{opt} según aumenta el grado de discretización, tal y como se puede observar en la figura 5; mientras que la minimización de $\rho(\mathcal{L}_{\omega})$ se observa en la figura 6 que esta de acuerdo con lo obtenido anteriormente, observándose la tendencia al aumento de ω_{opt} conforme aumenta la discretización.

Por comparación de las gráficas de la figura 5 , y más claramente en la tabla 2, se puede apreciar que hay un ligero desfase entre el valor de ω_{opt} calculado teóricamente y su valor calculado experimentalmente. Este desajuste puede ser debido a los errores cometidos en el cálculo de las matrices **J** y $\mathcal{L}_{\omega}$, así como en el calculo de sus autovalores, realizado mediante la transformación de la matriz en cuestión en una de Hessenberg y cálculo a través del método QR (Press et al [8])

	2 Elementos/bloque	8 Elementos/bloque	18 Elementos/bloque
Experimental	ωopt=1.48	ωopt=1.60	ωopt=1.67
$\omega=\omega(\rho(J))$	$\omega\rho(J)$=1.61	$\omega\rho(J)$=1.80	$\omega\rho(J)$=1.84
Mínimo $\rho(L_{\omega})$	$\omega\rho(L_{\omega})$=1.60	$\omega\rho(L_{\omega})$=1.80	$\omega\rho(J)$=1.87

Tabla 2. Diferencias entre factores de relajación óptimos.

En todos los casos se ha podido comprobar que la diferencia entre minimizar $\rho(\mathcal{L}_{\omega})$ y la expresión para el cálculo directo es más que aceptable para considerar solo una de ellas, con lo que la figura es representativa del fenómeno que quiere representar.

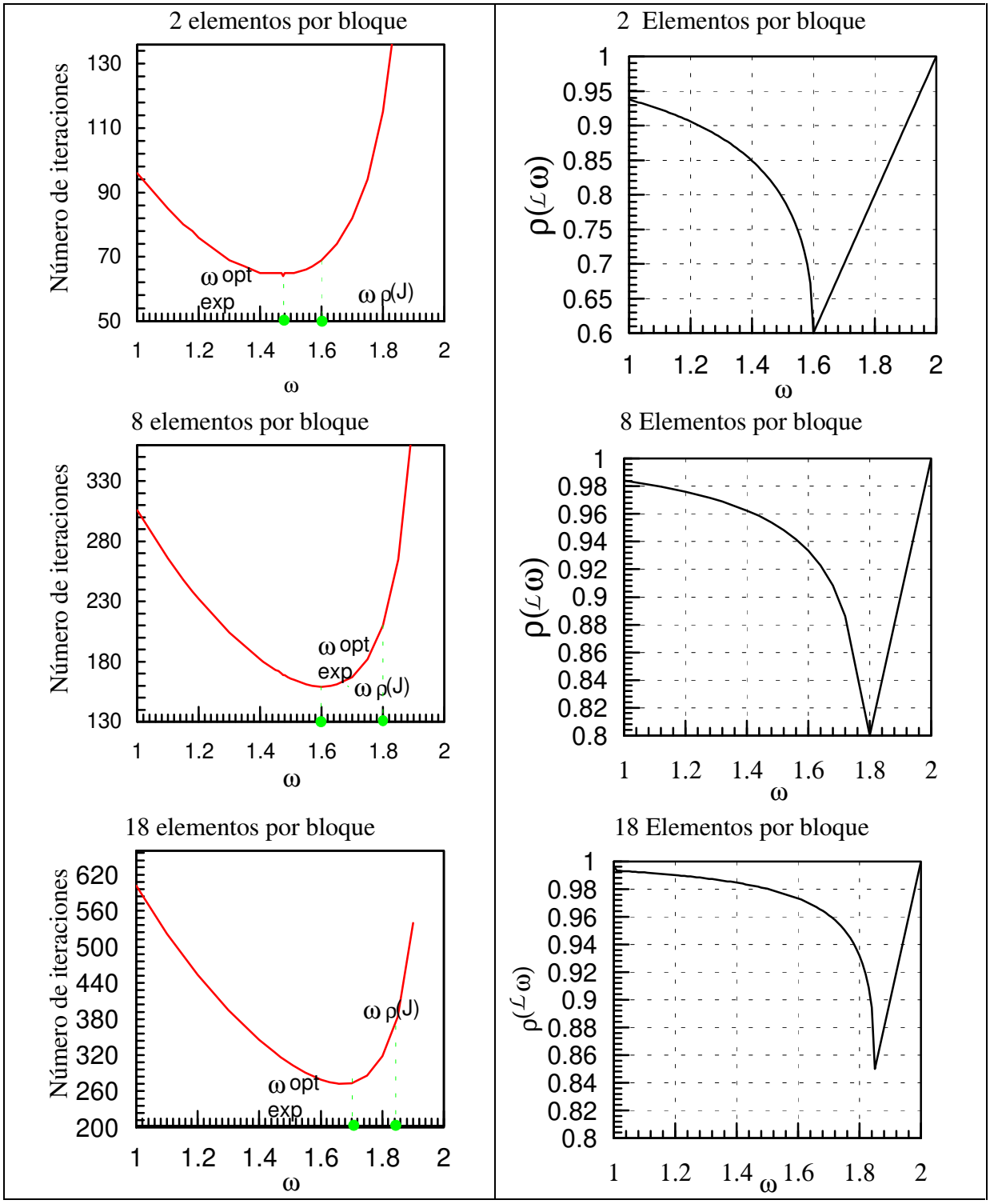


Figura 6- Comparación entre las diferentes formas de obtener los factores de relajación para los distintos grados de discretización.

3.1.2 Estudio para medios con diferentes grados de heterogeneidad y distintas discretizaciones

El estudio combinado de la discretización y la heterogeneidad se realiza en base a ensayos en los que se varia, por un lado el número de elementos triangulares por bloque heterogeneidad (como en el caso homogéneo) y la dimensión fractal (Df) del medio.

Para realizar esto se puede comparar la variación de ω, por un lado con el grado de discretización para una misma Df, y por otro con la Df para un mismo grado de discretización.

Esta comparación se realizará mediante los cálculos teóricos. La figura 7 muestra para el caso de discretización de dos elementos por bloque. Tal y como se puede observar la forma de la curva experimental es muy similar en los tres casos, si bien se va desplazando hacia arriba conforme se aumenta la dimensión fractal, al crecer el número de iteraciones necesarias para resolver el sistema con el error aceptado.

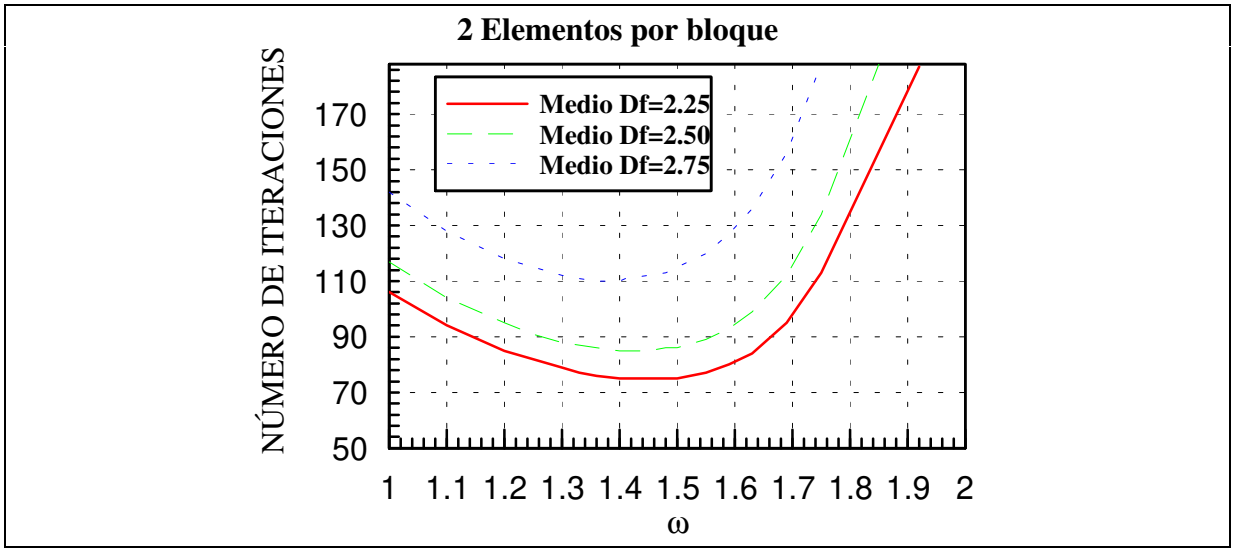


Figura 7.- Comparación de ω experimental para una discretización de 2 elementos por bloque y medios : Df=2,25; Df=2,50 y Df=2,75.

El caso heterogéneo teórico se resume en la tabla 3, sobre la que hay que interpretar que el primer caso de discretización se ha calculado mediante $\rho(\mathcal{L}_\omega)$, mientras en que los otros dos casos se ha hecho mediante el cálculo de $\rho(\mathbf{J})$ y la aplicación del calculo teórico de $\rho(\mathcal{L}_\omega)$. Podemos comprobar de nuevo que al aumentar la discretización aumenta, para la misma dimensión fractal, el valor de ω_{opt}. Respecto a la variación con la Df se puede observar en esta misma tabla, o más especificado en las gráficas de las figuras 8, 9 y 19, que el ω_{opt} aumenta con la dimensión fractal en los casos de 2 y 8 elementos por bloque. En el último caso no se cumple pero se puede explicar en base a que la matriz **J** es de 899X899 elementos, con lo que los errores cometidos en el cálculo de sus autovalores pueden provocar está anomalía.

$\omega_{opt}(J)/\rho(J)$	2.25	2.50	2.75	Dimensión fractal
2 e/b	1.6747 / 0.9809	1.6855 / 0.9824	1.7056 / 0.9850	
8 e/b	1.8222 / 0.9952	1.8291 / 0.9956	1.8420 / 0.9963	
18 e/b	1.8759 / 0.9978	1.8606 / 0.9971	1.8890 / 0.9982	
Discretización				

Tabla 3. Factor de relajación óptimo según discretización y Df.

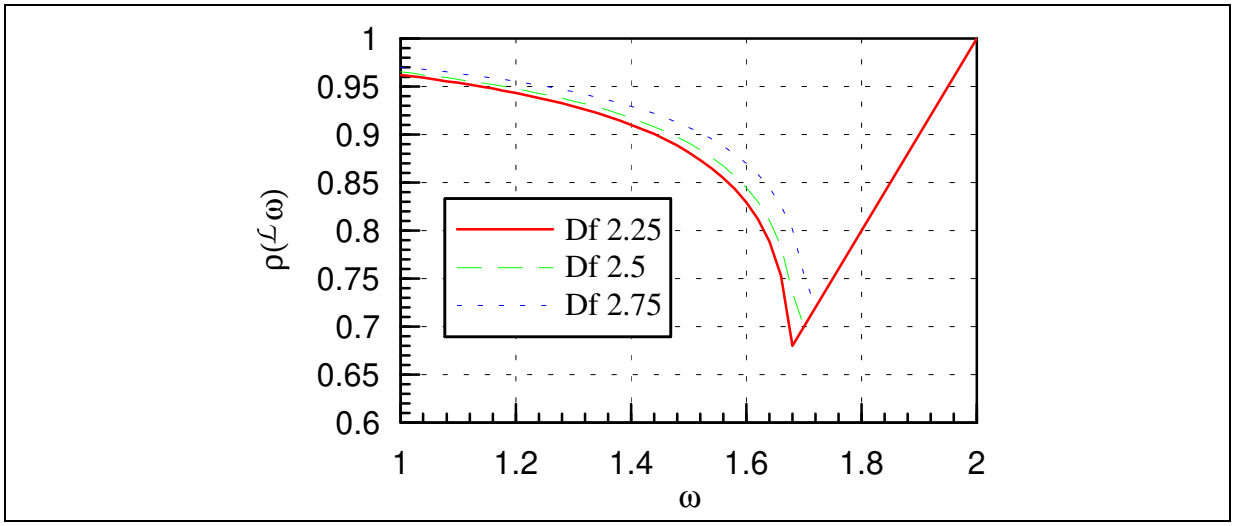


Figura 8. Cálculo de ωopt para 2 elementos por bloque y diferentes Df.

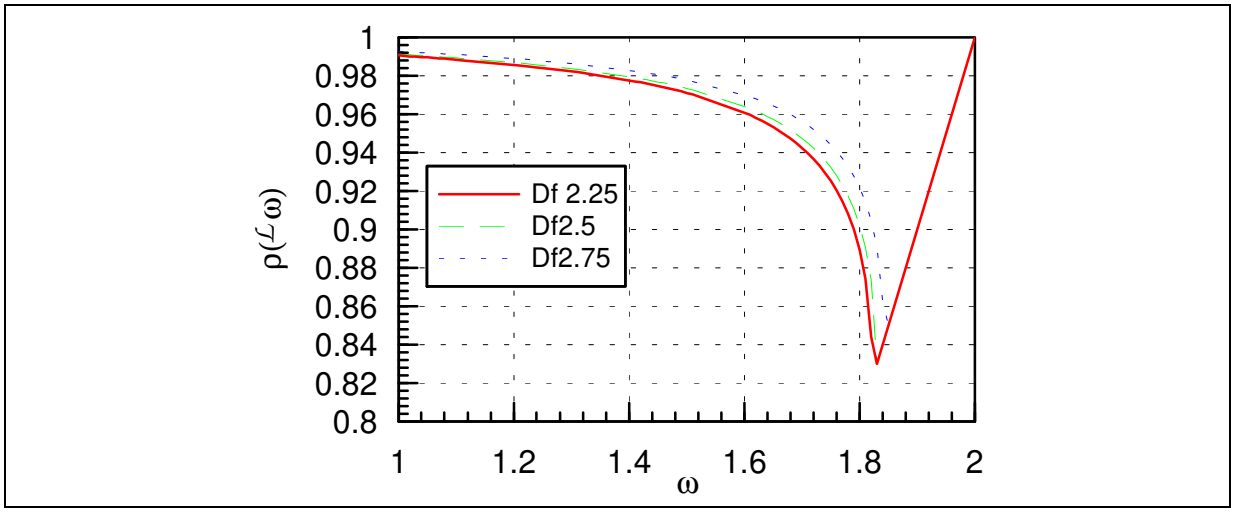


Figura 9. Cálculo de ωopt para 8 elementos por bloque y diferentes Df.

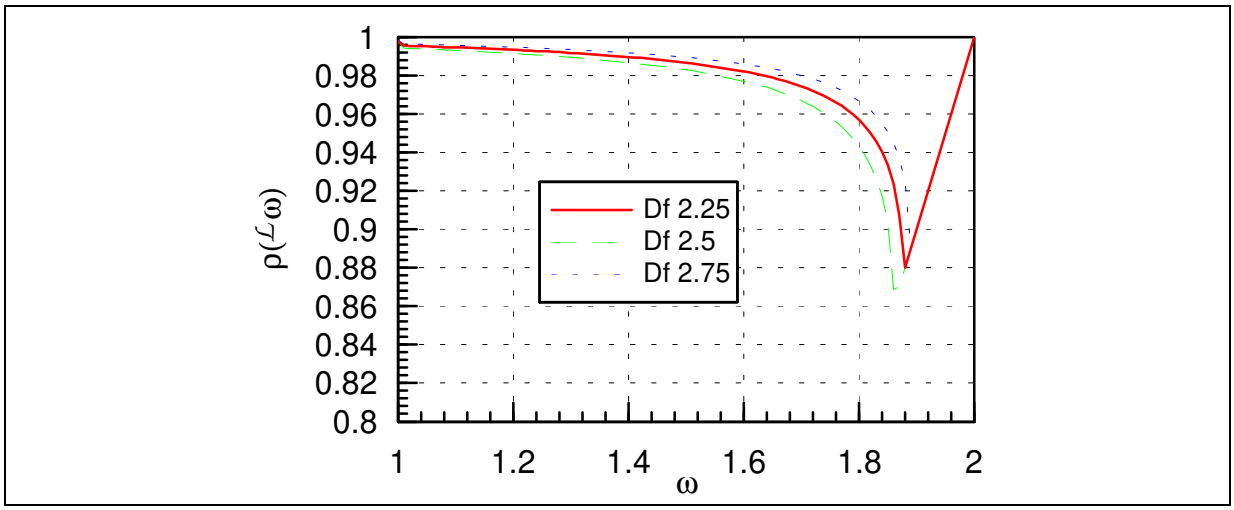


Figura 10. Cálculo de ωopt para 18 elementos por bloque y diferentes Df.

3.2 Estudio del condicionamiento de la matriz en la resolución por Gradiente Conjugado

El método del gradiente conjugado (G.C.) es un tipo particular resolución mediante la técnica de direcciones conjugadas. Se aplica a sistemas cuya matriz $\mathbf{A}$ es simétrica y definida positiva. Teóricamente el gradiente conjugado da la solución exacta a lo sumo en N pasos, aunque debido a los errores de redondeo, en los problemas mal condicionados, se usa como un método iterativo que converge hacia la solución.

El precondicionamiento de un sistema $\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b}$ se realiza para que este mejor condicionado que el original de esta forma la velocidad de convergencia del método aumenta. Esto es debido a la velocidad de convergencia se puede definir para este método como (Golub[3]):

$$\left\|\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{x}_i\right\|_2 \le 2\cdot\sqrt{\kappa}\cdot\gamma^i\left\|\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{x}_0\right\|_2 \qquad \forall \text{ iteración i} \tag{10}$$

Donde: $\gamma=\dfrac{(\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}<1$ y $\kappa=\dfrac{\text{Mayor autovalor de }\mathbf{A}}{\text{Menor autovalor de }\mathbf{A}}$ es el condicionamiento de $\mathbf{A}$

Como consecuencia de esta disminución en la velocidad de convergencia aumenta el número de iteraciones y el límite de exactitud para el cual se obtiene una solución. Por ello es mejor aplicar el gradiente biconjugado.

Este precondicionamiento se realiza a través de una matriz $\mathbf{S}$ que llamaremos precondicionador de forma que:

$$\left(\mathbf{S}^t\cdot\mathbf{A}\cdot\mathbf{S}\right)\left(\mathbf{S}^{-1}\cdot\mathbf{x}\right)=\left(\mathbf{S}^t\cdot\mathbf{b}\right)\equiv\bar{\mathbf{A}}\cdot\bar{\mathbf{x}}=\bar{\mathbf{b}} \tag{11}$$

De esta forma se consigue $\kappa(\bar{\mathbf{A}})<\kappa(\mathbf{A})$.

La matriz $\mathbf{S}$ no se escoge arbitrariamente, sino que se hace de forma que cumpla que dada $\mathbf{Q}$ simétrica y definida positiva $\mathbf{Q}^{-1}=\mathbf{S}\cdot\mathbf{S}^t$. La matriz del sistema que se nos presenta será simétrica, pero en general no tiene porque ser definida positiva. Para poder resolver el sistema tendremos que aplicar un método más general como el del gradiente biconjugado. Este método es también aplicable a sistemas no simétricos. La solucción exacta se alcanza en menos de N iteraciones si los errores de redondeo son nulos. El algoritmo del gradiente conjugado ordinario se puede considerar como un caso especial del gradiente biconjugado donde la matriz $\mathbf{A}$ es simétrica. Este gradiente conjugado se puede interpretar como la minimización de la funcional $f(\mathbf{x})=\langle\mathbf{x},\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}\rangle-2\cdot\langle\mathbf{x},\mathbf{b}\rangle$. Si $\mathbf{A}$ es además definida positiva el algoritmo no puede romperse.

Para cualquier matriz no singular $\mathbf{A}$ el producto $\mathbf{A}^t\cdot\mathbf{A}$ es una matriz simétrica y definida positiva. Se puede pensar en aplicar el algoritmo del gradiente conjugado a $\mathbf{A}^t\cdot\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{A}^t\cdot\mathbf{b}$; pero el condicionamiento de la matriz $\mathbf{A}^t\cdot\mathbf{A}$ es el cuadrado del de la matriz $\mathbf{A}$, con lo que la velocidad de convergencia es menor.

A cerca de los ratios de convergencia se puede decir que el método del gradiente conjugado funciona bien para matrices bien condicionadas (cercanas a la matriz identidad $\mathbf{I}$), esto sugiere aplicar el método a una forma precondicionada de la ecuación del sistema, de forma que la matriz del sistema precondicionada este próxima a $\mathbf{I}$.

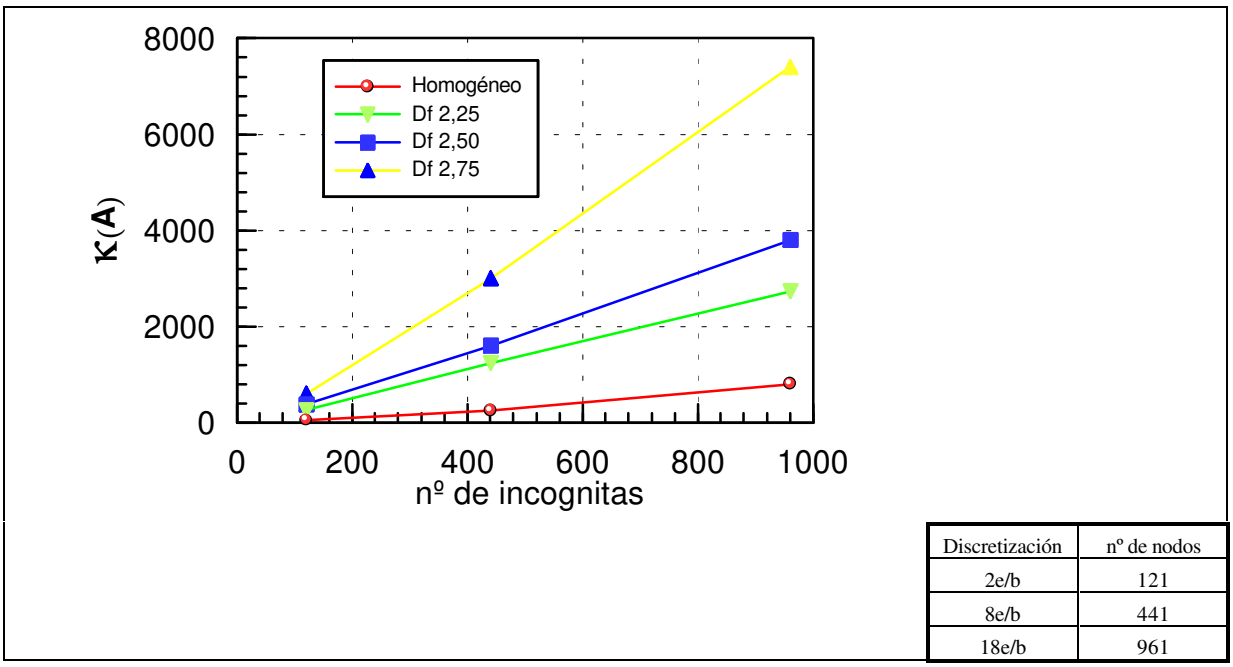
$$\left(\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\cdot\mathbf{A}\right)\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\cdot\mathbf{b} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathbf{A}}^{-1}\cdot\mathbf{A}\approx\mathbf{I} \tag{12}$$

$\tilde{\mathbf{A}}$ es el precondicionador, dando lugar al esquema del gradiente conjugado precondicionado (PBCG). En este estudio se va a usar un precondicionamiento dado por la propia diagonal de la matriz del sistema $\mathbf{A}$.

Finalmente el ratio de convergencia se va a definir como (Press et al.[8]).:

$$\frac{\left\| A^{-1} \cdot \left(A \cdot x - b \right) \right\|}{\left\| A^{-1} \cdot b \right\|} < \text{Convergencia máxima admisible} \qquad (13)$$

Los ensayos con distintos grados de discretización y dimensión fractal se han realizado sobre los mismos medios de 10x10 bloques usados en el punto anterior. La discretización es de nuevo de 2, 8 y 18 elementos por bloque de heterogeneidad siendo la dimensión fractal de 2,25; 2,50 y 2,75. Los resultados se pueden apreciar en la figura 11, de donde se puede deducir que la velocidad de convergencia disminuye, al aumentar el precondicionamiento, conforme aumenta la dimensión fractal y el grado de discretización.



Discretización	nº de nodos
2e/b	121
8e/b	441
18e/b	961

Figura 11. Condicionamientos de la matriz del sistema.

4 Comparación de los métodos S.O.R y G.C.

4.1 Estudio para un medio homogéneo y distintas discretizaciones

Se va ha considerar en principio un caso de un medio homogéneo y diferentes discretizaciones. En este ejercicio lo más significativo es el error que se va recogiendo en cada iteración, así como el número de iteraciones necesarias para que este error sea menor que el máximo admisible.

Como se puede ver en la figura 12 el número de iteraciones necesario para alcanzar la solución, con el mismo error admisible, es bastante menor en caso de usar el método del gradiente conjugado frente al S.O.R.. Hay que tener presente la definición del error para cada uno de los métodos, que en el caso del SOR está dado por la diferencia entre dos vectores en iteraciones consecutivas y en el del gradiente conjugado dado por (13)

Es también apreciable en la figura 12 que la forma de convergencia hacia el error máximo admisible es muy diferente., en el caso del gradiente conjugado lo hace bruscamente, debido a su funcionamiento (Quarteroni [9], Press et al [8]); mientras que en el S.O.R. lo va alcanzando suavemente y de una manera continua.

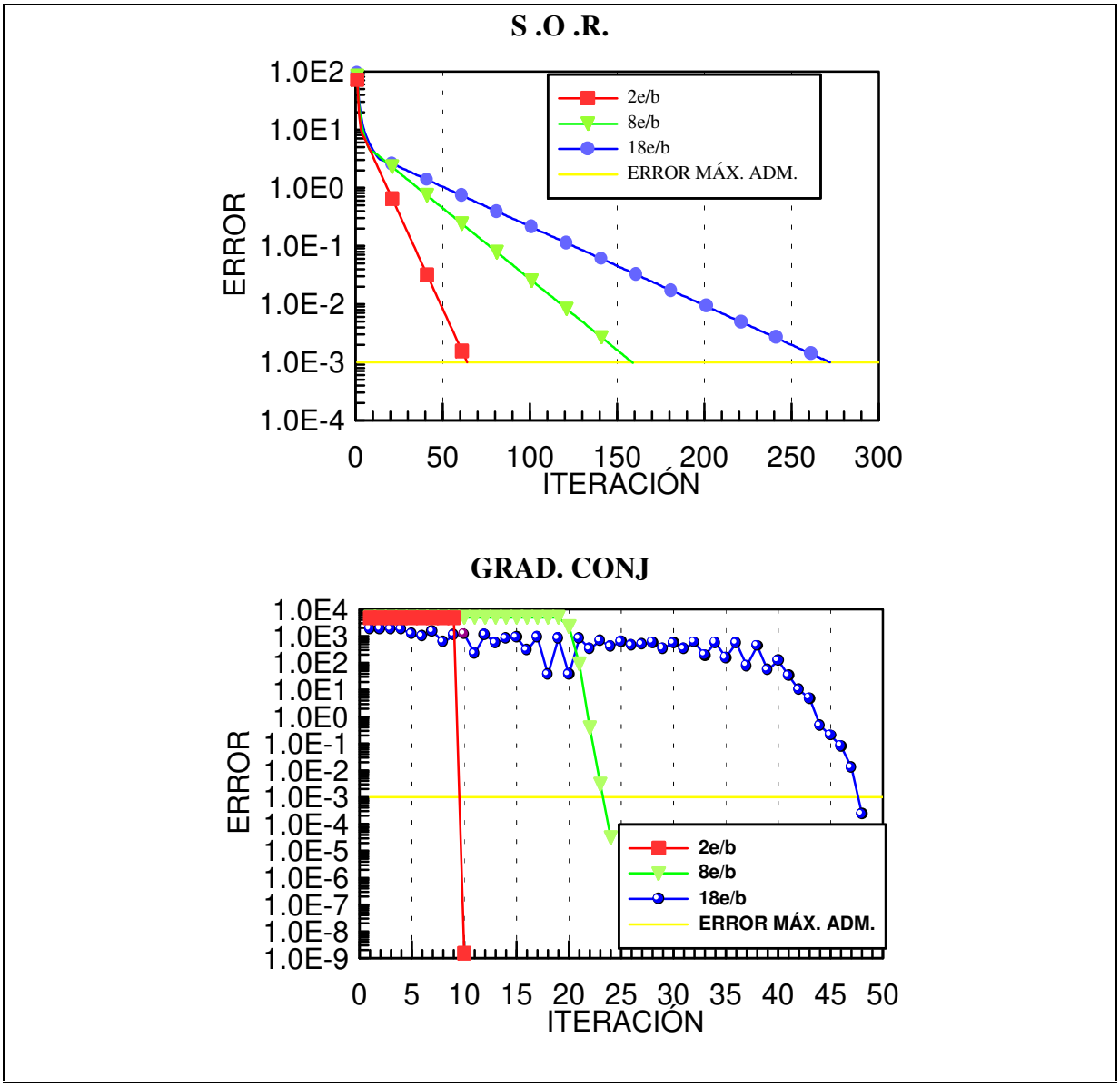


Figura 12. Comparación del error para el caso estacionario.

4.2 Estudio para medios con diferentes grados de heterogeneidad y distintas discretizaciones

Para el estudio de los medios heterogéneos nos vamos a centrar en el estudio del caso de estacionariedad pura (S=0 y un solo paso de tiempo), como en el caso anterior, observando los efectos combinados de la dimensión fractal y la discretización sobre la solución obtenida (piezometría y campo de velocidades).

De nuevo se pone de manifiesto de la diferente forma de actuar de ambos métodos destacando la diferencia de iteraciones, necesarias para alcanzar la solución aproximada, que existe entre el G.C. y el S.O.R., siendo mucho más rápido en el primero de los dos métodos.

Se puede concluir de estos ensayos que la técnica del G.C. con precondicionamiento diagonal es más eficiente, en principio, que la del S.O.R.

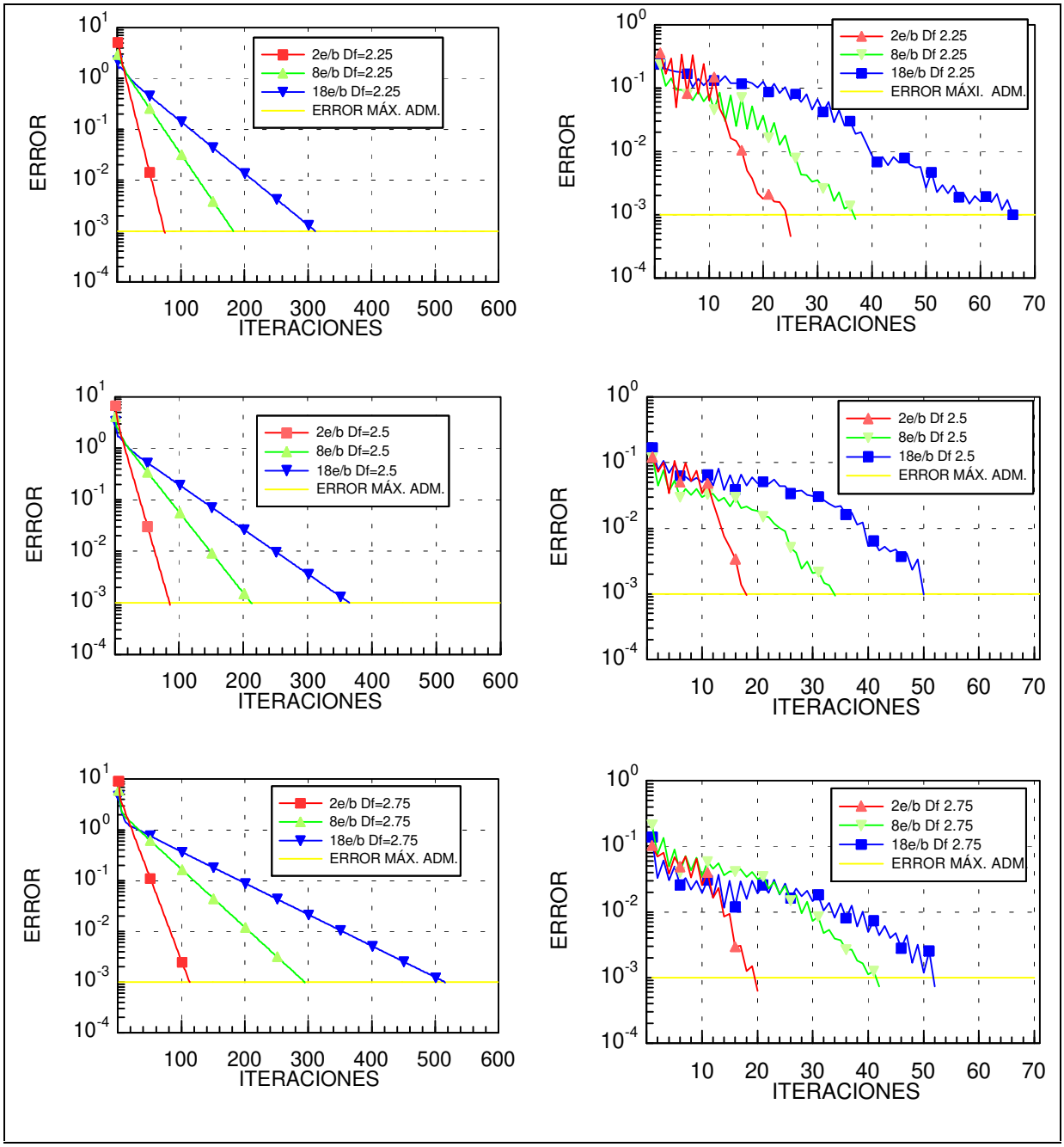


Figura 13. Variación del error en función de la iteración y de la discretización para distintos los distintos medios.

5 Aplicación a medios heterogéneos con mayor número de bloques

A partir de los resultados obtenidos vamos a usar la técnica de Gradiente Conjugado sobre un dominio de 129x43 bloques de heterogeneidad y una discretización de 8 elementos por bloque. Los medios porosos considerados son de dimensiones fractales 2,25; 2,5 y 2,75; y tienen la distribución de log permeabilidad que se puede apreciar en la figura 14.

Como se puede apreciar en las figuras 15 y 16 no hay ningún problema a la hora de encontrar la solución para los casos de dimensión fractal 2,25 y 2,50. Las soluciones, en campo de velocidades, para estos casos se puede observar en las figuras 17.

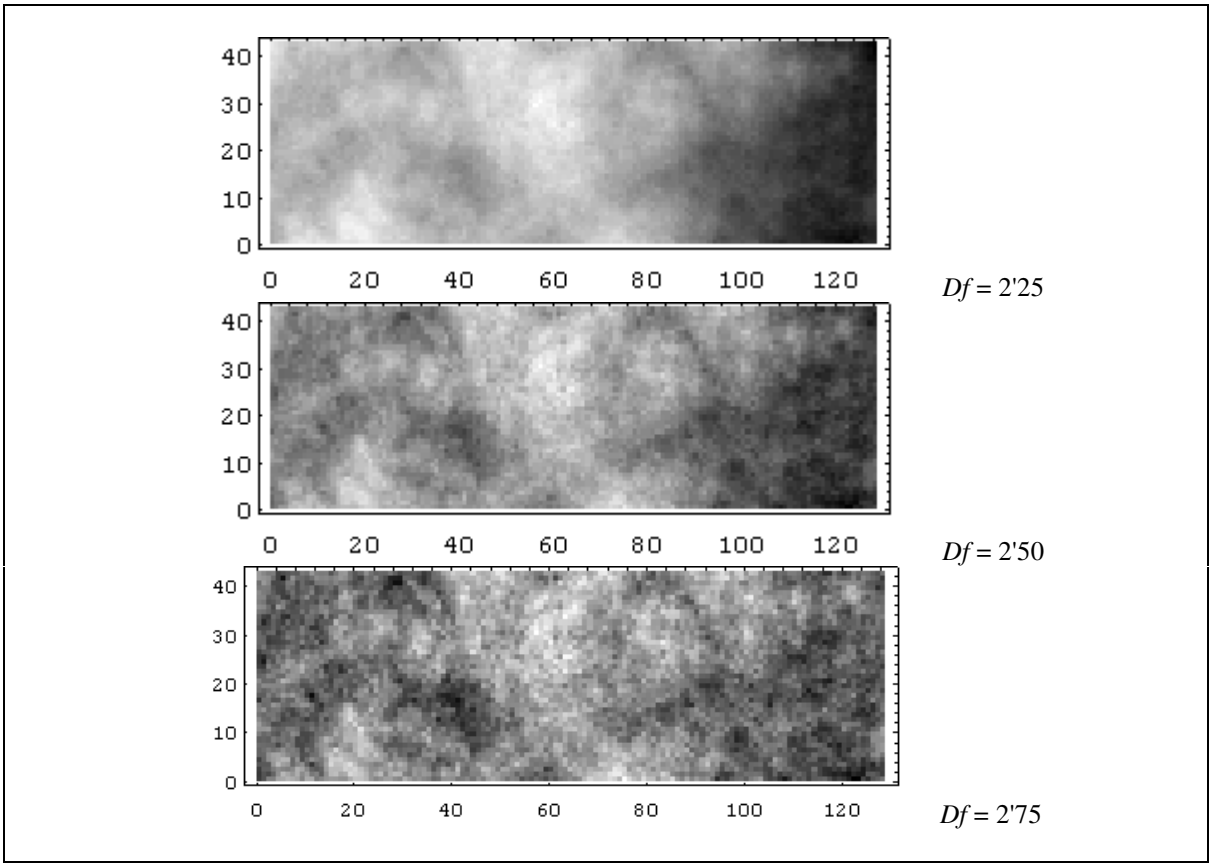


Figura 14. Ventanas de 129x43 seleccionadas en los medios fractales sintéticos.

De nuevo se resolverá un problema de flujo de aguas subterráneas como el planteado anteriormente; y con unas condiciones de contorno iguales a las anteriores, siendo los lados impermeables los situados longitudinalmente y con una mayor extensión.

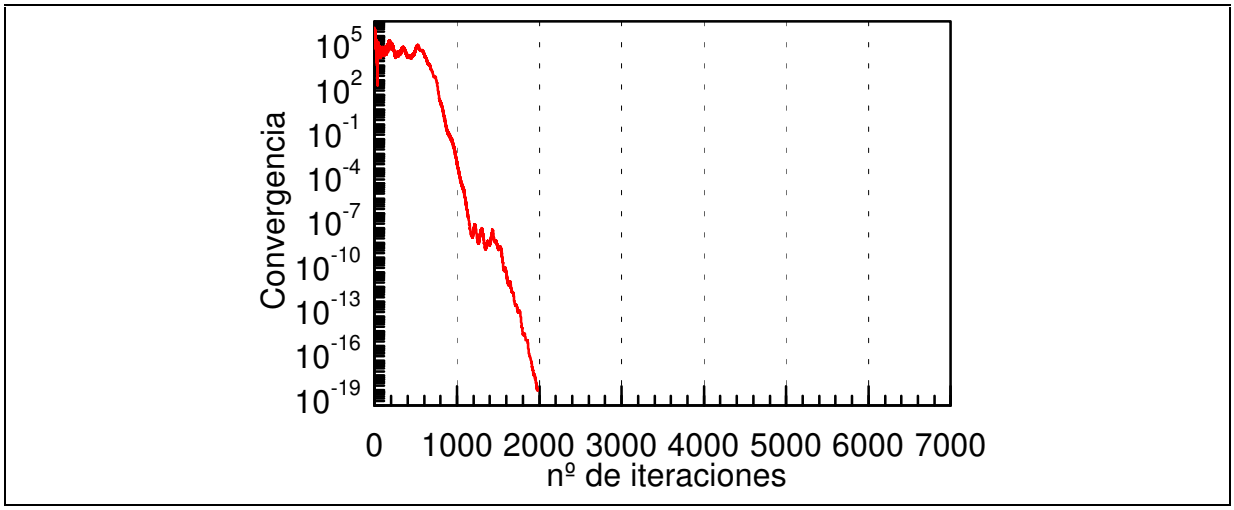


Figura 15. Convergencia del GC en la simulación sobre el medio de Df 2,25.

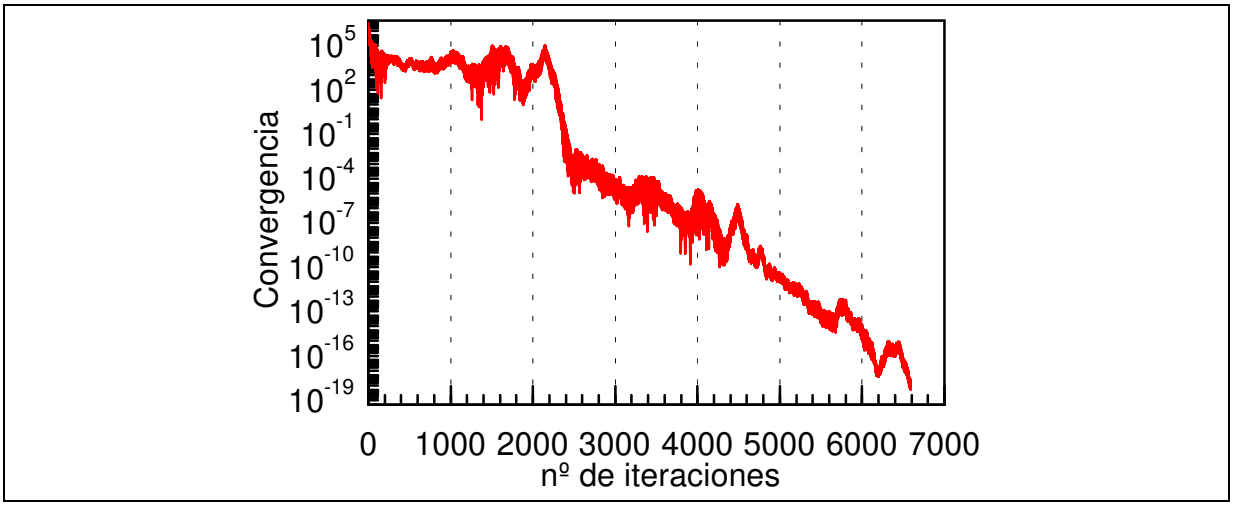


Figura 16. Convergencia del GC en la simulación sobre el medio de Df 2,50.

Pero en el caso de una mayor dimensión fractal, 2,75 , no es capaz de converger para un número de iteraciones igual al número de incógnitas. Para intentar resolver este problema se ha modificado la condición inicial del sistema, con la solución alcanzada mediante el método SOR en 600 iteraciones. De está forma se reduce apreciablemente el error al inicio de las iteraciones del G.C., pero tampoco se consigue que converga en un número de iteraciones inferior al número de incógnitas, en las que debería alcanzar la solución exacta (figura 18).

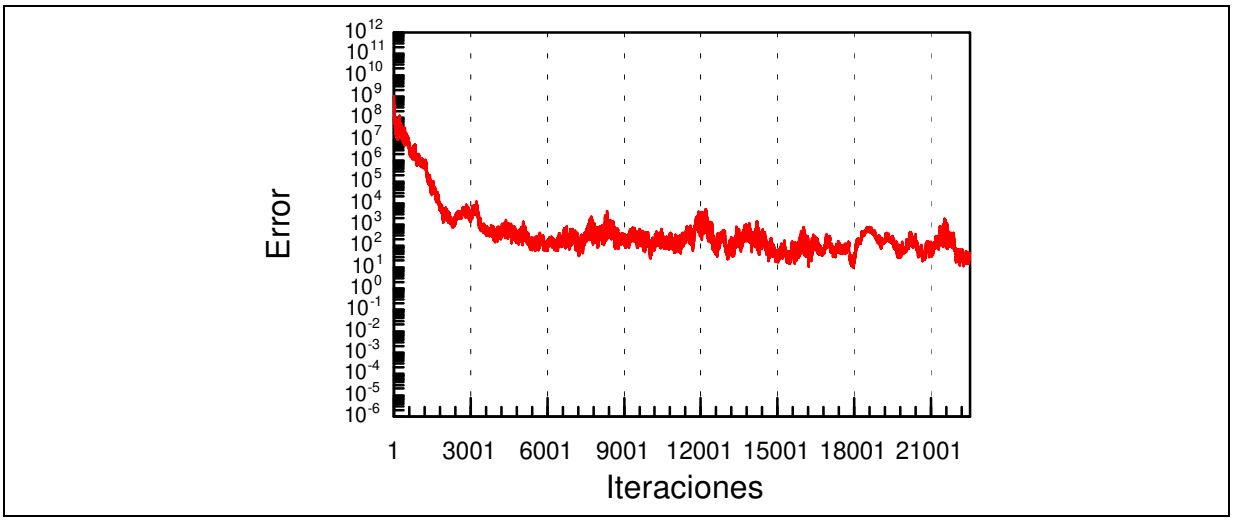


Figura 18. Curva de convergencia en medio Df 2,75 y condición inicial mejorada con SOR

Para mejorar la solución, a la vista de la curva de la figura 18, se puede plantear el volver a relanzar el sistema tras las 22.533 iteraciones (marcado por el número de incógnitas), o bien relanzar el sistema en cuanto la curva de convergencia cambie a una pendiente positiva en una escala dada. En ambos casos para relanzar el sistema se usará como condición inicial del sistema iterativo la obtenida hasta el momento de cálculo.

En el primer caso, que se puede observar en la figura 19, no solo no baja el error, si no que crece y se vuelve oscilante en una banda muy lejana de la convergencia mínima exigida.
Para el segundo caso en que cambie el signo de la pendiente (figura 20) se obtienen resultados muy parecidos a los anteriores (figura 21), no alcanzándose en ningún momento una solución que pueda ser dada por buena. Para el ejemplo mostrado se relanza el sistema en la iteración 2.724 con un error de 3.656,67, entrando de nuevo en el sistema iterativo con una estimación del error de 31.140,9 y oscilando a partir de él en la forma que se aprecia en la figura 21.

Como contrapartida el método SOR alcanza la solución en 8.056 (figura 23) teniendo una convergencia de acorde a la que presenta siempre este método (figura 22) si bien el número de iteraciones es elevada para alcanzar la solución aproximada.

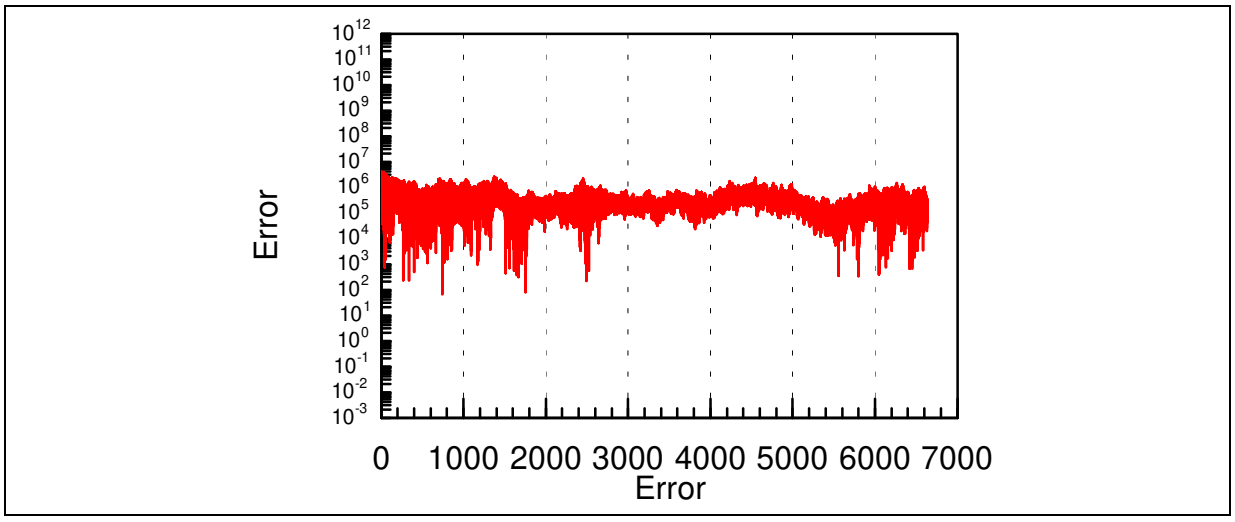


Figura 19. Curva de convergencia hasta la iteración 6.336 tras relanzamiento del sistema.

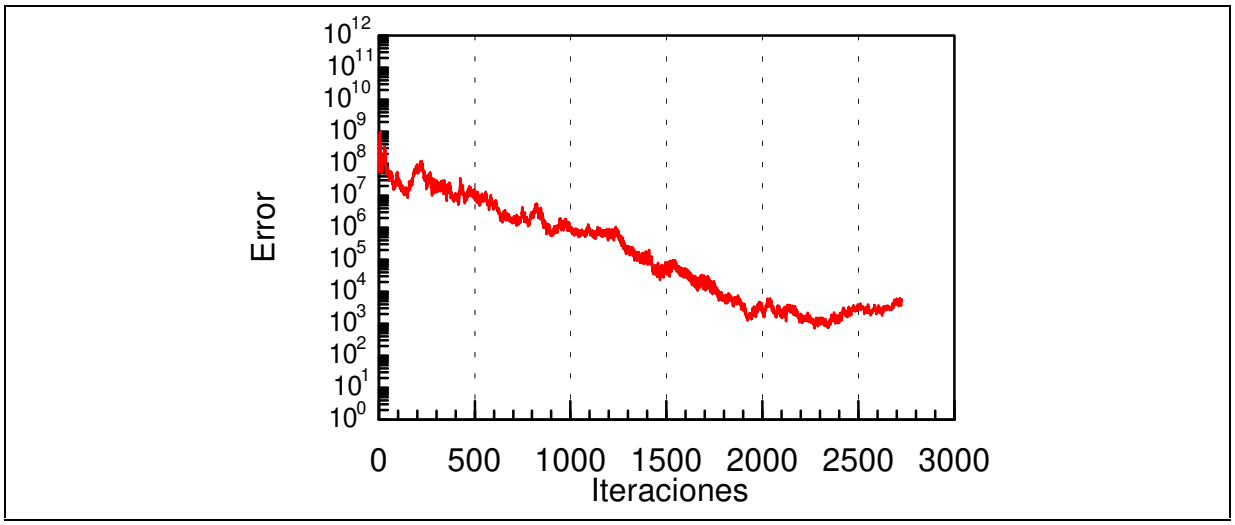


Figura 20. Curva de convergencia primitiva hasta el cambio de la pendiente de la curva en iteración 2.724.

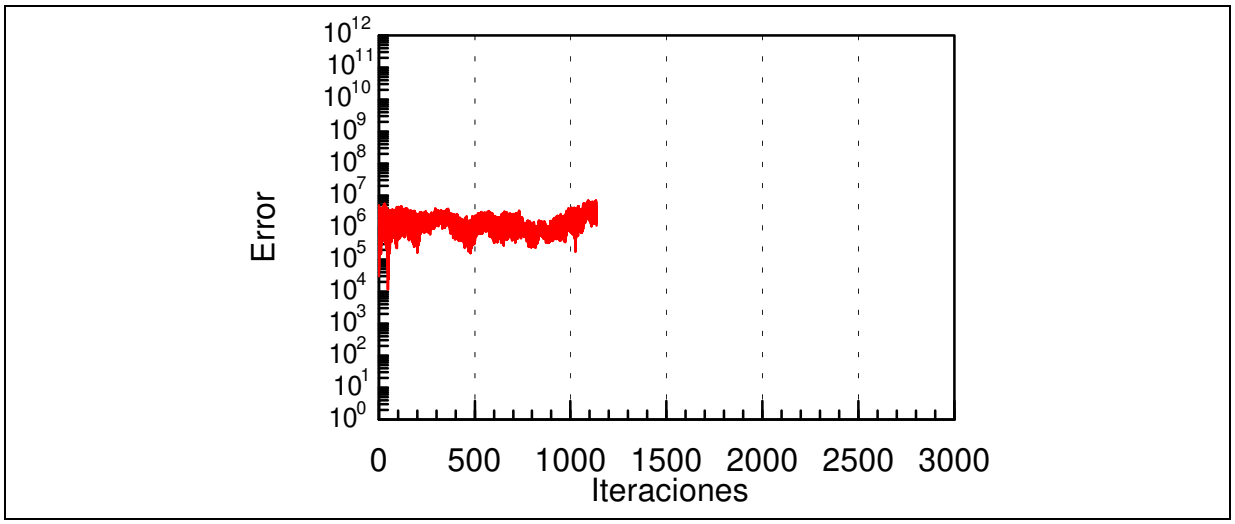


Figura 21. Convergencia tras relanzamiento del sistema por cambio de pendiente.

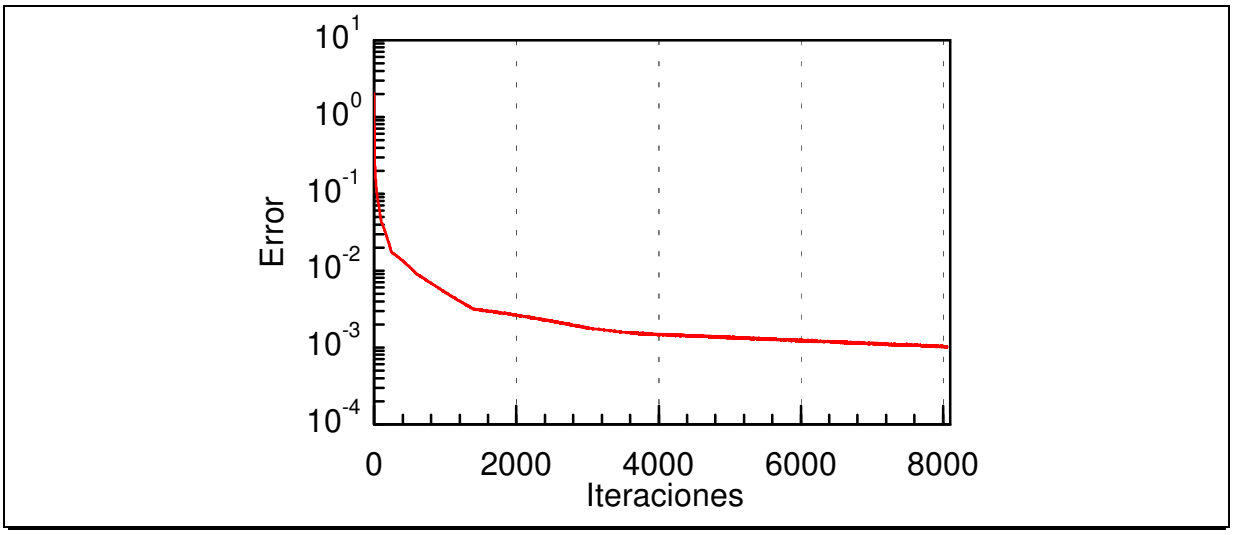


Figura 22. Convergencia para el caso de Df 2,75 en el caso del método S.O.R.

6 Conclusiones

Se ha conseguido resolver un problema de flujo de aguas subterráneas sobre medios muy heterogéneos, como son los fractales, estudiándose para ello las posibilidades de dos métodos iterativos, y delimitando los factores que influyen en ellos: Factor de relajación óptimo en el caso de S.O.R., y condicionamiento de la matriz del sistema en el G.C.

Si bien para medios pequeños, en número de bloques de heterogeneidad, resulta mucho más rápido el método G.C., se puede ver en las figuras 15, 16 y 18 que conforme aumenta la dimensión fractal, esto es la heterogeneidad, sobre medios relativamente grandes, es imposible resolver el sistema de ecuaciones planteado con un método convencional de GC y precondicionamineto diagonal. Este fenómeno se podría deber al aumento del condicionamiento de la matriz del sistema con la dimensión fractal (figura 13). Debido a esto parece aconsejable usar una técnica iterativa clásica para resolver estos problemas, que no se ve tan afectada por la dimensión fractal como lo hacen las basadas en métodos de optimización según el gradiente de la función objetivo.

7 Lineas futuras

Este trabajo se enmarca en uno más ambicioso que trata de estudiar la influencia del medio heterogéneo en la simulación del flujo de aguas subterráneas y el transporte de solutos por esta. Por ello, trabajando en la misma linea, se ha de seguir ensayando con otras técnicas basadas en el Gradiente Conjugado, como otros tipos de condicionamientos, o bien técnicas como el Gradiente Conjugado de Mínimo Residuo. De esta forma se pretende solucionar de forma más eficiente el problema de flujo, para resolver posteriormente el de transporte de solutos desacoplado con el de flujo.

Asimismo, se puede seguir investigando con técnicas clásicas como el S.O.R, y más concretamente en encontrar los valores del factor de relajación óptimo de una forma más rápida y menos costosa computacionalmente que las descritas en este trabajo.

8 Agradecimientos

Agradecemos a **Enresa** el apoyo recibido para la realización de este trabajo, que se engloba dentro del Proyecto de Colaboración nº 700443, **Modelización de fenómenos que tengan lugar en la Geosfera.**

9 Referencias

[1]Borregón J.L. (1994) ***Metodos de generación estocástica de medios geológicos heterogéneos***. Proyecto Fin de Carrera. E.T.S. Minas de Madrid.(U.P.M.)

[2]Fournier, A. ; Fussell, D.; Carpenter, C. Computer rendering of stochastic models. Communications of the ACM 25 (6).

[3]Golub Van Loan (1983) ***Matrix Computation***. The Tohns Hopkins.

[4] Isaaks, E. H.: Srivastrava R. M. (1989) ***An introduction to applied geostatistics***.Oxford University Press N.Y.

[5] Journel, A.; Huigbregts, Ch. J. ***Mining geostatistics***. Academic Press. Londres.

[6]Paredes, C. (1995) ***Aplicación de la geometría fractal en las Ciencias de la Tierra***. Tesis Doctoral. E.T.S. Minas de Madrid.(U.P.M.)

[7]Peitgen, H.; Richter P. (1986) ***The beauty of fractals. Images of complex dynamical systems***. Spinger Verlag. New York.

[8]Press, W.H. et al (1993) ***Numerical Recipes. The art of scientific Computing (Fortran version)***. Cambridge University Press. Cambridge.

[9]Quarteroni Valli (1991) ***Numerical aproximation of partial differential equations***. Springer Series in Computational Mathematics.

[10]Simó J.A. (1995) ***Estudio de los efectos de la heterogeneidad sobre la modelización del flujo y del transporte en aguas subterráneas.*** Proyecto Fin de Carrera. E.T.S. Minas de Madrid.(U.P.M.)

[11]Young, D.M. (1971) ***Iterative Solution of Large Lineal System***. Academic Press N.Y.