

Una formulación general y eficiente de las fracturas en el MEF: I. Aspectos teóricos

Ruben Juanes y Javier Samper

Grupo de Hidrología Subterránea
ETS de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad de La Coruña
Campus de Elviña, 15192 La Coruña, España
Tel.: 34-981-167 000, Fax: 34-981-167 170
e-mail: juanes@ce.berkeley.edu
e-mail: samper@iccp.udc.es

Resumen

El desarrollo de modelos numéricos ha permitido abordar la resolución de problemas progresivamente más complejos en muchos campos de la ingeniería. En Hidrología Subterránea se hace cada vez más necesaria la aplicación de modelos tridimensionales que tengan en cuenta la existencia de heterogeneidades y vías preferentes de flujo en medios fracturados. En esta serie de dos artículos se presenta una formulación numérica eficiente y completamente general para el tratamiento de fracturas embebidas en un medio poroso y de las condiciones de contorno en el método de elementos finitos¹. En el primero de ellos se presenta el planteamiento general del problema matemático como un problema de valores iniciales y de contorno. Se deducen las expresiones para el cálculo de las derivadas cartesianas y para la evaluación de las integrales sobre hipersuperficies m -dimensionales en espacios Euclidianos n -dimensionales. Estas expresiones, basadas en el cálculo en variedades, tienen una aplicación directa al caso de integración en contornos y fracturas ($m = 1, 2$) en medios tridimensionales ($n = 3$). Este tratamiento conduce a una formulación compacta que es aplicable a la integración numérica en líneas, superficies y volúmenes en dominios tridimensionales, evitándose de esta forma los cálculos farragosos de la formulación tradicional. El primer artículo concluye con una descripción de cómo se organizan los cálculos en un programa de elementos finitos. En el segundo artículo³⁶ se presenta la aplicación de esta formulación a una serie de casos sintéticos de transporte de solutos a través de medios porosos y fracturados que ilustran claramente el potencial, la aplicabilidad y las ventajas numéricas del tratamiento adoptado.

A GENERAL AND EFFICIENT FORMULATION FOR FRACTURES AND BOUNDARY CONDITIONS IN THE F.E.M.: I. THEORETICAL ASPECTS

Summary

Recent developments in numerical models have permitted the solution of engineering problems of increasing complexity. Three-dimensional models are required in Hydrogeology to account for heterogeneities and preferential flow in fractured media. In this series of two papers an efficient numerical formulation for the implementation of boundaries and fractures embedded in porous media by the finite element method is presented¹. In the first one the mathematical problem is formulated with generality as an initial value and boundary value problem. The expressions for the computation of cartesian derivatives and integrals over m -dimensional surfaces within n -dimensional Euclidean spaces are derived. These expressions are based on manifold calculus and can be directly applied to the integration along boundaries and fractures ($m = 1, 2$) in three dimensional media ($n = 3$). The first paper concludes with a description of how the computations are organized in a finite element program. The second paper³⁶ includes several synthetic cases of solute transport through porous and fractured media, which show the potential and the numerical performance of the formulation presented here.

INTRODUCCIÓN

Elaboración de un modelo numérico

Los pasos necesarios para la elaboración de un modelo numérico son los que se expresan en la Figura 1.

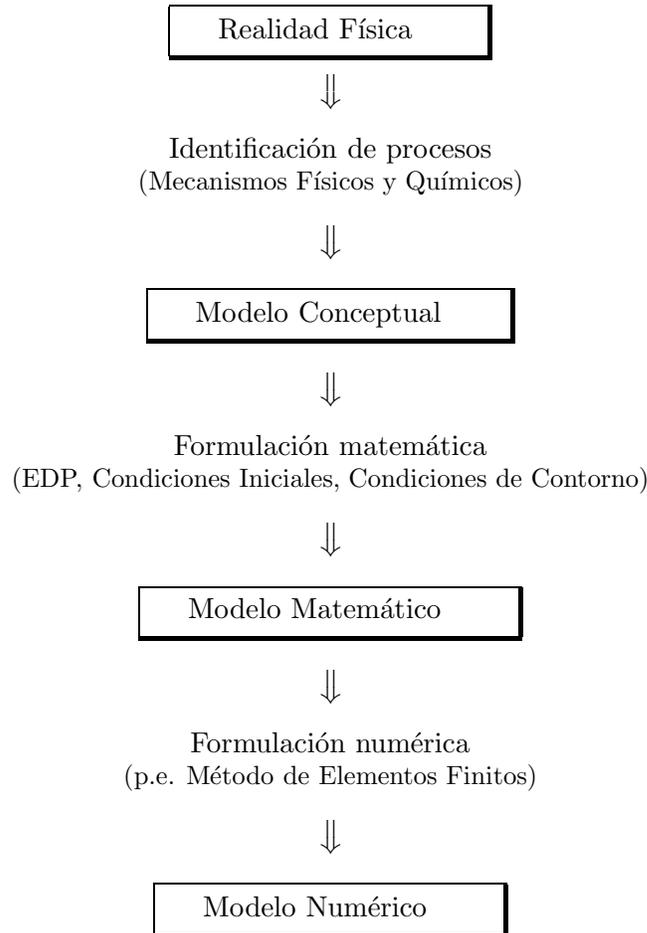


Figura 1. Obtención del modelo numérico (modificado de la referencia²)

En la modelización hidrogeológica y, en particular, en la relacionada con la simulación y predicción del comportamiento de un almacenamiento geológico profundo para residuos radiactivos, se ha hecho necesaria una representación cada vez más precisa del medio geológico³⁻⁶, lo cual requiere el desarrollo de modelos numéricos tridimensionales que permitan incorporar fracturas embebidas en el medio poroso.

Modelos conceptuales para medios fracturados

El problema del flujo y transporte de solutos en medios fracturados es hoy en día “un problema de interés, tanto desde el punto de vista teórico como de su aplicación práctica”⁷.

Hasta hace unos años, todavía no había consenso entre los investigadores respecto al mejor enfoque del problema⁸. Los modelos conceptuales de medios fracturados pueden clasificarse en los siguientes tipos:

- 1) *Modelo de medio continuo equivalente.* En este modelo el medio fracturado se trata como un medio poroso equivalente. Su empleo se justifica en términos estadísticos y, ante la incertidumbre acerca de la geometría y los parámetros del medio fracturado, se intenta sustituir éste por un medio poroso cuyos parámetros promedien la situación real a gran escala. No es posible representar zonas fracturadas de extensión regional.
- 2) *Modelo de doble porosidad.* Permite trabajar con sistemas compuestos por dos o más materiales, caracterizados por sus propios parámetros hidrodinámicos y de transporte. Existen distintas formulaciones para la evaluación del intercambio de soluto entre la fractura y la matriz porosa^{9–13}.
- 3) *Modelo de fracturas embebidas en el medio poroso.* Resuelve las ecuaciones de flujo y transporte simultáneamente en el medio poroso y en las fracturas. La mayor dificultad radica en la correcta localización de las fracturas. Estos modelos superan las limitaciones de los modelos de medio continuo equivalente y suelen emplearse para grandes fracturas y fallas. Aunque existen implementaciones desde los años setenta^{14–19}, estos modelos se han desarrollado –fundamentalmente para el problema de flujo– durante la última década^{20–27}.
- 4) *Modelo de fracturas individuales.* Este modelo intenta describir el medio fracturado a partir de cada una de sus fracturas, lo cual presenta dos problemas: la definición geométrica de las fracturas y la solución numérica de las ecuaciones de flujo y transporte a lo largo de dichas fracturas. Respecto a este último problema, la ley cúbica suele dar buenos resultados para el flujo, pero no para el transporte⁸.
- 5) *Modelo de redes de canales.* En este tipo de modelos hay dos enfoques: fracturas como canales independientes o formando una red entrelazada. La desventaja principal es que no permiten una representación tridimensional de la variable de estudio.

Tratamiento adoptado para los medios fracturados

Se ha optado por un modelo mixto de fracturas discretas embebidas en el medio poroso. Este es el modelo adoptado por Kiraly²⁵ y posteriormente generalizado por Perrochet²⁶. Este tratamiento es el más adecuado para la modelización de fracturas bien definidas y es válido tanto para problemas de hidrogeología como otros problemas en los que puedan aparecer discontinuidades en el medio de estudio, como pueden ser la mecánica de suelos –elasticidad y elastoplasticidad– y la mecánica de fracturas. Estos modelos están recibiendo una atención creciente⁸ y no existen problemas conceptuales para su aplicación a problemas complejos con procesos acoplados.

Aunque algunos de estos modelos consideran la existencia de elementos de menor dimensionalidad (1D y 2D) que la del dominio (2D y 3D), suelen carecer de una formulación compacta para la integración numérica en líneas, superficies y volúmenes en dominios tridimensionales. En este trabajo se presenta una formulación general que soslaya los cálculos farragosos de las formulaciones tradicionales. Para ello se comienza presentando la formulación matemática del problema. A continuación se revisan y detallan las principales propiedades de las superficies generalizadas. La dificultad para la evaluación de las integrales de superficies m -dimensionales en espacios n -dimensionales ($m \leq n$) se resuelve mediante una relación –que se demuestra por inducción– que relaciona el diferencial de superficie generalizada dS_m con los diferenciales de las coordenadas locales $d\xi_i$ ($i = 1, \dots, m$). Dicha relación es completamente general. El artículo concluye con una síntesis del proceso de cálculo de las distintas matrices elementales que resultan del método de elementos finitos. La aplicación de la formulación propuesta a casos sintéticos se presenta en el segundo artículo de esta serie.

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA MATEMÁTICO

El problema matemático es un problema de valores iniciales y de contorno que, de un modo general, puede definirse mediante la ecuación

$$\mathcal{L}(u) = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (1)$$

junto con las condiciones de contorno

$$\mathcal{B}(u) = 0 \quad \text{en } \Gamma \quad (2)$$

y la condición inicial

$$u|_{t=0} = u_0 \quad \text{en } \Omega \quad (3)$$

Los operadores $\mathcal{L}(\cdot)$ y $\mathcal{B}(\cdot)$ correspondientes al flujo subterráneo, el transporte de solutos y el transporte de calor se recogen en la Tabla I. Los distintos términos se describen en el Apéndice 1.

Proceso	$\mathcal{L}(\cdot)$	$\mathcal{B}(\cdot)$
Flujo subterráneo	$\mathcal{L}(h) = \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla h) + r - S_s \frac{\partial h}{\partial t}$	$\mathcal{B}_c(h) = (\mathbf{K} \nabla h) \cdot \mathbf{n} - \alpha(h^* - h) - Q^*$ $\mathcal{B}_d(h) = h - h^*$
Transporte de solutos	$\mathcal{L}(c) = \nabla \cdot (\phi \mathbf{D} \nabla c) - \mathbf{q} \cdot \nabla c + r(c^* - c) - \lambda \phi R c - \phi R \frac{\partial c}{\partial t}$	$\mathcal{B}_c(c) = (-\phi \mathbf{D} \nabla c) \cdot \mathbf{n} - \beta(c^* - c) - F^*$ $\mathcal{B}_d(c) = c - c^*$
Transporte de calor	$\mathcal{L}(T) = \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{k}}{\rho_w c_w} \nabla T \right) - \mathbf{q} \cdot \nabla T + r(T^* - T) - \frac{\rho_m c_m}{\rho_w c_w} \frac{\partial T}{\partial t}$	$\mathcal{B}_c(T) = \left(-\frac{\mathbf{k}}{\rho_w c_w} \nabla T \right) \cdot \mathbf{n} - \gamma(T^* - T) - J^*$ $\mathcal{B}_d(T) = T - T^*$

Tabla I. Operadores diferenciales que definen el problema matemático del flujo subterráneo y el transporte de solutos y de calor. Se incluyen los operadores de contorno de tipo Cauchy (mixto) $\mathcal{B}_c(\cdot)$ y Dirichlet $\mathcal{B}_d(\cdot)$

En problemas reales no es viable obtener la solución exacta u del problema. En su lugar se busca una solución aproximada \hat{u} , de la forma

$$\hat{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \hat{u}_i(t) N_i(\mathbf{x}) \quad (4)$$

donde $\hat{u}_i(t)$ es la solución aproximada en el nudo i , $N_i(\mathbf{x})$ son las funciones de forma o funciones de prueba, y N es el número de nudos del dominio. Introduciendo la solución aproximada \hat{u} en las ecuaciones (1) y (2), se obtiene

$$\mathcal{L}(\hat{u}) = \varepsilon_L \neq 0 \quad (5a)$$

$$\mathcal{B}(\hat{u}) = \varepsilon_B \neq 0 \quad (5b)$$

donde ε_L y ε_B son los residuos. El fundamento del método de los Residuos Ponderados consiste en minimizar estos residuos según un determinado criterio. El criterio de minimización consiste en imponer que sean nulos los siguientes productos escalares:

$$\langle \varepsilon_{\mathcal{L}}(\mathbf{x}, t), \omega_j(\mathbf{x}) \rangle \Big|_{\Omega} = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (6a)$$

$$\langle \varepsilon_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}, t), \bar{\omega}_j(\mathbf{x}) \rangle \Big|_{\Gamma} = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (6b)$$

o lo que es lo mismo

$$\int_{\Omega} \varepsilon_{\mathcal{L}}(\mathbf{x}, t) \omega_j(\mathbf{x}) d\Omega = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (7a)$$

$$\int_{\Gamma} \varepsilon_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}, t) \bar{\omega}_j(\mathbf{x}) d\Gamma = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (7b)$$

donde $\omega_j(\mathbf{x})$ y $\bar{\omega}_j(\mathbf{x})$ son funciones de ponderación o de test. Para que se verifiquen simultáneamente la ecuación en derivadas parciales y las condiciones de contorno, el problema inicial se reescribe en términos de *residuos ponderados*²⁸

$$\int_{\Omega} \mathcal{L}(\hat{u}) \omega_j d\Omega + \int_{\Gamma} \mathcal{B}(\hat{u}) \bar{\omega}_j d\Gamma = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (8)$$

Efectuando una integración por partes se llega a una expresión del tipo

$$\int_{\Omega} \mathcal{M}(\omega_j) \mathcal{N}(\hat{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathcal{P}(\bar{\omega}_j) \mathcal{Q}(\hat{u}) d\Gamma = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (9)$$

que se denomina *forma débil* de la ecuación original. Expresado de este modo, el problema es equivalente al original, pero presenta las siguientes ventajas²⁸:

- 1) Las derivadas que aparecen en los operadores $\mathcal{M}(\)$, $\mathcal{N}(\)$, $\mathcal{P}(\)$ y $\mathcal{Q}(\)$ son de menor orden que las que aparecen en los operadores $\mathcal{L}(\)$ y $\mathcal{B}(\)$.
- 2) Las condiciones de contorno naturales (las de tipo Neumann) se satisfacen automáticamente.

Si se emplea el Método de Elementos Finitos, es decir, si se utilizan funciones de forma *locales*, las integrales en el dominio de solución pueden calcularse como sumas de las integrales en los elementos, por lo que la Ecuación (9) se puede expresar mediante

$$\sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} \mathcal{M}(\omega_j) \mathcal{N}(\hat{u}) d\Omega_e + \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Gamma_e} \mathcal{P}(\bar{\omega}_j) \mathcal{Q}(\hat{u}) d\Gamma_e = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (10)$$

y la solución del problema se obtiene como combinación lineal de los valores nodales en cada elemento, de modo que la Ecuación (4) se reduce a

$$\hat{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_n} \hat{u}_i(t) N_i(\mathbf{x}) \quad (11)$$

donde N_e es el número de elementos en que se discretiza el dominio y N_n es el número de nudos del elemento.

SUPERFICIES EN ESPACIOS EUCLIDIANOS DE DIMENSIONES SUPERIORES

La definición de superficie generalizada –hipersuperficie– se establece de forma especialmente clara en la referencia²⁹. Sea E_n un espacio euclidiano n -dimensional referido coordenadas cartesianas $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, se dice que un conjunto S en E_n es una superficie m -dimensional si pueden encontrarse n funciones

$$\begin{aligned} f_1(\xi_1, \dots, \xi_m) \\ \dots \\ f_n(\xi_1, \dots, \xi_m) \end{aligned} \quad (12)$$

definidas en un conjunto abierto U del espacio E_m referido a las coordenadas $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_m)$ (Figura 2), y que cumplan las propiedades siguientes:

1) Las ecuaciones

$$\begin{aligned} x_1 &= f_1(\xi_1, \dots, \xi_m) \\ \dots \\ x_n &= f_n(\xi_1, \dots, \xi_m) \end{aligned} \quad (13)$$

o más compactamente

$$\mathbf{x} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}) \quad (14)$$

definen una aplicación biunívoca continua de U sobre S cuya inversa también es continua.

- 2) Las funciones $f_i(\xi_1, \dots, \xi_m)$ tienen primeras derivadas continuas en U .
3) Para cualquier punto $\boldsymbol{\xi} \in U$, y para $i = 1, \dots, m$, se define el vector en E_n

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \xi_i} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_i} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \xi_i} \end{Bmatrix} \quad (15)$$

Se requiere que los m vectores \mathbf{A}_i sean independientes, es decir, que

$$W_m = \sqrt{\Gamma(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_m)} > 0 \quad (16)$$

donde Γ es el *determinante de Gram*, definido como²⁹

$$\Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m) = \det \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 & \dots & \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_m \\ \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_2 & \dots & \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_m \cdot \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_m \cdot \mathbf{A}_2 & \dots & \mathbf{A}_m \cdot \mathbf{A}_m \end{pmatrix} = \det(\mathbf{G}_m) \quad (17)$$

siendo \mathbf{G}_m el tensor métrico covariante de la transformación (ver ecuaciones (22) y (23)).

Coordenadas locales: $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_m)$

Coordenadas globales: $\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n)$

Figura 2. Aplicación del conjunto $U \subset E_m$ sobre la superficie $S \subset E_n$

CÁLCULO DE LAS DERIVADAS CARTESIANAS

Para el cálculo de las integrales de elemento de la Ecuación (10) es necesario evaluar derivadas globales de la variable de estudio \hat{u} , lo cual requiere el cálculo de las derivadas cartesianas de las funciones de forma en un espacio Euclidiano n -dimensional E_n ,

$$\nabla \hat{u} = \nabla \left(\sum_{i=1}^{N_n} N_i \hat{u}_i \right) = \sum_{i=1}^{N_n} \hat{u}_i (\nabla N_i) \quad (18)$$

$$\nabla N_i = \frac{dN_i}{d\boldsymbol{x}} = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N_i}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_i}{\partial x_n} \end{array} \right\} \quad (19)$$

N_i son las funciones empleadas para interpolar la solución que, para elementos isoparamétricos, coinciden con las funciones de interpolación de la geometría. Las funciones de forma están expresadas siempre en términos de las coordenadas locales, es decir,

$$N_i = N_i(\boldsymbol{\xi}) = N_i(\xi_1, \dots, \xi_m) \quad (20)$$

Debe recordarse que la dimensión de la superficie de integración no tiene porqué coincidir con la dimensión del espacio (en general $m \leq n$), pues se debe integrar en *contornos* y *fracturas*.

En el Apéndice 2 se deduce la expresión del gradiente de las funciones de forma en coordenadas globales, que se expresa a continuación

$$\nabla N_i \Big|_{\boldsymbol{x} \in S} = \frac{dN_i}{d\boldsymbol{x}} \Big|_{\boldsymbol{x} \in S} = \frac{dN_i}{d\boldsymbol{\xi}} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{J}^t \Big|_{\boldsymbol{x} \in S} \quad (21)$$

donde \mathbf{J} es la matriz jacobiana de la transformación de $U \subset E_m$ a $S \subset E_n$,

$$\underbrace{\mathbf{J}}_{n \times m} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_2 & \dots & \mathbf{A}_m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_m} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial \xi_m} \end{pmatrix} \quad (22)$$

y \mathbf{G} es una matriz $m \times m$ (puede demostrarse que tiene carácter tensorial) que se calcula como

$$\mathbf{G} = \mathbf{J}^t \mathbf{J} \quad (23)$$

INTEGRACIÓN EN FRACTURAS Y CONTORNOS

Como se ha visto, en la formulación de elementos finitos surge la necesidad de evaluar un gran número de integrales en el dominio y en los contornos del problema, que se pueden obtener como suma de integrales en los elementos. Dado que la función integrando se conoce en las coordenadas locales –naturales–, es necesario expresar dichas integrales también en coordenadas locales³⁰.

En la bibliografía se recoge el caso de integración a lo largo de una trayectoria (superficie unidimensional) o de una superficie (superficie bidimensional) en un espacio Euclideo tridimensional. Para el segundo caso, sea $F(x, y, z)$ una función escalar definida en una superficie S parametrizada por una función \mathbf{f}

$$\begin{aligned} \mathbf{f}: U \subset \mathbb{R}^2 &\longrightarrow S \subset \mathbb{R}^3 \\ (\xi, \eta) &\longrightarrow \mathbf{f}(\xi, \eta) = (x(\xi, \eta), y(\xi, \eta), z(\xi, \eta)) \end{aligned} \quad (24)$$

se *define* la integral de F sobre S como^{31–32}

$$\int_S F(x, y, z) dS = \int_U F(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta), z(\xi, \eta)) \sqrt{EG - F^2} d\xi d\eta \quad (25)$$

donde E , F y G son los coeficientes de la primera forma fundamental³³. Este es un caso particular en el que el conjunto abierto $U \subset \mathbb{R}^2$ y la superficie $S \subset \mathbb{R}^3$.

Para un caso general, en las condiciones expresadas en el tercer apartado de este artículo (ecuaciones (12) a (17)), sea $U \subset E_m$ un conjunto abierto en el espacio local (coordenadas $\boldsymbol{\xi}$), sea $S \subset E_n$ una superficie en el espacio global (coordenadas \mathbf{x}), y $F(\mathbf{x}) = F(x_1, \dots, x_n)$ una función definida y continua sobre la superficie elemental $S \subset E_n$. La integral de F sobre S se *define* como

$$\int_S F(\mathbf{x}) dS = \int_U F(\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})) dS_m \quad (26)$$

La dificultad del problema reside en encontrar la relación que liga el diferencial de superficie m -dimensional dS_m en un espacio Euclidiano n -dimensional E_n y los diferenciales de las coordenadas locales $d\xi_1, \dots, d\xi_m$. Puede demostrarse que tal relación viene dada por

$$\boxed{dS_m = \sqrt{\det(\mathbf{G}_m)} d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_m} \quad (27)$$

donde \mathbf{G}_m es el tensor métrico covariante de la transformación de coordenadas $\bar{\boldsymbol{\xi}} \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbf{x}$ (ver ecuaciones (22) y (23)). Nótese que, definida de esta forma, la integral no depende de la representación paramétrica particular empleada para S ^{29–30}. Las ecuaciones (26) y (27) constituyen el núcleo de la formulación que proponemos para el tratamiento de las fracturas y de las condiciones de contorno.

El Apéndice 3 contiene la demostración completa de la Ecuación (27) para la evaluación de integrales sobre la hipersuperficie m -dimensional $S \subset E_n$. Dicha demostración se realiza por inducción, es decir, se demuestra que:

1) Para $m = 1$ (diferencial de línea), se verifica que

$$dS_1 = dl = \sqrt{\det(\mathbf{G}_1)} d\xi_1 \quad (28)$$

2) Cumpliéndose que para una superficie m -dimensional

$$dS_m = \sqrt{\det(\mathbf{G}_m)} d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_m \quad (29)$$

entonces se verifica que

$$dS_{m+1} = \sqrt{\det(\mathbf{G}_{m+1})} d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_{m+1} \quad (30)$$

La demostración de este último paso se basa en el hecho de que el diferencial de superficie $(m + 1)$ -dimensional dS_{m+1} puede obtenerse de modo general a partir de dS_m como

$$dS_{m+1} = dh dS_m \quad (31)$$

donde dh es el módulo del vector $d\mathbf{h}$, normal al hiperplano tangente a la superficie S_m en torno al punto \mathbf{x} , tal y como se explica a continuación.

Figura 3. Plano tangente a una superficie 2D en un espacio \mathbb{R}^3 , en un punto \mathbf{x} perteneciente a la superficie

Sean $d\mathbf{x}_i$, $i = 1, \dots, m$, los vectores que generan el hiperplano tangente a la superficie m -dimensional S_m en el punto $\mathbf{x} \in S_m$, donde \mathbf{x} es un vector de E_n (ver Figura 3 para $m = 2$ y $n = 3$). Los vectores $d\mathbf{x}_i$ pueden calcularse como

$$d\mathbf{x}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_i} d\xi_i = \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_i} d\xi_i = \bar{\mathbf{A}}_i d\xi_i; \quad i = 1, \dots, m \quad (32)$$

Del mismo modo

$$d\mathbf{x}_{m+1} = \bar{\mathbf{A}}_{m+1} d\xi_{m+1} \quad (33)$$

$$dV_3 = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \qquad dS_3 = dV = dh dS_2$$

Figura 4. Construcción del diferencial de superficie generalizada dS_{m+1} para $m = 2$ y $n = 3$

Se descompone $d\mathbf{x}_{m+1}$ en sus componentes tangencial $d\mathbf{t}$ y normal $d\mathbf{h}$ (ver Figura 4 para $m = 2$ y $n = 3$)

$$d\mathbf{x}_{m+1} = d\mathbf{t} + d\mathbf{h} \quad (34)$$

La componente tangencial puede expresarse como combinación lineal de $d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_m$ ya que $d\mathbf{t}$ pertenece al hiperplano tangente a la superficie, por lo que

$$d\mathbf{t} = \lambda_1 d\mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_m d\mathbf{x}_m \quad (35)$$

$$d\mathbf{h} = d\mathbf{x}_{m+1} - d\mathbf{t} = \bar{\mathbf{A}}_{m+1} d\xi_{m+1} - \sum_{i=1}^m \lambda_i d\mathbf{x}_i \quad (36)$$

Calculando el módulo de $d\mathbf{h}$ como

$$(dh)^2 = d\mathbf{h} \cdot d\mathbf{h} \quad (37)$$

y haciendo uso de la condición de que $d\mathbf{h}$ es normal al hiperplano $d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_m$, es decir

$$d\mathbf{h} \cdot d\mathbf{x}_i = 0 \quad (38)$$

se obtiene la siguiente expresión para dS_{m+1}

$$(dS_{m+1})^2 = \left(\mathbf{A}_{m+1} d\xi_{m+1} \cdot \mathbf{A}_{m+1} d\xi_{m+1} - \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{m+1} d\xi_{m+1} \right) \cdot \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m) (d\xi_1)^2 \dots (d\xi_m)^2 \quad (39)$$

Tras una serie de operaciones en las que se hace uso de propiedades de los determinantes (Apéndice 3) se llega a

$$(dS_{m+1})^2 = \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_{m+1}) (d\xi_1)^2 \dots (d\xi_{m+1})^2 \quad (40)$$

o la expresión equivalente

$$dS_{m+1} = \sqrt{\det(\mathbf{G}_{m+1})} d\xi_1 \dots d\xi_{m+1} \quad (41)$$

$$1D: dV = A_t dS_1 = A_t d\ell$$

$$2D: dV = e dS_2 = e dS$$

Figura 5. Diferencial de volumen en fracturas 1D y 2D en un espacio 3-D a partir del diferencial de superficie generalizada

El cálculo del diferencial de volumen en fracturas –elementos de menor dimensionalidad que el espacio– es inmediato a partir del diferencial de superficie generalizada. Para elementos unidimensionales basta con multiplicar por el área transversal asociada al elemento y en elementos bidimensionales por el espesor de la fractura (Figura 5).

FORMULACIÓN DEL MEF. ORGANIZACIÓN DE LOS CÁLCULOS

En este apartado se describe el proceso de cálculo de todas las matrices elementales. Se emplea la notación habitual de elementos finitos para medios continuos y estructuras^{28,34–35} y se aplica, para mayor claridad, a una de las matrices de elemento que se debe evaluar: la correspondiente al término difusivo de la ecuación de flujo. Con la formulación de Galerkin, esta integral en el dominio del elemento Ω_e toma la expresión

$$A_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{K} \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega \quad (42)$$

donde los subíndices i, j se refieren a las componentes de la matriz. Se define el vector \mathbf{N} como el vector de funciones de forma igual a

$$\mathbf{N} = \begin{Bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ \vdots \\ N_{N_n} \end{Bmatrix} \quad (43)$$

donde las N_i son las funciones de forma de los nudos del elemento, y N_n es el número de nudos de dicho elemento. En forma matricial la matriz de elemento de la Ecuación (42) se puede escribir como

$$\underbrace{\mathbf{A}^e}_{N_n \times N_n} = \int_{\Omega_e} \underbrace{\nabla \mathbf{N}}_{N_n \times n} \cdot \underbrace{\mathbf{K}}_{n \times n} \cdot \underbrace{\nabla \mathbf{N}^t}_{n \times N_n} d\Omega \quad (44)$$

donde n es la dimensionalidad del problema (1, 2 ó 3) y $\nabla \mathbf{N}$ es la matriz gradiente de funciones de forma –Ecuación (A2.1). Esta integral no se puede calcular, en general, de

forma analítica y se debe recurrir por tanto a la integración numérica. A continuación se muestran ordenadamente los pasos para la evaluación de la integral (44) en un código de elementos finitos³⁴.

do $e = 1, N_e$ (*bucle sobre los elementos*)

- *Actualizar coordenadas nodales (ELCOD)*

$$\underbrace{\mathbf{X}}_{N_n \times n} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{N_n,1} & \cdots & x_{N_n,n} \end{pmatrix} \quad (45)$$

do $g = 1, N_g$ (*bucle sobre los puntos de Gauss*)

- *Actualizar puntos de Gauss (POSGE)*

$$\underbrace{\boldsymbol{\xi}_g}_{N_g} = (\xi_1, \dots, \xi_m)_g \quad (46)$$

- *Actualizar pesos de Gauss (WEIGE)*

$$\omega_g$$

- *Evaluar funciones de forma (SHAPE)*

$$\underbrace{\mathbf{N}_g}_{N_n} = \begin{Bmatrix} N_1(\boldsymbol{\xi}_g) \\ \vdots \\ N_{N_n}(\boldsymbol{\xi}_g) \end{Bmatrix} \quad (47)$$

- *Evaluar derivadas naturales de las funciones de forma (DERIE)*

$$\underbrace{\mathbf{E}_g}_{N_n \times m} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial \xi_1} & \cdots & \frac{\partial N_1}{\partial \xi_m} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial N_{N_n}}{\partial \xi_1} & \cdots & \frac{\partial N_{N_n}}{\partial \xi_m} \end{pmatrix}_g \quad (48)$$

- *Cálculo de la matriz jacobiana (XJACM)*

$$\underbrace{\mathbf{J}_g}_{n \times m} = \underbrace{\mathbf{X}^t}_{n \times N_n} \underbrace{\mathbf{E}_g}_{N_n \times m} \quad (49)$$

- *Cálculo del tensor métrico covariante (XJACE)*

$$\underbrace{\mathbf{G}_g}_{m \times m} = \underbrace{\mathbf{J}_g^t}_{m \times n} \underbrace{\mathbf{J}_g}_{n \times m} \quad (50)$$

- *Evaluar derivadas cartesianas de las funciones de forma (CARTD)*

$$\underbrace{\mathbf{B}_g}_{N_n \times n} = \nabla \mathbf{N}_g = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial N_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial N_{N_n}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial N_{N_n}}{\partial x_n} \end{pmatrix}_g = \underbrace{\mathbf{E}_g}_{N_n \times m} \underbrace{\mathbf{G}_g^{-1}}_{m \times m} \underbrace{\mathbf{J}_g^t}_{m \times n} \quad (51)$$

- *Cálculo de la matriz constitutiva* (DMATX)

$$\underbrace{\mathbf{D}_g}_{n \times n} = \mathbf{K}$$

- *Cálculo del diferencial de volumen* (DVOLU)

$$d\mathcal{V}_g = b \sqrt{\det(\mathbf{G})_g} \omega_g, \quad b = \begin{cases} \text{Área} & \text{si el elemento es 1D} \\ \text{Espesor} & \text{si el elemento es 2D} \\ 1 & \text{si el elemento es 3D} \end{cases} \quad (52)$$

enddo g (fin del bucle sobre los puntos de Gauss)

- *Cálculo de la integral numérica de la Ecuación (44)* (AMATF)

$$\underbrace{\mathbf{A}^e}_{N_n \times N_n} = \sum_{g=1}^{N_g} \underbrace{\mathbf{B}_g}_{N_n \times n} \underbrace{\mathbf{D}_g}_{n \times n} \underbrace{\mathbf{B}_g^t}_{n \times N_n} d\mathcal{V}_g \quad (53)$$

enddo e (fin del bucle sobre los elementos)

CONCLUSIONES

En el primero de los dos artículos de esta serie se ha presentado una formulación compacta de las fracturas embebidas en un medio continuo y de las condiciones de contorno del dominio, para su implementación eficiente en programas de elementos finitos. La formulación adoptada se justifica desde un punto de vista matemático con toda generalidad (cálculo en variedades en espacios Euclidianos n -dimensionales) y se aplica posteriormente para la evaluación numérica de las integrales en elementos uni y bidimensionales dentro de un espacio tridimensional. Además de su generalidad matemática, esta formulación es válida para elementos de cualquier dimensión, lo cual evita tener que recurrir a cálculos específicos para cada tipo de elemento 1D, 2D y 3D, que en general son más farragosos. Este tratamiento matemático se ha implementado en un potente código para la modelización de flujo de agua y transporte de solutos y calor en medios porosos y fracturados (TRANMEF-3)¹. En el segundo artículo de esta serie se presenta la descripción del código y su aplicación a varios ejemplos de flujo de agua y transporte de solutos a través de medios fracturados³⁶.

APÉNDICE 1

En este apéndice se recogen los términos empleados en la Tabla I de este artículo, referentes a los problemas de flujo subterráneo, transporte de solutos y transporte de calor.

FLUJO SUBTERRÁNEO

h	Nivel piezométrico [L]
t	Tiempo [T]
\mathbf{K}	Tensor de conductividad hidráulica [$L T^{-1}$]
r	Recarga volumétrica [T^{-1}]
S_s	Coefficiente de almacenamiento específico [L^{-1}]
\mathbf{n}	Vector unitario normal normal saliente [<i>ad.</i>]
α	Coefficiente de goteo [T^{-1}]
h^*	Nivel piezométrico externo en el contorno [L]
Q^*	Caudal en el contorno [$L T^{-1}$]

TRANSPORTE DE SOLUTOS

c	Concentración [ML^{-3}]
ϕ	Porosidad [<i>ad.</i>]
\mathbf{D}	Tensor de dispersión efectiva del medio [$L^2 T^{-1}$]
\mathbf{q}	Vector velocidad de Darcy [LT^{-1}]
λ	Coefficiente de desintegración radiactiva [T^{-1}]
R	Coefficiente de retardo [<i>ad.</i>]
β	Coefficiente de transferencia de soluto [LT^{-1}]
c^*	Concentración externa en el contorno [ML^{-3}]
F^*	Flujo dispersivo de soluto impuesto en el contorno [$ML^{-2} T^{-1}$]

TRANSPORTE DE CALOR

T	Temperatura [Θ]
κ	Tensor de conductividad térmica efectiva del medio [$MLT^{-3} \Theta^{-1}$]
ρ_w	Densidad del agua [ML^{-3}]
ρ_m	Densidad del medio [ML^{-3}]
c_w	Calor específico del agua [$L^2 T^{-2} \Theta^{-1}$]
c_m	Calor específico del medio [$L^2 T^{-2} \Theta^{-1}$]
γ	Coefficiente de transferencia térmica [LT^{-1}]
T^*	Temperatura externa en el contorno [Θ]
J^*	Flujo térmico impuesto en el contorno [$LT^{-1} \Theta$]

APÉNDICE 2

Se deduce a continuación la expresión de las derivadas cartesianas de las funciones de forma

$$\underbrace{\nabla \mathbf{N}}_{N_n \times n} = \frac{d\mathbf{N}}{d\mathbf{x}} = \left\{ \begin{array}{c} (\nabla N_1)^t \\ \vdots \\ (\nabla N_{N_n})^t \end{array} \right\} = \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial N_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial N_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial N_{N_n}}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial N_{N_n}}{\partial x_n} \end{array} \right) \quad (A2.1)$$

Por definición, la variación de las funciones de forma a lo largo del conjunto $U \subset E_m$ viene dada por

$$\underbrace{d\mathbf{N}}_{N_n} = \frac{d\mathbf{N}}{d\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi} = \left\{ \begin{array}{c} \frac{dN_1}{d\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi} \\ \vdots \\ \frac{dN_{N_n}}{d\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi} \end{array} \right\} = \underbrace{\left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial N_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial N_1}{\partial \xi_m} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial N_{N_n}}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial N_{N_n}}{\partial \xi_m} \end{array} \right)}_{\mathbf{E} \quad (N_n \times m)} \left\{ \begin{array}{c} d\xi_1 \\ \vdots \\ d\xi_m \end{array} \right\} \quad (A2.2)$$

Además, si $d\mathbf{x}$ está contenido en $S \subset E_n$ y dado que $\mathbf{x} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})$, se verifica que

$$\underbrace{d\mathbf{x}}_n = \frac{d\mathbf{x}}{d\xi} d\xi = \frac{d\mathbf{f}(\xi)}{d\xi} d\xi = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_m} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial \xi_m} \end{pmatrix}}_{\mathbf{J} \quad (n \times m)} \begin{Bmatrix} d\xi_1 \\ \vdots \\ d\xi_m \end{Bmatrix} \quad (\text{A2.3})$$

Las anteriores ecuaciones (A2.1), (A2.2) y (A2.3) se pueden reescribir de forma compacta como

$$\nabla \mathbf{N} = \frac{d\mathbf{N}}{d\mathbf{x}} \quad (\text{A2.4})$$

$$d\mathbf{N} = \mathbf{E} d\xi \quad (\text{A2.5})$$

$$d\mathbf{x} = \mathbf{J} d\xi \quad (\text{A2.6})$$

Premultiplicando la ecuación (A2.6) por \mathbf{J}^t se tiene

$$\mathbf{J}^t d\mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{J}^t \mathbf{J}}_{\mathbf{G}} d\xi \quad (\text{A2.7})$$

Despejando $d\xi$ de la ecuación anterior y sustituyendo en (A2.5) se obtiene

$$d\mathbf{N} = \mathbf{E} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{J}^t d\mathbf{x} \quad (\text{A2.8})$$

Sustituyendo (A2.8) en (A2.4) se obtiene finalmente la expresión de las derivadas cartesianas de las funciones de forma

$$\nabla \mathbf{N} \Big|_{\mathbf{x} \in S} = \mathbf{E} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{J}^t \Big|_{\mathbf{x} \in S} \quad (\text{A2.9})$$

APÉNDICE 3

Este apéndice contiene la demostración de la Ecuación (27) para la integración de funciones sobre superficies, que se define en la Ecuación (26). Se trata de justificar que en un espacio Euclidiano n -dimensional E_n , el diferencial de superficie generalizada (hipersuperficie m -dimensional) viene dado por

$$dS_m = W_m d\xi_1 \dots d\xi_m \quad (\text{A3.1})$$

para $m \leq n$ donde W_m se define en las ecuaciones (16) y (17) como

$$W_m = \sqrt{\det(\mathbf{G}_m)} = \sqrt{\Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m)} \quad (\text{A3.2})$$

La demostración se realiza por inducción, es decir, se prueba que

- 1) $dS_1 = W_1 d\xi_1$,
- 2) dado que se cumple que $dS_k = W_k d\xi_1 \dots d\xi_k$, entonces

$$dS_{k+1} = W_{k+1} d\xi_1 \dots d\xi_{k+1}$$

Diferencial de línea dS_1

El diferencial de línea $d\ell$ de una curva $\mathbf{x} = \mathbf{f}(\xi_1)$ en un espacio n -dimensional puede calcularse según la siguiente expresión

$$(dS_1)^2 = (d\ell)^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} \quad (\text{A3.3})$$

Desarrollando $d\mathbf{x}$ en función de la coordenada natural ξ_1

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_1} d\xi_1 = \frac{\partial \mathbf{f}(\xi_1)}{\partial \xi_1} d\xi_1 = \mathbf{A}_1 d\xi_1 \quad (\text{A3.4})$$

y sustituyendo (A3.4) en (A3.3), se obtiene[†]

$$(dS_1)^2 = (\mathbf{A}_1 d\xi_1) \cdot (\mathbf{A}_1 d\xi_1) = \Gamma(\mathbf{A}_1 d\xi_1) = \Gamma(\mathbf{A}_1) (d\xi_1)^2 \quad (\text{A3.5})$$

por lo que se verifica que

$$dS_1 = W_1 d\xi_1 \quad (\text{A3.6})$$

[†] En este apéndice se utiliza de forma sistemática la relación

$$\Gamma(\mathbf{A}_1 d\xi_1, \dots, \mathbf{A}_k d\xi_k) = \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k) (d\xi_1)^2 \dots (d\xi_k)^2$$

Esta igualdad puede demostrarse con facilidad sin más que expresar

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \dots & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \dots & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k \end{pmatrix}}_{\Gamma(\mathbf{A}_1 d\xi_1, \dots, \mathbf{A}_k d\xi_k)} = \begin{pmatrix} d\xi_1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & d\xi_k \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_1 & \dots & \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_k \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{A}_1 & \dots & \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{A}_k \end{pmatrix}}_{\Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k)} \begin{pmatrix} d\xi_1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & d\xi_k \end{pmatrix}$$

y emplear la propiedad de los determinantes³¹

$$\det(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \det(\mathbf{A}) \cdot \det(\mathbf{B})$$

Diferencial de superficie (k+1)-dimensional dS_{k+1}

Se supone que, efectivamente, el diferencial de superficie k -dimensional en un espacio Euclidiano n -dimensional E_n puede evaluarse como

$$dS_k = W_k d\xi_1 \dots d\xi_k \quad (A3.7)$$

es decir,

$$(dS_k)^2 = \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k)(d\xi_1)^2 \dots (d\xi_k)^2 \quad (A3.8)$$

El fundamento de la demostración reside en que el diferencial de superficie $(k+1)$ -dimensional dS_{k+1} puede calcularse de un modo general a partir de dS_k como

$$dS_{k+1} = dh dS_k \quad (A3.9)$$

donde dh es el módulo de $d\mathbf{h}$, que es la componente de $d\mathbf{x}_{k+1}$ —Ecuación (33)— normal al hiperplano formado por $d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_k$. Si se descompone $d\mathbf{x}_{k+1}$ en sus componentes tangencial $d\mathbf{t}$ y normal $d\mathbf{h}$, se tiene

$$d\mathbf{t} = \lambda_1 d\mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_k d\mathbf{x}_k \quad (A3.10)$$

$$d\mathbf{h} = d\mathbf{x}_{k+1} - d\mathbf{t} = \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i d\mathbf{x}_i \quad (A3.11)$$

Por ser $d\mathbf{h}$ normal al hiperplano $d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_k$ se verifica que

$$d\mathbf{h} \cdot d\mathbf{x}_i = d\mathbf{h} \cdot \mathbf{A}_i d\xi_i = 0, \quad i = 1, \dots, k \quad (A3.12)$$

Desarrollando dh y utilizando las ecuaciones (A3.11) y (A3.12), se tiene que

$$(dh)^2 = d\mathbf{h} \cdot d\mathbf{h} = \left(\mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \right) \cdot d\mathbf{h} \quad (A3.13a)$$

$$= \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot d\mathbf{h} - \underbrace{\sum_{i=1}^k \lambda_i d\mathbf{h} \cdot \mathbf{A}_i d\xi_i}_0 \quad (A3.13b)$$

$$= \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \quad (A3.13c)$$

Sustituyendo las ecuaciones (A3.8) y (A3.13c) en la ecuación (A3.9) se obtiene una expresión para dS_{k+1}

$$(dS_{k+1})^2 = \left(\mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \right) \cdot \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k)(d\xi_1)^2 \dots (d\xi_k)^2 \quad (A3.14)$$

Únicamente resta por demostrar que la expresión anterior es equivalente a

$$(dS_{k+1})^2 = \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_{k+1})(d\xi_1)^2 \dots (d\xi_{k+1})^2 \quad (A3.15)$$

Desarrollando (A3.15) se tiene que

$$\begin{aligned} & \Gamma(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_{k+1}) (d\xi_1)^2 \dots (d\xi_{k+1})^2 = \Gamma(\mathbf{A}_1 d\xi_1, \dots, \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1}) \\ & = \det \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \\ \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A3.16})$$

El valor del determinante no cambia si se hacen combinaciones lineales de filas o columnas³¹. Por ello, se resta a la última columna:

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \text{ veces la primera columna} \\ & \vdots \\ & \lambda_k \text{ veces la } k\text{-ésima columna} \end{aligned}$$

De este modo el determinante se expresa como

$$\det \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k \\ \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \end{pmatrix} \quad (\text{A3.17})$$

Teniendo en cuenta la ecuación (A3.12), se puede escribir

$$\mathbf{A}_j d\xi_j \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_j d\xi_j = 0, \quad j = 1, \dots, k \quad (\text{A3.18})$$

Por lo tanto, se anulan las componentes de la columna $(k+1)$ del determinante anterior, desde la fila (1) hasta la fila (k) . Reescribiendo el determinante y desarrollándolo según la última columna, se tiene

$$\begin{aligned} & \det \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & 0 \\ \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k & \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \end{pmatrix} \\ & = \left(\mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \right) \cdot \\ & \quad \cdot \det \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_1 d\xi_1 \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_1 d\xi_1 & \cdots & \mathbf{A}_k d\xi_k \cdot \mathbf{A}_k d\xi_k \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A3.19a})$$

$$= \left(\mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} - \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{A}_i d\xi_i \cdot \mathbf{A}_{k+1} d\xi_{k+1} \right) \cdot \Gamma(\mathbf{A}_1 d\xi_1, \dots, \mathbf{A}_k d\xi_k) \quad (\text{A3.19b})$$

que es efectivamente la expresión de $(dS_{k+1})^2$ dada por la ecuación (A3.14).

Así pues, queda demostrado por inducción que

$$dS_m = W_m d\xi_1 \dots d\xi_m, \quad 1 \leq m \leq n \quad (\text{A3.20})$$

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se ha realizado en el marco de proyectos de investigación financiados por la Empresa Nacional de Residuos Radiactivos (ENRESA), dentro del Convenio Marco con la Universidad de La Coruña y la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia: Proyectos FEBEX (cód. 703231) y de Validación de Códigos (cód. 703334). El proyecto FEBEX ha sido financiado en parte por la Comisión Europea a través del Programa de Fisión Nuclear (Proyecto FI4W-CT95-0006). También se ha contado con financiación de un proyecto de investigación de la CICYT del Proyecto Nacional de Recursos Hídricos (Proyecto HID98-282). El primer autor agradece la beca de ampliación de estudios en USA concedida por la Fundación Pedro Barrié de la Maza.

REFERENCIAS

- 1 R. Juanes, "Un código para la modelización tridimensional de flujo y transporte", Proyecto Técnico, ETSI Caminos, Universidad de La Coruña, (1997).
- 2 J. Samper, "Calibración y validación de modelos de flujo y transporte de masa en acuíferos", en "Métodos numéricos en ingeniería II", Vol. I, F. Navarrina y M. Casteleiro (Eds.), La Coruña (España), SEMNI, pp. 461-470, (1993).
- 3 ENRESA, Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, S.A., "Spanish participation in the Intraval Project: To study validation of geosphere transport models for performance assessment of nuclear waste disposal", *Publicación Técnica*, N° 03/92, pp. 426, (1992).
- 4 ENRESA, Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, S.A. "The Berrocal Project: Characterization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions on the fissured granitic environment", European Commission Contract N° F12W/CT91/0080, Vol. 4, (1996).
- 5 ENRESA, Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, S.A., "FEBEX: Full scale engineered barriers experiment in crystalline host rock. Etapa preoperacional", Informe de síntesis, Pub. Tec. N° 9/97, pp. 189, (1997).
- 6 SKB, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, "Äspö Hard Rock Laboratory", Annual Report 1995, Technical Report TR 96-06, (1996).
- 7 N.Z. Sun, "Mathematical modelling of groundwater pollution", Springer-Verlag New York Inc. & Geological Publishing House, pp. 377, (1989).

- 8 J. Carrera, "Hidrogeología de rocas fracturadas poco permeables", Barcelona, Departamento de Ingeniería del Terreno, ETSICCP, UPC, (1988).
- 9 R. Bibby, "Mass transport of solutes in dual-porosity media, *Water Resour. Res.*, Vol. **17**, N° 4, pp. 1075–1081, (1981).
- 10 P.S. Huyakorn, B.H. Lester y C.R. Faust, "Finite element techniques for modeling groundwater flow in fractured aquifers", *Water Resour. Res.*, Vol. **19**, N° 4, pp. 1019–1035, (1983).
- 11 H.H. Gerke y M.T. van Genuchten, "A dual-porosity model for simulating the preferential flow of water and solutes in structured porous media", *Water Resour. Res.*, Vol. **29**, N° 2, pp. 305–319, (1993).
- 12 H.H. Gerke y M.T. van Genuchten, "Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models", *Water Resour. Res.*, Vol. **29**, N° 4, pp. 1225–1238, (1993).
- 13 A. Medina, G. Galarza y J. Carrera, "TRANSIN-II–Simulación y estimación de parámetros en flujo y transporte en medios porosos: Manual del usuario", Barcelona, Departamento de Ingeniería del Terreno, ETSICCP, UPC, pp. 118, (1993).
- 14 J.O. Duguid y P.C.Y. Lee, "Flow in fractured porous media", *Water Resour. Res.*, Vol. **13**, pp. 558–566, (1977).
- 15 K. O'Neill, "The transient three-dimensional transport of liquid and heat in fractured porous media", Tesis Doctoral, Princeton University, (1977).
- 16 G.E. Grisak y J.F. Pickett, "Solute transport through fractured media: 1. The effect of matrix diffusion", *Water Resour. Res.*, Vol. **16**, N° 4, pp. 719–730, (1980).
- 17 A. Rasmuson, T.N. Narasimhan y I. Neretnieks, "Chemical transport in a fissured rock: Verification of a numerical model", *Water Resour. Res.*, Vol. **18**, N° 5, pp. 1479–1492, (1982).
- 18 T.N. Narasimhan, "Multidimensional numerical simulation of fluid flow in fractured porous media", *Water Resour. Res.*, Vol. **18**, N° 4, pp. 1235–1247, (1982).
- 19 N.Z. Sun y W.W.-G. Yeh, "A proposed upstream weight numerical method for simulating pollutant transport", *Water Resour. Res.*, Vol. **19**, N° 6, pp. 1489–1500, (1983).
- 20 D. Germain y E.O. Frind, "Modelling contaminant migration in fracture networks: Effects of matrix diffusion", en "*Contaminant transport in groundwater*", H.E. Kobus y W. Kinzelbach (Eds.), Rotterdam, Netherlands, pp. 267–274, (1989).
- 21 T.D. Rasmussen y D.D. Evans, "Fluid flow and solute transport modelling in three-dimensional networks of variably saturated discrete fractures", Rep. NUREG/CR-5239, U.S. Nucl. Regul. Comm. Rep., Washington, D.C., (1989).
- 22 E.A. Sudicky y E. McLaren, "The Laplace transform Galerkin technique for large scale simulation of mass transport in discretely fractures porous formations", *Water Resour. Res.*, Vol. **28**, N° 2, pp. 499–514, (1992).
- 23 L. Kiraly, "FEM301–A three-dimensional model for groundwater simulation: Documentation and user's guide", Rep. NAGRA NTB 84-49, pp. 96, (1985).

- 24 F. Kirmmeier, P. Perrochet, R. Andrews y L. Kiraly, "Simulation des écoulements souterrains entre les Alpes et la Forêt Noire par modèle mathématique, Rep. NAGRA NTB 84-50, pp. 169, (1985).
- 25 L. Kiraly, "Large scale 3D groundwater flow modelling in highly heterogeneous geologic medium", en "*Groundwater flow and quality modelling*", E. Custodio *et al.* (Eds.), Dordrecht, Holland, D. Reidel Publishing Co., pp. 761-775, (1987).
- 26 P. Perrochet, "Finite hyperelements: A 4D geometrical framework using covariant bases and metric tensors", *Communications in Numer. Meth. Engng.*, Vol. **11**, N° 6, pp. 525-534, (1995).
- 27 O. Cirpka R. Helmig, "Numerical simulation of contaminant transport and biodegradation in porous and fractured-porous media", en "*Computational methods in water resources X*", Vol. 1, A. Peters *et al.* (Eds.), The Netherlands, Kluwer Academic Publishers, pp. 605-612, (1994).
- 28 O.C. Zienkiewicz y R.L. Taylor, "The finite element method: I. Basic formulation and linear problems, II. Nonlinear problems", New York, McGraw-Hill, 2 Vol., (1989).
- 29 R. Courant y F. John, "Introduction to calculus and analysis", Vol. II, John Wiley & Sons, Inc., (1978). Trad. al español en "Introducción al cálculo y al análisis matemático", Vol. II, Ed. Limusa, Mexico D.F., 4ª reimpresión, (1991).
- 30 R. Courant, "Differential and integral calculus", Vol. II, John Wiley & Sons, Inc., (1936), reimpresión en (1988).
- 31 J.E. Marsden y A.J. Tromba, "*Vector calculus*", W. H. Freeman & Co., New York, 3ª edición, (1988). Trad. al español en "Cálculo Vectorial", Addison-Wesley Iberoamericana, 3ª edición, (1991).
- 32 L.A. Cordero, M. Fernández y A. Gray, "Geometría diferencial de curvas y superficies con matemática", Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, Delaware, (1995).
- 33 D.J. Struik, "Lectures on classical differential geometry", Dover Publications, Inc., New York, 2ª edición, (1961).
- 34 E. Oñate, "*Cálculo de estructuras por el método de elementos finitos-análisis estático y lineal*", Barcelona, CIMNE, 2ª edición, (1995).
- 35 F. Navarrina, "Un método general para optimización estructural en diseño asistido por ordenador", Tesis Doctoral, Barcelona, ETSI Caminos, Universidad Politécnica de Cataluña, (1987).
- 36 R. Juanes y J. Samper, "Una formulación general y eficiente de fracturas y condiciones de contorno en el MEF: II. Aplicación a Casos Sintéticos", *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, Vol. **17**, N° 1, (2001).