

Resum

En aquest treball s'ha estudiat la possibilitat d'utilitzar algunes d'aquestes tècniques de reducció per aconseguir una simulació més eficient del flux subterrani en els aqüífer continguts en models d'ús conjunt. Així, el principal enfocament d'aquesta investigació ha estat relacionar la parametrització de les relacions riu-aqüífer amb les característiques del model reduït per trobar els efectes d'aquesta parametrització en l'eficiència de la reducció.

La primera metodologia proposada, anomenada Mètode dels Autovalors amb compressió selectiva i emmascarament modal (MAV-CSEM), pot reduir dramàticament la mida d'un model de flux subterrani, augmentant l'eficiència de la seva execució i disminuint la memòria virtual requerida. Per efectes pràctics, el MAV-CSEM utilitza els següent conceptes nous: (i) modes efectius, (ii) modes residuals, (iii) límit de participació modal, (iv) màscara d'estats efectius i (v) nivell de continuïtat. Aquest marc conceptual no només ajuden a identificar les modes que més contribueixen a la resposta de l'aqüífer per causa de les excitacions externes, sinó que també ajuden a aconseguir una simulació més ràpida del flux en l'aqüífer que obtinguda pel MAV clàssic. El principal avantatge del MAV-CSEM és que, augmentant el nombre de nodes del model, permet considerar més detalladament la variabilitat espacial dels paràmetres de l'aqüífer en la modelació del flux subterrani, augmentant l'eficiència computacional de les simulacions, especialment quan aquest aqüífer forma part del model d'un sistema d'ús conjunt. El MAV-CSEM ha estat provat en aqüífers rectangulars homogenis simples. Els resultats obtinguts tenen un comportament similar als simulats utilitzant el MAV clàssic o les diferències finites (DF), però la simulació és molt més eficient. Igualment, s'ha efectuat una anàlisi de sensibilitat de l'impacte de canviar la parametrització de les condicions de contorn tipus riu, en funció de la conductància del seu llit, sobre alguns paràmetres de control de l'aqüífer com ara piezomètriques, volums emmagatzemats i cabals parcial d'intercanvi riu-aqüífer. Dels resultats d'aquesta anàlisi s'ha trobat que, en disminuir la conductància del riu, millora el comportament del MAV-CSEM perquè menor quantitat de modes efectius és necessària per obtenir resultats fiables en les variables abans esmentades.

El marc conceptual del MAV-CSEM permet desenvolupar criteris de base física per generar modes efectius més eficientment, per remoure les modes residuals i per construir les màscares d'estats efectius que acceleren l'execució de les simulacions. Amb base a aquestes idees, s'han proposat algorismes per generar les modes efectius i configurar les màscares d'estats efectius. Aquests algorismes es basen en mètodes iteratius per resoldre problemes generalitzats de autovalors simètrics i dispersos (PGAVSD), conminándolos amb índexs de base física que permet avaluar l'efectivitat d'un mode generat i aturar la seqüència de generació modal. La detecció de les modes efectius s'ha basat en l'avaluació dels seus coeficients de repartiment, comparant-los amb el límit de participació modal impost. La parada de la generació de les modes efectius ha estat avaluada calculant els coeficients de repartiments acumulats modals, comparant-los amb el nivell de conservació impost sobre el model reduït. Els avantatges d'incloure aquests criteris en la resolució d'un PGAVSD són les següents. Primer, s'evita l'execució d'operacions innecessàries i, segon, es preserva, de

manera relativament adequada, l'equació de continuïtat per al volum que entra a l'aquífer provinent de les accions exteriors (AE). Un altre avantatge és que, en usar algorismes iteratius basats en el producte matriu-vector dispers per resoldre PGAVSD, es conserva l'estructura dispersa de les matrius que componen el model de flux, la qual es pot utilitzar per estalviar operacions computacionals i disminuir l'emmagatzematge requerit.

En aquest treball s'han implementat dos generadors dispersos de modes efectius. El primer d'ells està basat en un modificació de la iteració de gradient conjugat amb deflació que utilitza preconditionament ILU per accelerar les iteracions vectorials i minimitzar el quocient de Rayleigh. L'abans esmentada generació vectorial ha provat ser molt eficient quan és necessari calcular una petita quantitat dels modes associats als autovalors de menor magnitud. L'algorisme genera cada mode calcula seus coeficients de repartiment per verificar si aquest mode és efectiu, avalua els coeficients de repartiment acumulats i verifica el criteri de parada per finalitzar la generació. D'altra banda, el segon generador de modes efectius està basat en la iteració racional Lanczos amb reinici explícit i reortogonalització parcial per calcular seqüencialment subconjunts de modes. El reinici explícit aplica una deflació sobre un nou vector inicial de Lanczos per prevenir la convergència a un dels autovectors prèviament disponibles. Quan cada reinici ha construït un altre conjunt de modes, el generador calcula els coeficients de repartiment de cada nou mode per detectar quins d'aquests són efectius. El procés es repeteix per tot les noves modes. Posteriorment, els coeficients de repartiment acumulats es calculen i el generador revisa si s'ha assolit el criteri d'aturada de la generació per a totes les AE. Si aquest criteri no ha estat assolit, s'efectua un nou reinici imposant un desplaçament espectral convenient per millorar la convergència modal. Els resultats de molts experiments numèrics efectuats han demostrat que el generador racional de Lanczos és molt eficient, fins i tot per models de flux subterrani de grans dimensions on el domini espacial de l'aquífer ha estat discretizado utilitzant desenes de milers de nodes pertanyents a una xarxa de DF. Els generadors proposats han estat usats per reduir els models de flux subterrani per: (i) aquífers rectangulars homogenis i isòtrops connectats amb un riu recte, (ii) aquífers rectangulars heterogeni connectats amb un riu recte i (iii) un aquífer altament heterogeni amb contorns irregulars, connectat amb un riu sinuós i inclinat. Els resultats de les simulacions mostren que la generació iterativa de modes és més eficient de calcular l'espectre complet del PGAVSD i permet reduir models heterogenis de grans dimensions, tot i que moltes AE estan aplicades sobre l'aquífer.

També s'ha proposat una extensió del mètode racional de Lanczos (MLAN) per reduir eficientment les relacions riu-aquífer en models de sistemes d'ús conjunt. El MLAN s'usa per generar una base ortogonal d'un subespai de Krylov de reducció. A més, els factors de participació acumulats dels vectors de Lanczos s'usen com a criteri d'aturada de la generació abans esmentada, avaluant si l'equació de conservació de massa per el volum d'aigua entrant de les AE es satisfà apropiadament. L'esquema de reducció s'aplica sobre el model de flux subterrani amb i propòsit d'acoblar una seqüència de sistemes d'equacions lineals reduïdes, les solucions representen els estats de l'aquífer al llarg de l'horitzó de simulació. Per fer possible el càlcul dels volums integrats d'intercanvi entre el riu i l'aquífer, s'ha proposat un esquema d'integració numèrica dels estats de Lanczos. A part d'això, també s'inclouen els conceptes de paràmetres de control al MLAN per tal d'accelerar els càlculs de les relacions riu-aquífer i altres variables d'estat requerides. Finalment, el MLAN ha estat provat per reduir els models de flux en aquífer rectangulars homogenis. Els resultats han estat comparats amb els obtinguts mitjançant: (i) models pluri cellulars englobats, (ii) models resolts utilitzant el MAV clàssic i (iii) models resolts per DF espai-temporals. S'ha trobat que el MLAN es comporta millor que les DF, aconseguint un acompliment comparable al exhibit pel MAV clàssic amb truncament conservatiu, però és menys eficient

que els models pluri cellulars englobats. Una anàlisi de l'impacte de modificar la parametrització de les relacions riu-aqüífer, en funció de la conductància de riu, sobre alguns paràmetres de control com ara piezomètriques, volums emmagatzemats i fluxos interns, ha demostrat que, en disminuir la conductància, el desenvolupament del MLAN millora ja que es necessiten menys vectors de Lanczos per obtenir resultats adequats.

El MAV-CSEM i el MLAN han provat ser poderoses eines per reduir models de flux subterrani de grans dimensions. Aquí, el MAV-CSEM i el MLAN han estat aplicats per reduir dos aqüífers lineals altament discretizados, complexos i heterogenis. El primer és un aqüífer rectangular, connectat amb un riu recte, que manifesta tres bandes amb propietats hidràuliques uniformes. El segon és un aqüífer altament heterogeni i anisòtrop, de contorns irregulars, connectat amb un riu sinuós i inclinat. En ambdós aqüífers, l'aplicació de cada tècnica de reducció ha consistit en una anàlisi de sensibilitat de la influència de modificar la parametrització de les relacions riu-aqüífer, en funció de la conductància del riu i dels paràmetres de reducció (límit de participació modal per MAV-CSEM i mida del subespai de Krylov de reducció per al MLAN), en la representació més adequada d'alguns paràmetres de control seleccionats, com ho són les altures piezomètriques, volums emmagatzemats i fluxos interns. Els resultats han mostrat el poder d'ambdues tècniques per reduir eficientment els models de flux subterrani plantejats. No obstant això, les principals diferències trobades entre ambdós són: *(i)* el MAV-CSEM és més demandant computacionalment per calcular el subespai de reducció de autovectors, però la seva execució del model de flux és més ràpida, *(ii)* el textsc MLAN calcula més adequadament les variables distribuïdes a l'aqüífer com ara piezomètriques, volums emmagatzemats i fluxos interns si la parametrització de la iteració de Lanczos es realitza correctament *(iii)* el MAV-CSEM obté més eficient i adequadament les relacions riu-aqüífer agregades al llarg de tota la xarxa de drenatge. La principal conclusió d'aquestes aplicacions és que la selecció d'un o altre mètode de reducció depèn del tipus de problema que s'està enfrontant i dels paràmetres de control requerits per aquest.