



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**INSTITUTO DE GEOFÍSICA
POSTGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

**SIMULACIÓN NUMÉRICA EN 3-D DE TEMPERATURAS Y
ELEMENTOS QUÍMICOS MAYORES EN EL CAMPO
GEOTÉRMICO DE LOS HUMEROS, PUEBLA**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(MODELACIÓN DE SISTEMAS TERRESTRES)**

PRESENTA

JORGE ALBERTO ANDAVERDE ARREDONDO

**DIRECTOR DE TESIS
DR. SURENDRA PAL VERMA**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

AGRADECIMIENTOS

Al **Dr. Surendra P. Verma**, por su valiosa dirección durante el desarrollo de trabajo doctoral, pero sobre todo por permitirme aprender de él sobre Ciencias de la Tierra y sobre la vida.

Al **Dr. Edgar Santoyo**, por su valiosa orientación y por su apoyo durante el desarrollo de este trabajo.

A la **Dra. Leticia Flores Márquez**, por la revisión y sugerencias sobre esta tesis.

Al **Dr. Eduardo González Partida**, por la revisión y sugerencias sobre esta tesis.

Al **Dr. Oscar Campos Enríquez**, por su apoyo académico y por permitirme trabajar con él.

Al **Dr. Octavio García Valladares**, por su orientación académica en cuanto a la simulación térmica y por la revisión del presente trabajo.

A la **Dra. Sara Lilia Moya Acosta**, por la revisión y sugerencias de este trabajo.

A la **Universidad Nacional Autónoma de México** a través del **Instituto de Geofísica** (por haberme recibido y formado académicamente) y al **Centro de Investigación en Energía** (donde realicé este trabajo).

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), a la Dirección General de Estudios de Posgrado – UNAM, a la Universidad Autónoma de Nuevo León y al Proyecto DGAPA-PAPIIT IN104703-3, por su apoyo económico brindado durante algunas etapas de mi trabajo doctoral.

Al **Ing. Alfredo Quiroz Ruiz**, por su apoyo académico en la implementación del trabajo de cómputo.

A la **M.C. Mirna Guevara** por su apoyo académico durante el desarrollo del presente trabajo de tesis.

Un agradecimiento sincero a mis **amigos**, que me han apoyado en el caminar:
Fernando Velasco, Juventino Leal, Sergio Perales, Manuelita González, Félix Mancha, José Tamayo, Juan C. Montalvo, Ignacio Navarro, Gregorio Reyes, Eva y Oscar Laguna, Verónica y Jorge Aviles, Martha Hernández, Domingo Arenas, Bety de la Mora, Onésimo Meza, Yamilet Rodríguez, Romeli Barbosa, Mauricio Escalante, Sara Mesina, Ulises Dehesa, Francisco Payan, Maribel Samayoa, Carlos Pérez, Daniel Ortiz, Carlos Campo, Rosalinda González, Abdelaly Rivera, Janeth Matus, Lorena Díaz, Fredy e Hypitia Hernández, Efraín Gómez, Orlando Espinoza, Adrian Vidal, Víctor Gómez, Alejandro Ordaz, Francisco Martínez, Carlos Cedillo, Francisco Morales, J. Vidal Herrera, Carlos Rivera, Eduardo García (si me falta alguno, mil disculpas).

DEDICATORIA

Esta tesis esta dedicada a:
mis padres

**Josefina Arredondo García
Jorge Luis Andaverde Cortes**

Gracias por la vida que me dieron y por el apoyo en todos mis proyectos

Mis hermanos y sus esposas

**Héctor Guillermo y Yessenia
Jaime Eduardo y Lorena**

Mis sobrinos

Yessenia, Héctor, Lorena y el que viene (Eduardito)

Un profundo recuerdo a mis abuelitos:

**Francisca Andaverde
Adela García
Salvador Arredondo**

Índice

Resumen

Sección 1

Temperaturas estabilizadas de formación: evaluación estadística y modelos de regresión.

- 1.- Introducción
- 2.- Ecuaciones de los métodos analíticos
- 3.- Base de datos
- 4.- Pruebas de linealidad
- 5.- Regresiones cuadráticas
- 6.- Propagación de errores
- 7.- Modelos de regresión lineal
- 8.- Aplicación de la teoría de propagación de errores en las tef
- 9.- Conclusiones

Sección 2

Simulación térmica y química en tres dimensiones de una cámara magmática: campo geotérmico de los humeros, Puebla

- 1.- Introducción
- 2.- Antecedentes
- 3.- Teoría y desarrollo del simulador tchemsys
- 4.- Resultados de las simulaciones térmica y química en el campo geotérmico de los humeros
- 5.- Conclusiones y recomendaciones
- 6.- Referencias

Apéndices

RESUMEN

El estudio de las cámaras magmáticas, en cuanto a los procesos petrológicos que en ella tienen lugar, así como su evolución térmica y química ha tenido un creciente interés en las ciencias de la Tierra. El objetivo principal de este trabajo fue el desarrollo de un simulador en el que de forma acoplada se estudiara, en tres dimensiones, la evolución térmica y química de una cámara magmática. Para el desarrollo de este trabajo se abordan dos aspectos importantes (1) el análisis estadístico de algunos métodos comunes utilizados en el cálculo de las temperaturas estabilizadas de formación (TEF) y la correcta determinación de estas TEF, mismas que sirven para validar los estudios realizados en la segunda parte; y (2) el desarrollo de un simulador para estudiar la evolución térmica y química de una cámara magmática y su aplicación al campo geotérmico de Los Humeros, Puebla, México. Los resultados de esta investigación se presentan en dos partes.

En la primera, se realizó un análisis estadístico de los métodos analíticos utilizados comúnmente en el cálculo de las temperaturas de formación en pozos. Los métodos bajo estudio fueron: (1) el de fuente lineal o método de Horner; (2) el método de transferencia de calor esférica y radial; y (3) el método de transferencia cilíndrica de calor. La evaluación estadística se realizó aplicando la teoría de propagación de errores en las ecuaciones de los métodos analíticos y probando diferentes modelos de regresión tanto lineal (ordinaria y ponderada) como polinomial. Se concluye que el método que presenta menor error es el de transferencia de calor cilíndrica; sin embargo, se podría sugerir el uso del método de línea fuente por ser de fácil implementación y por presentar errores relativamente pequeños.

En la segunda parte, se desarrolló el simulador TCHEMSYS para modelar la evolución térmica y química de una cámara magmática. Las ecuaciones diferenciales fueron resueltas mediante la aplicación de volúmenes de control. El lenguaje de cómputo utilizado fue el FORTRAN. La validación del simulador se realizó tanto para el campo de temperaturas de todo el dominio, como para el de velocidades en la cámara magmática. Las dos innovaciones del TCHEMSYS son que permite evaluar la evolución en tres dimensiones y los procesos térmicos y químicos pueden ser determinados de forma acoplada, siendo esto un modelo más realista. Este simulador se aplicó al campo geotérmico de Los Humeros, pudiéndose reproducir mediante simulaciones tanto la química en cuanto a óxidos mayores de las rocas que formaron la caldera, así como el campo de temperaturas medido en los pozos geotérmicos del área de estudio.

Los resultados de la investigación desarrollada en el presente trabajo doctoral han sido publicados en cuatro artículos internacionales. Estos artículos se anexan al final de la presente tesis. Además se realizó un manuscrito que ha sido aceptado, después de su arbitraje, para formar parte como un capítulo de un libro editado sobre fronteras en la investigación de energía geotérmica.

ABSTRACT

Petrological processes in magma chambers as well as their thermal and chemical evolution have been of increasing interest in Earth Sciences. The main objective of the present work was the development of a simulator which could model in three dimensions the thermal and chemical evolution of a magma chamber. In this work two important aspects have been covered: (1) statistical analysis of some methods commonly used in stabilized formation temperature (SFT) estimates and a “correct” determination of these SFT used to validate the studies carried out in the second part of this thesis; and (2) the development of a simulator to study thermal and chemical evolution of a magma chamber and its application to Los Humeros geothermal field, Puebla, Mexico. The results of these investigations are presented in two parts.

The first part presents a statistical analysis of analytical methods commonly used in the calculation of formation temperatures in wells. These methods are: (1) line source or Horner method; (2) spherical and radial method of heat transfer; and (3) cylindrical method of heat transfer. The statistical evaluation was carried out by applying the error propagation theory to the relevant analytical equations and fitting different regression models - linear (both ordinary and weighted) as well as polynomial. The cylindrical heat transfer method was considered to provide minimum errors although the line source method can be recommended because it can be easily used and because it provides relatively small errors.

The second part describes the TCHEMSYS simulator for thermal and chemical modeling of a magma chamber. The differential equations were solved by control volume method. The computer language used was FORTRAN. The simulator was validated for both temperature and velocity fields in the magma chamber. The two innovations of TCHEMSYS are that it provides solution in three dimensions and also it resolves in a coupled way the thermal and chemical evolution of a magma chamber; both these characteristics represent the chamber processes in a more realistic way. This simulator was applied to the Los Humeros geothermal field, where both chemical (major element) and thermal characteristics were reproduced through simulation of a magma chamber.

The main results of the investigations carried out in this doctoral work have been published in 4 papers in international journals. These papers are presented at the end of this thesis. Besides, another article was written as a book chapter, which will be published in a book on Geothermal Research Frontiers. This manuscript is also presented at the end of the thesis.

SECCIÓN 1

TEMPERATURAS ESTABILIZADAS DE FORMACIÓN: EVALUACIÓN ESTADÍSTICA Y MODELOS DE REGRESIÓN.

1.- INTRODUCCIÓN

La determinación de las temperaturas estabilizadas de formación (TEF) es una tarea necesaria en las actividades geotérmicas y petroleras. Estas TEF sirven para evaluar la reserva energética en campos geotérmicos, la interpretación de registros eléctricos de pozos, la evaluación *in situ* de la conductividad de las rocas y la determinación de los gradientes geotérmicos (Luheshi, 1983; Shen y Beck, 1986; Cao et al., 1988), entre otras. La aplicación de las TEF es amplia en las Ciencias de la Tierra como lo muestran los siguientes trabajos: en modelación térmica de cámaras magmáticas (p.e. Verma y Andaverde, 1996; Stimac et al., 2000); modelación térmica de cuencas sedimentarias (p.e. Hurter y Pollack, 1996; He et al., 2002); modelado térmico en zonas de subducción (p.e. Henry y Pollack, 1988; Lewis et al., 1988); cambio climático (p.e. Harris y Chapman, 1995; Correia y Safanda, 2001) y en la industria petrolera (p.e. Hasan y Kabir, 1994; Kutasov, 1999).

Los métodos para el cálculo de las TEF se pueden dividir en dos tipos (Luheshi, 1983): el primero es mediante el desarrollo y aplicación de un simulador numérico para reproducir la historia térmica, tanto del lodo contenido en el pozo como de la roca de la formación que lo circunda. Estos simuladores requieren excesiva información de las propiedades termofísicas de los materiales que intervienen, así como de las propiedades dinámicas de los fluidos de perforación (Shen y Beck, 1986; Santoyo et al., 2000). El segundo tipo de métodos comprenden los analíticos que se limitan a determinar las TEF en el fondo de un pozo. Estos modelos deben su nombre a que son la solución analítica de una ecuación diferencial de la transferencia de calor en un pozo.

En el presente trabajo se evaluaron tres métodos analíticos: (1) el de fuente lineal o método de Horner (HM; Horner, 1951; Dowdle y Cobb, 1975); (2) el método de transferencia de calor esférica y radial (SRM; Ascencio et al., 1994); y (3) el método de transferencia de calor cilíndrica (CSM; Hasan y Kabir, 1994). Estos métodos fueron seleccionados porque representan diferentes mecanismos de transferencia de calor. El HM y SRM son puramente conductivos, mientras que el CSM involucra la conducción y convección en la transferencia de calor.

El objetivo de este trabajo fue evaluar estadísticamente los tres métodos analíticos antes mencionados. Esta evaluación es importante para poder decidir que tipo de regresión se debió de utilizar para calcular las TEF en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla. Las TEF calculadas y sus estimaciones de incertidumbres, aplicando la teoría de propagación de errores, se utilizaron en un análisis comparativo con las temperaturas obtenidas de la simulación térmica de la cámara magmática en dicho campo geotérmico. El trabajo desarrollado y los

resultados obtenidos en la presente tesis son publicados (cuatro) o aceptados (uno) en revistas con nivel internacional de alto impacto y se presentan en los Apéndices A, B, C, D, E y a continuación se citan:

A.- Andaverde, J., Verma, S. P., Santoyo, E., 2005. Uncertainty estimates of static formation temperatures in boreholes and evaluation of regression models. *Geophysical Journal International* 160, 1112-1122.

B.- Verma, S. P., Andaverde, J., Santoyo, E., 2006b. Statistical evaluation of methods for the calculation of static formation temperatures in geothermal and oil wells using an extension of the error propagation theory. *Journal of Geochemical Exploration* 89, 398-404.

C.- Verma, S. P., Andaverde, J., Santoyo, S., 2006c. Application of the error propagation theory in estimates of static formation temperatures in geothermal and petroleum boreholes. *Energy Conversion and Management* 47, 3659-3671.

D.- Campos-Enríquez, J. O., Domínguez-Méndez, F., Lozada-Zumaets, M., Morales-Rodríguez, H. F., Andaverde-Arredondo, J. A., 2005. Application of the Gauss theorem to the study of silicic calderas: the calderas of La Primavera, Los Azufres, and Los Humeros (Mexico). *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 147, 39-67.

E.- Verma, S. P., Andaverde, J., 2006 Coupling of thermal and chemical simulations in a 3-D integrated magma chamber-reservoir model: A new energy research frontier. In: Columbus, F. (Ed). *Geothermal Energy Research Frontiers*, Nova Science Publishers, Inc. (Aceptado).

Cabe aclarar que se hará uso del material ahí plasmado para describir la investigación doctoral sin repetición del mismo, por ello dentro del texto se utilizará la letra y el número correspondiente para referirse a cada uno de los artículos.

2.- ECUACIONES DE LOS MÉTODOS ANALÍTICOS

Las ecuaciones diferenciales a resolver para el cálculo de las TEF, así como las condiciones para su solución analítica se presentan en el Ap. A. Para el caso del HM es la ecuación de conducción de calor bajo condiciones de flujo radial (Ec. 1; Ap. A); para el SRM es la ecuación de conducción de calor bajo flujo esférico y radial (Ec. 3; Ap. A); y para el CSM es la Ec. 7 (Ap. A), la que resulta de la combinación de tres ecuaciones diferenciales que analizan la transferencia de calor entre el pozo y la formación, entre el centro del pozo y sus pared y entre la pozo y las TEF. Mayor detalle de las ecuaciones se pueden obtener de los trabajos originales (Dowdle y Cobb, 1975; Ascencio et al., 1994; Hasan y Kabir, 1994), respectivamente.

3.- BASE DE DATOS

Para los estudios realizados sobre diferentes tópicos de las TEF en la presente tesis se utilizaron 12 series de datos seleccionadas de la literatura a nivel mundial. Algunas de estas series son de tipo experimental basado en mediciones de campo y otras de tipo sintético. Las de primer tipo son tanto de pozos geotérmicos como petroleros. En la Tabla 1 (Ap. A) se presentan seis de estas series: las series LH30 (n=6) y LH31 (n=7; Sánchez-Upton, 2006); HYODO (n=10; Hyodo y Takasugi, 1995); BREN (n=14; Brennand, 1985) provienen de pozos geotérmicos y las series SHEN (n=8; Shen y Beck, 1986) y CAO (n=15; Cao et al., 1988) son sintéticas. En la tabla 1 (Ap. B) se presentan dos series más que provienen de pozos petroleros: LUHE (n=4; Luheshi, 1983) y BEAR (n= 3; Beardsmore y Cull, 2001). Por último, en la tabla 1 (Ap. C) se presentan cuatro series adicionales: LARDERELLO (n=37, Da-Xin, 1986) y LH13 (n=6; Sánchez-Upton, 2006) que proviene de pozos geotérmicos, y MISSISSIPPI (n=12; Kutasov, 1999) y GULF (n=3; Dowdle y Cobb, 1975) que provienen de pozos petroleros. Algunas de estas series fueron utilizadas en este estudio para la determinación del mejor modelo de regresión para el cálculo de las TEF (LH30, LH31, HYODO, BREN, SHEN y CAO). Otras series (SHEN, CAO, LUHE, BEAR, LARDERELLO, LH13, MISSISSIPPI, GULF) se utilizaron para evaluación estadística de los tres métodos analíticos bajo estudio aplicando la teoría de propagación de errores. Se determinó si los datos de las series cumplen con los criterios de aplicabilidad de cada método. Aquellos datos que no cumplen se señalan en las Tablas antes mencionadas mediante un asterisco (*) o un diamante (◆). Los criterios de aplicabilidad se pueden consultar en los trabajos originales de cada método (Dowdle y Cobb, 1975; Ascencio et al., 1994; Hasan y Kabir, 1994).

4.- PRUEBAS DE LINEARIDAD

Para determinar las TEF se realizan regresiones de las temperaturas de fondo de pozo (BHT) contra las funciones de tiempo de cada uno de los tres métodos bajo estudio. En los tres métodos, se asume que existe una relación lineal entre las dos variables antes mencionadas. Sin embargo, al realizar gráficas de estas variables (Figura 1, Ap. A y Figura 1, Ap. C) se observa que la tendencia parece ser no-lineal. Por lo anterior, se realizaron una serie de pruebas para determinar el tipo de relación entre estas variables.

En el Ap. A (sección 2.6) se presentan a detalle la descripción de dichas pruebas. La primera de ellas llamada secuencia de signos y está basada en la prueba de Wald-Wolfowitz (Miller y Miller, 2000). Esta prueba se puede realizar sólo a series con nueve o más datos y consiste en contrastar el número de rachas de los signos de los residuales con los valores críticos estadísticos esperados. Si el número de rachas es suficientemente pequeño, se rechazará la hipótesis nula H_0 de que la distribución de signos ha sido al azar y permite suponer que una regresión polinomial sería la más adecuada. En la Tabla 3 (Ap. A) se presentan los resultados de estas pruebas y se observa que para tres de ocho casos la prueba

antes mencionada muestra clara evidencia para una relación polinomial entre las dos variables (BHT vs. función de tiempo).

Otra prueba de linealidad fue realizar regresiones lineales para subconjuntos de un arreglo ordenado de datos. Se calcularon las pendientes y los interceptos (TEF) y se compararon aplicando pruebas F y t-Student. Si las pendientes o interceptos entre un subconjunto de datos y el siguiente subconjunto no son significativamente diferentes en un dado nivel de confianza, decimos que una regresión lineal es la aplicable; de lo contrario, se propone una regresión polinomial. Se aplicó esta prueba a seis series de datos (LH30, LH31, HYODO, BREN, SHEN y CAO). Las pendientes y los interceptos cambian sistemáticamente para la mayoría de las series (ver Tabla 4, Ap. A). Además en la Figura 3 (Ap. A) se presentan dos gráficas mostrando como cambian las pendientes y los interceptos al graficarlos contra diferentes subconjuntos vecinos. De lo anterior se deduce que una relación polinomial es evidente entre las BHT y las funciones de tiempo de los tres métodos. Aún para los casos donde la regresión lineal es estadísticamente válida, si se usara una regresión tipo polinomial, los términos de alto orden (por ejemplo cuadráticos o superiores) serían poco significativos. Por lo tanto, en general se podría optar por regresiones polinomiales en este tipo de aplicaciones.

5.- REGRESIONES CUADRÁTICAS

Como se concluyó de las dos pruebas de linealidad, la relación entre las BHT y las funciones de tiempo es una relación polinomial. Por lo anterior se realizaron regresiones polinomiales de segundo a quinto orden, así como regresiones lineales. Mediante la aplicación de la prueba de análisis de varianza (ANOVA) se determinó el orden del polinomio a utilizarse siguiendo los criterios propuestos por Miller y Miller (2000). El orden adecuado según las pruebas realizadas es de segundo grado y esto se determinó a partir del análisis del coeficiente de determinación (R^2). Se observó que este coeficiente varía significativamente de la regresión lineal a la cuadrática, sin embargo de la cuadrática a la cúbica los cambios no son significativos. En la Tabla 5 (Ap. A) se presentan las ecuaciones de regresión calculadas para cada serie y para los tres métodos bajo estudio. En dicha Tabla se presenta el cociente $\frac{c}{b}$ donde c es el coeficiente del término cuadrático y b del término lineal. Para 11 de los 18 casos la relación se encuentra entre 0.26 y 0.88, mientras que para los restantes 7 casos su valor es >1 . De lo anterior, se puede concluir que en todos los casos el término cuadrático es significativo en la regresión.

Para las series sintéticas SHEN y CAO se tiene que los valores esperados de las TEF son de 80 °C y 120 °C, respectivamente. La aplicación de la regresión cuadrática en los tres métodos permitió ver que sólo el método SRM (Ascencio et al., 1994) sobrestima considerablemente los valores esperados de TEF (Tabla 6, Ap. A). Esta sobreestimación es del orden de 10 % y este hecho implicaría que las simplificaciones o suposiciones hechas en el modelo SRM no son del todo adecuadas.

Se calcularon las sumas de residuales cuadráticos (RSS; ecuación 13, Ap. A) tanto a las regresiones cuadráticas como a las lineales. De estos resultados, se puede aportar una prueba más de que las regresiones cuadráticas son más adecuadas para el cálculo de las TEF. Esto se demuestra porque los valores de las RSS obtenidos en las regresiones cuadráticas son menores significativamente que aquellos obtenidos mediante regresiones lineales (Tabla 7, Ap. A). Es importante destacar que la recomendación del uso de las regresiones cuadráticas se apoya en resultados estadísticos. En futuros trabajos se puede realizar el análisis de factores físicos que apoyen o rechacen la aplicación de regresiones cuadráticas para el cálculo de las TEF. De antemano, se sabe que una variable importante en la transferencia de calor es la conductividad térmica y como lo muestran algunos trabajos (Kiyohashi et al., 1983; Vosteen y Schellschmidt, 2003) la dependencia de esta propiedad con la temperatura es no-lineal.

6.- PROPAGACIÓN DE ERRORES

Asociado a cualquier dato obtenido experimentalmente se tiene una cierta incertidumbre o error que, según la teoría de propagación de errores, se transportan o combinan cuando se realizan operaciones matemáticas con dichos valores (Bevington y Robinson, 2003; Verma, 2005). En el ámbito de Ciencias de la Tierra, la teoría de propagación de errores tiene una amplia aplicación, como lo muestran los trabajos sobre modelación geoquímica de elementos trazas (Albarede, 1995; Verma, 1998); geotermómetros (Santoyo y Verma, 1993; Verma y Santoyo, 1997); geocronología y geología de isótopos (Dickin, 1995); sismología (Gorbatov y Kostoglodov, 1997); ciencias de la atmósfera (Feczko et al., 2005); sensores remotos (Sun et al., 2003); geología estructural (Mulchrone, 2005); y agua subterránea (Devlin et al., 2000), entre otros.

Campos et al. (2005; Ap. D) realizaron un trabajo sobre la aplicación del teorema de Gauss al estudio de calderas. El objetivo del trabajo fue calcular la deficiencia de masas en tres calderas de México (La Primavera, Los Azufres y Los Humeros) y de esta información determinar la geometría (radio y profundidad) del colapso. En las ecuaciones utilizadas para la determinación de la deficiencia de masa (Ecuaciones 1 – 4, Ap. D) fue aplicada la teoría de propagación de errores. El cálculo de las incertidumbres se simuló para perfiles con datos equiespaciados 1, 0.5 y 0.25 km, respectivamente y con incertidumbres en los datos de gravimetría de 1.0 y 1.5 mGal. De estas simulaciones, se concluye que el error en la deficiencia de masa es de hasta 5% con los valores de las variables antes mencionados. La propagación de errores mostró que, para la estimación del volumen total de la caldera, la ecuación 5 (Ap. D) es más sensible a la incertidumbre de la densidad que a la de los datos gravimétricos. Por ejemplo, para un error del 1% en los valores de la densidad, se obtienen incertidumbres de 17% para el volumen.

7.- MODELOS DE REGRESIÓN LÍNEAL

Se ha demostrado que realizar regresiones lineales no siempre es lo correcto en estudios numéricos; pero dado que tanto en la industria geotérmica, como en la petrolera las regresiones lineales son aplicadas comúnmente, se presenta un análisis sobre los diferentes métodos de regresión lineal que pueden aplicarse y la propagación de los errores en la determinación de las TEF. En el Ap. A se presentan las ecuaciones para realizar regresiones lineales ordinarias, es decir para calcular tanto el intercepto a que en este caso corresponde con las TEF, así como la pendiente b de las rectas de regresión. También se presentan las ecuaciones para calcular los errores tanto en a como en b . Existe otro tipo de regresiones llamada regresión lineal ponderada la cual se describe brevemente en los Ap. B y C. En esta regresión se toma en cuenta las incertidumbres de ambas variables (x,y) . Estas incertidumbres son obtenidas al aplicar la teoría de propagación de errores a las ecuaciones de cada uno de los métodos bajo estudio (HM, SRM y CSM).

8.- APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PROPAGACIÓN DE ERRORES EN LAS TEF

En el Ap. B se realizó la propagación de errores para el cálculo de las TEF. Fue precisamente en la variable tiempo de recuperación, así como en las BHT donde se supusieron errores de diferentes magnitudes: (1) errores homoscedásticos de 0.25 horas en el tiempo de recuperación y de 5 °C para las BHT; y (2) errores heteroscedásticos del orden del 1% tanto en el tiempo de recuperación como para las BHT. Las ecuaciones 5 a 9 del Ap. B presentan la aplicación de dicha propagación de errores. Los errores se supusieron ya que desafortunadamente en las series de datos disponibles no se reportan las incertidumbres. Los valores de las incertidumbres se basaron en el trabajo de Beardsmore y Cull (2001).

Los resultados de estas propagaciones se presentan en la Figura 1 (Ap. B). Se observa que para el caso de errores del tipo (1) las incertidumbres en las TEF obtenidas son considerablemente más pequeñas que aquellas obtenidas en las del tipo (2). Por otra parte, es notorio que para el método SRM los valores de las incertidumbres son mucho más altos que aquellos obtenidos por los otros dos métodos (HM y CSM). Un detalle importante a considerar son los valores de incertidumbre que se observan en la Figura 1d del Apéndice antes citado. Los valores de incertidumbre que se obtuvieron para la regresión lineal ordinaria (RLO) son muy pequeños; sin embargo, esto parece ser un caso excepcional de que los tres valores de esta serie (BEAR) coinciden en una línea recta. De lo anterior, se recomienda que se tome la mayor cantidad de datos ($n > 30$) para el cálculo de las TEF. Por otra parte, las incertidumbres de la RLO no son representativas del experimento, por lo que se sugiere que, en caso de optarse por regresiones lineales, se utilicen las ponderadas.

Otra variable a ser considerada en la propagación de errores es el tiempo de circulación (ecuaciones 26 y 28, Ap. C). Para realizar la propagación de errores, se utilizaron las ecuaciones 18-24 del Ap. C las cuales fueron tomadas del trabajo de Bevington y Robinson (2003). Se supusieron valores tanto homoscedásticos como heteroscedásticos para realizar la propagación de errores. En el caso de tiempo de circulación, se propagaron errores de 0.25 horas. En la Figura 2 (Ap. C), se comparan las regresiones ponderadas con las ordinarias. Se observa que los errores en las TEF obtenidos en las regresiones ponderadas homoscedásticas son significativamente menores que los obtenidos con las heteroscedásticas.

Un análisis del efecto del número de observaciones en el cálculo de las TEF y de sus errores propagados fue realizado. Para este propósito, se seleccionó la serie LARDERLO que tiene 37 datos y de ellos, se seleccionaron muestras de 37, 33, 29, 21, 16, 11, 9, 6, y 3 datos, eliminándose datos intermedios sucesivos. En las Figuras 3a-3c, se graficaron los valores de TEF calculados con sus incertidumbres contra el número de datos utilizados para dichos cálculos para la regresión lineal ordinaria y la ponderada heteroscedástica. Se observa que a medida que aumenta el número de datos, la incertidumbre decrece. Para visualizar lo anterior, se presenta la Figura 3d – 3f en donde se grafica el porcentaje de desviación estándar relativa (%DER) contra el número de datos. En ellas, se aprecia de manera clara que el %DER disminuye significativamente al aumentar el número de datos. Esto último es más evidente para el HM (Figura 3d) y para el SRM (Figura 3e) que para el CSM. De los resultados anteriores, se recomienda que el número de datos debe ser lo más grande ($n > 30$) posible para una determinación más confiable de los valores de TEF.

9.- CONCLUSIONES

De estos estudios, se puede concluir lo siguiente:

- a) Las dos pruebas para determinar el tipo de relación entre las BHT y las variables de tiempo muestran que la de tipo polinomial es la más adecuada para predecir TEF.
- b) De análisis de los valores de RSS se puede concluir que una regresión de segundo orden es más apropiada para el ajuste de TEF que una regresión lineal. También se observó que aplicar una regresión polinomial de orden tres o más ya no presenta cambios significativos con respecto a la de segundo orden.
- c) El SRM sobrestima sistemáticamente los valores de TEF calculados a partir de las BHT, por lo que no es recomendable utilizarlo para el cálculo de TEF.
- d) En caso de optar por utilizar regresiones lineales, las ponderadas son las más adecuadas ya que en ellas se pueden tomar los valores de las incertidumbres y con esto, aproximarse a valores más confiables de las TEF.
- e) Las regresiones lineales homoscedásticas resultaron ser, de las ponderadas, las que presentan menores valores en los errores propagados. Para realizar estas regresiones, fue necesario suponer valores de los errores asociados a cada variable (tiempo de recuperación, tiempo de circulación y BHT). Sin

embargo, se recomienda que en lo sucesivo se estimen los errores en dichas variables durante la perforación y registro de datos en un pozo.

- f) La magnitud de los errores obtenidos para diferentes números de datos utilizados al calcular una TEF son significativamente menores al aumentar el número de registros, por lo que se recomienda que estos sean, al menos, de 30 datos.
- g) Los valores de las TEF calculadas en el campo de Los Humeros se realizó mediante regresiones polinomiales de segundo orden utilizando el HM. Las TEF obtenidas en Los Humeros sirvieron para validar los modelos numéricos de simulación del campo de temperaturas en dicho campo geotérmico tal y como se explica en la siguiente sección.

SECCIÓN 2

SIMULACIÓN TÉRMICA Y QUÍMICA EN TRES DIMENSIONES DE UNA CÁMARA MAGMÁTICA: CAMPO GEOTÉRMICO DE LOS HUMEROS, PUEBLA

1.- INTRODUCCIÓN

El estudio de un campo geotérmico es interesante desde dos puntos de vista. El primero, con fines tecnológicos tendientes a la producción de energía eléctrica mediante la transformación del calor interno de la Tierra, y el segundo, para el desarrollo de nuevos modelos científicos relacionados con el emplazamiento y evolución de una cámara magmática con el objeto de predecir el comportamiento térmico y la vida útil de estos sistemas (Verma, 1985).

En México se ha identificado un gran potencial geotérmico, lo cual es demostrado a través de: (i) la actual producción de energía geotérmica (953 MWe) obtenida en cuatro campos en México: Cerro Prieto en Baja California, Tres Vírgenes en Baja California Sur, Los Azufres en Michoacán y los Humeros en Puebla (Gutiérrez-Negrín y Quijano-León, 2005); (ii) las ~ 8,000 estructuras volcánicas localizadas en el Cinturón Volcánico Mexicano (CVM); y (iii) las más de 180 estructuras circulares que pudieran estar también relacionadas con la presencia de cámaras magmáticas (Anguita et al., 2001). Atendiendo a los últimos dos factores y teniendo como reto predecir la vida útil de estos sistemas geotérmicos, el estudio de cámaras magmáticas (como fuente primaria de calor de los sistemas geotérmicos), ha sido identificado como una investigación original y de frontera con un interés creciente en el área de las geociencias. Dentro de este escenario geocientífico, el presente trabajo doctoral pretende contribuir al mejor entendimiento de los procesos térmicos y químicos que tienen lugar en estos sistemas.

2.- ANTECEDENTES

El estudio de las intrusiones magmáticas ha sido objeto de numerosas investigaciones encaminadas a evaluar sus características y su comportamiento térmico y químico (p. ej., Spera, 1980; Spera et al., 1982; Giberti et al., 1984a, b; Tait, 1988; Giberti y Sartoris, 1989; Marsh, 1989, 1996; Verma et al., 1990; Valentine, 1992; Andaverde et al., 1993; Jaupart y Tait, 1995; Verma y Andaverde, 1996; Verma y Rodríguez-González, 1997; Stimak et al., 2001; Valentine et al., 2002). Estos trabajos fueron orientados a determinar el campo de temperaturas a partir del enfriamiento de una cámara magmática, variando las condiciones de emplazamiento y sus geometrías (tanto de la cámara como del medio que la contiene). Verma (1985) reportó que trabajos más realistas sobre la simulación térmica y química de cámaras magmáticas requieren del conocimiento de variables, tales como: (i) el tamaño y la geometría de la cámara; (ii) la composición

química del magma original, su temperatura y la profundidad del emplazamiento de la cámara; (iii) los principales mecanismos de transferencia de calor que gobiernan los fenómenos físicos de formación y evolución de las cámaras; (iv) la generación de calor producida por desintegración radioactiva y por cristalización, y (v) los procesos de reinyección y eyección de magma. La complejidad de los modelos numéricos actualmente desarrollados, para explicar la evolución de una cámara magmática, ha variado de modelos adimensionales para trabajos de modelación geoquímica (p. ej., Bohrsen y Spera, 2001, 2003; Spera y Bohrsen 2001, 2002), hasta modelos bidimensionales para la simulación de procesos térmicos (p. ej., Kuritani, 2004).

A la fecha se han realizado algunos trabajos de modelación térmica de estos sistemas, entre los cuales se encuentran los reportados por Prol y González-M, 1982; Giberti et al., 1984a, b; Campos-Enríquez y Duran-M, 1986; Giberti y Sartoris, 1989; Verma et al., 1990; Valentine, 1992; Andaverde et al., 1993; Verma y Andaverde, 1996; Verma y Rodríguez-González, 1997; Wohletz et al., 1999; García-Estrada, 2000 y Stimac et al., 2001.

De estos estudios destacan los efectuados en cámaras magmáticas localizadas en campos geotérmicos de México (p. ej., Prol y González-M., 1982; Campos-Enríquez y Duran-M., 1986; Verma et al., 1990; Verma y Andaverde, 1996; Verma y Rodríguez-González, 1997 y García-Estrada, 2000). El primero de ellos (Prol y González-M., 1982) consideró un modelo bidimensional basado en la solución de la ecuación de transferencia de calor por conducción mediante diferencias finitas, esto con el fin de describir el campo de temperaturas del campo geotérmico de Los Humeros, Puebla. El principal resultado obtenido por estos autores fue la estimación preliminar de una zona asociada con temperaturas > 200 °C para la producción de energía geotérmica a profundidad económicamente explotable (< 2 km). En el modelo geológico utilizado por lo autores se supone una cámara magmática de ~ 300 km³. Este volumen esta por debajo de los estimados en modelos de evolución petrológica en donde se considera que la cámara magmática tiene un volumen mínimo de 1500 km³ (Verma, 1985).

Campos-Enríquez y Duran-M. (1986) determinaron el campo de temperaturas en Los Humeros, resolviendo la ecuación de transferencia de calor por conducción en estado estacionario en dos dimensiones por el método numérico de elemento finito. Estos investigadores supusieron el flujo de calor necesario en la base de la sección geológica modelada para lograr reproducir las temperaturas estabilizadas de formación en los pozos de Los Humeros. En este mismo sitio, Verma et al. (1990) determinaron el campo de temperaturas asumiendo una cámara magmática estratificada térmicamente y en la que tuvieron lugar reinyecciones de magma.

Verma y Andaverde (1996) simularon la distribución de temperaturas en el campo geotérmico de Los Azufres, Michoacán y la principal contribución de este trabajo fue el de incluir en las simulaciones el aporte de calor por cristalización fraccionada. Verma y Rodríguez-González (1997) simularon la distribución de

temperaturas para el campo geotérmico de La Primavera, Jalisco, incorporando el aporte de calor por desintegración radioactiva. El último trabajo reportado en la literatura fue el realizado por García-Estrada (2000) en Los Azufres, en donde consideró la transferencia de calor por conducción en dos dimensiones asumiendo recargas de magma en la cámara durante los últimos 0.4 Millones de años (Ma). El autor resume que para alcanzar las temperaturas medidas en los pozos productores es necesario considerar una fuente primaria de calor de edad Holoceno Tardío localizada entre 5 y 9 kilómetros de profundidad, y que además exista movimiento (convección) de agua entre la cámara y el yacimiento geotérmico.

En cuanto a modelos petrogenéticos recientes, Verma (2000) realizó un estudio en Los Humeros, a fin de determinar el modelo que origina la química de las rocas eruptadas en dicho campo. El autor concluye que el modelo petrogenético que mejor explica los datos geoquímicos es aquel que acopla la asimilación con la cristalización fraccionada.

Con base en la revisión de los trabajos realizados hasta el momento en esta área de las geociencias, se puede observar un creciente interés en el estudio de modelos más realistas de sistemas geoenergéticos complejos. Se puede resumir que el avance alcanzado se limita a la solución de modelos de transferencia de calor conductivo bidimensional en estado transitorio, los cuales han sido generalmente resueltos por técnicas numéricas de elemento finito, diferencias finitas y volumen de control. En estos modelos se han involucrado algunos procesos petrológicos tales como reinyección y eyección de magma, así como la cristalización fraccionada y el de aporte de calor por procesos de desintegración radioactiva. En cuanto a la cámara magmática se han probado diferentes geometrías y se ha simulado el campo de temperaturas variando la ubicación de la cámara, además se han evaluado diferentes condiciones de frontera en el fondo de las secciones geológicas utilizadas.

La experiencia adquirida a la fecha indica que una simulación térmica más realista de una cámara magmática requiere de modelos 3D para considerar la mayoría de las condiciones geológicas, geofísicas y geoquímicas que dominan en un campo geotérmico. Este tipo de modelos permitiría refinar los modelos (físico, numérico y geológico) de una cámara magmática para efectuar una simulación más representativa, así como para ayudar a definir con mayor precisión y exactitud las condiciones iniciales y de frontera de las simulaciones.

Atendiendo a los resultados reportados a la fecha y las limitaciones detectadas en los modelos existentes se puede establecer el objetivo central de este trabajo de tesis es el adquirir un conocimiento profundo sobre la evolución petrológica y térmica de las cámaras magmáticas durante su emplazamiento y enfriamiento. Para lograr lo anterior se desarrolló un simulador que permite calcular numéricamente la distribución espacial (3D) y temporal del campo de temperaturas en una cámara magmática, esto acoplado a la evolución geoquímica de los elementos mayores del magma. También se puede simular el campo de

temperaturas en el medio que rodea a la cámara. El trabajo se aplicó en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla. Para validar los resultados de este trabajo se compararon estadísticamente las temperaturas obtenidas en las simulaciones con los datos medidos en los pozos del campo geotérmico de Los Humeros y se comparó la química de las rocas del área de estudio con las obtenidas en las simulaciones.

3.- TEORÍA Y DESARROLLO DEL SIMULADOR TCHEMSYS.FOR

Para modelar el comportamiento térmico y químico de una cámara magmática se desarrolló el simulador numérico TCHEMSYS (**Thermal and CHEmical Modeling of a volcanic-geothermal SYStem**). Para realizar este nuevo simulador fue necesario: (1) definir el modelo físico- geológico de una campo geotérmico cuya fuente es una cámara magmática; (2) Determinar las hipótesis a ser utilizadas en la discretización de las ecuaciones gobernantes de los procesos de transferencia de masa, energía y momento que tienen lugar en el sistema geotérmico; (3) desarrollar el código del simulador aplicando volúmenes de control; y (4) validar el simulador con datos sintéticos y de un campo geotérmico, en este estudio el caso de Los Humeros (Santoyo, 1997). A continuación se describe en forma detallada la metodología usada para el desarrollo de TCHEMSYS.

3.1 Modelo físico – petrológico

Durante la evolución de una cámara magmática se producen un serie de procesos petrológicos y de transferencia de masa, energía y momento en dicha cámara (Figura 1, Valentine, 2002). Dentro de los procesos que aportan masa a la cámara está la inyección de nuevo magma y la asimilación de la roca encajonante a la misma. En cuanto a las pérdidas de masa asociadas con estos sistemas, se tienen las debidas al proceso de erupción de magma que sale a la superficie o que queda atrapado en niveles entre la cámara y la superficie terrestre. Por otra parte también se pierde masa debido a la cristalización de minerales y su posterior sedimentación en el fondo de la cámara. En cuanto a la energía, ésta puede aumentar al entrar nuevo magma en la cámara, por el flujo de calor en la parte inferior de la cámara, y por el calor latente aportado durante la cristalización del magma. También se tiene pérdida de energía cuando sale magma de la cámara, por el proceso de asimilación de roca y por la difusión térmica de la cámara al medio que la rodea. Estos balances de masa y energía acoplados constituyen el modelo físico y petrológico que sirvió como base para el desarrollo del simulador TCHEMSYS. Con este modelo se simuló los procesos que pudieron tener lugar en la cámara magmática que dio origen al campo geotérmico de Los Humeros.

3.2 Hipótesis del modelo

El desarrollo del modelo integrado en el simulador TCHEMSYS requirió la consideración de las siguientes hipótesis:

- a) Transferencia de calor por conducción, en tres dimensiones en todo el dominio y por convección sólo en la cámara magmática y en el yacimiento geotérmico.
- b) Se considera el magma como un fluido newtoniano ya que no existe información suficiente, hasta nuestro conocimiento, de las propiedades en estado natural de un magma como para implementar en este momento en el simulador al magma como fluido no-newtoniano.
- c) El dominio se dividió en volúmenes de control regulares de forma cúbica ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$).
- d) Las condiciones de frontera son de flujo constante de calor (tipo Neumann) y no cambian en el tiempo ya que se consideró un dominio muy grande (10 veces mayor que la cámara).
- e) Se desprecia la transferencia de calor por radiación.
- f) Se desprecia el aporte de calor por desintegración radioactiva, por considerar que este aporte no es significativo comparado con el aporte por cristalización fraccionada de magma.
- g) Cada unidad geológica se considera homogénea e isotrópica; esto es importante al considerarse las propiedades termofísicas de las rocas.
- h) Durante el emplazamiento de la cámara no se considera que tenga lugar la convección en el magma. La convección se considera completamente desarrollada a partir de que se ha formado toda la cámara.
- i) Se considera que existe la convección de agua en el yacimiento en la última etapa de evolución del campo geotérmico.
- j) Las erupciones volcánicas se consideran instantáneas.

3.3 Modelo matemático

Las ecuaciones que se considera gobiernan los procesos físicos y químicos que tienen lugar durante la evolución de la cámara magmática y el medio que la rodea son la conservación de masa (Ec. 1), la conservación de momento (Ecs. 2-4) y la conservación de energía (Ec. 5; Patankar, 1980; Moya et al., 1987; Valentine, 1992; Currie, 1993; Versteeg y Malalasekera, 1995;). Se presentan a continuación tales ecuaciones expresadas en coordenadas cartesianas:

Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

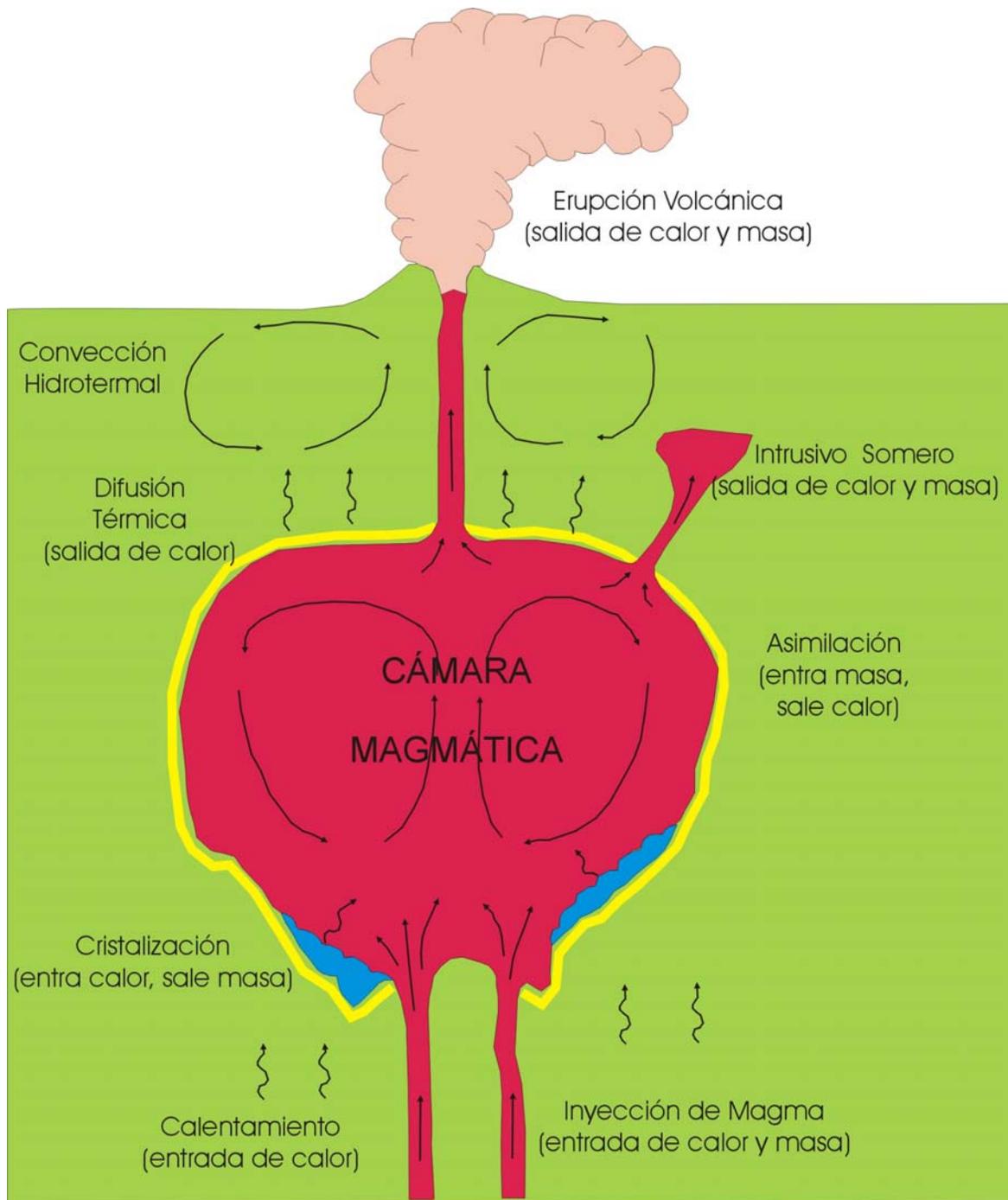


Figura 1 Esquema de los posibles procesos petrológicos y de transferencia que tienen lugar en una cámara magmática y que contribuyen al balance de masa y energía (Modificado de Valentine, 2002).

(1)

Ecuaciones de conservación de momento

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + \rho f_x \quad (2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v + \rho f_y \quad (3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 w + \rho f_z \quad (4)$$

Ecuación de conservación de energía

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \nabla^2 T \quad (5)$$

donde el primero y segundo término del lado derecho de las ecuaciones (2-4) son las referentes a las fuerzas de superficie y el tercer término es referente a las fuerzas de cuerpo. En la Ec. 5 C_p es la capacidad térmica a presión constante, u, v, w son las componentes en x, y y z de la velocidad, y

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

Las ecuaciones anteriores se pueden sintetizar en la llamada ecuación de convección-difusión para una propiedad ϕ intrínseca (Versteeg y Malalasekera 1995):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) + S_\phi \quad (7)$$

Esta ecuación, desarrollada para estado transitorio tridimensional de problemas de convección - difusión de ϕ en un campo de velocidades en un fluido $\bar{u} = (u, v, w)$, donde S es el término fuente, es:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w\phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) + S \quad (8)$$

3.4 Algoritmo Numérico

La solución de las ecuaciones diferenciales gobernantes (1 al 5) se realizó mediante el método numérico de volumen de control, el cual ha sido aplicado exitosamente en otros trabajos de simulación (p. ej., García-Valladares et al., 2004 y 2006). La discretización se llevó a cabo en tres dimensiones. De integrar la

ecuación de convección – difusión (ecuación 5) sobre un volumen de control rectangular finito la ecuación 5 toma la forma:

$$\frac{\rho c_p (T_p - T_p^\circ) \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + \rho c \Delta y \Delta z (T_e u_e - T_w u_w) + \rho c \Delta x \Delta z (T_n v_n - T_s v_s) + \rho c \Delta x \Delta y (T_t w_t - T_b w_b) =$$

$$\left(\frac{k_x \Delta T A_{yz}}{\Delta x} \right)_e - \left(\frac{k_x \Delta T A_{yz}}{\Delta x} \right)_w + \left(\frac{k_y \Delta T A_{xz}}{\Delta y} \right)_n - \left(\frac{k_y \Delta T A_{xz}}{\Delta y} \right)_s + \left(\frac{k_z \Delta T A_{xy}}{\Delta z} \right)_t - \left(\frac{k_z \Delta T A_{xy}}{\Delta z} \right)_b \quad (9)$$

Con la finalidad de simplificarla y posteriormente resolverla se definen las siguientes ecuaciones:

para el elemento acumulativo

$$a_p = \frac{\rho C_p \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \quad (10)$$

para la parte convectiva

$$F_x = \rho c \Delta y \Delta z / 4 \quad (11)$$

$$F_y = \rho c \Delta x \Delta z / 4 \quad (12)$$

$$F_z = \rho c \Delta x \Delta y / 4 \quad (13)$$

$$T_e u_e - T_w u_w = (T_E u_E + T_E u_P + T_P u_E - T_P u_W - T_W u_W - T_W u_P) \quad (14)$$

$$T_n v_n - T_s v_s = (T_N v_N + T_N v_P + T_P v_N - T_P v_S - T_S v_S - T_S v_P) \quad (15)$$

$$T_t w_t - T_b w_b = (T_T w_T + T_T w_P + T_P w_T - T_P w_B - T_B w_B - T_B w_P) \quad (16)$$

para la parte conductiva

$$\lambda_x = k_x \Delta y \Delta z / \Delta x \quad (17)$$

$$\lambda_y = k_y \Delta x \Delta z / \Delta y \quad (18)$$

$$\lambda_z = k_z \Delta x \Delta y / \Delta z \quad (19)$$

$$\left(\frac{k_x \Delta T A_{yz}}{\Delta x} \right)_e - \left(\frac{k_x \Delta T A_{yz}}{\Delta x} \right)_w = \lambda_x T_E - 2\lambda_x T_P + \lambda_x T_W \quad (20)$$

$$\left(\frac{k_y \Delta TA_{xz}}{\Delta_y} \right)_n - \left(\frac{k_y \Delta TA_{xz}}{\Delta_y} \right)_s = \lambda_y T_N - 2\lambda_y T_P + \lambda_y T_S \quad (21)$$

$$\left(\frac{k_z \Delta TA_{xy}}{\Delta_z} \right)_t - \left(\frac{k_z \Delta TA_{xy}}{\Delta_z} \right)_b = \lambda_z T_T - 2\lambda_z T_P + \lambda_z T_B \quad (22)$$

sustituyendo las ecuaciones 10 a la 22 en la ecuación 9, resulta :

$$\begin{aligned} T_P(a_p + F_x(u_E - u_W) + F_y(v_N - v_S) + F_z(w_T - w_B) + 2\lambda_x + 2\lambda_y + 2\lambda_z) = \\ T_E(\lambda_x - F_x(u_E + u_P)) + T_W(\lambda_x + F_x(u_W + u_P)) + \lambda_y(T_N + T_S) + \lambda_z(T_T + T_B) - \\ F_y(T_N v_N + T_N v_P - T_S v_S - T_S v_P) - F_z(T_T w_T + T_T w_P - T_B w_B - T_B w_P) + a_p T_p^\circ \end{aligned} \quad (23)$$

En la Ecuación 23 tenemos un sistema de ecuaciones con 7 incógnitas ($T_P, T_E, T_W, T_N, T_S, T_T, T_B$), cuya solución óptima requeriría de un algoritmo numérico con tiempos de cómputo considerablemente grandes (del orden semanas), junto con la disponibilidad de una memoria superior a la disponible (0.98 Gb de memoria RAM). Ante este problema se optó por adaptar el método de la matriz tridiagonal (TDMA, por su acrónimo TriDiagonal-Matrix Algorithm; Patankar 1980) a la solución del sistema de ecuaciones (Ec. 23). Para aplicar el modelo TDMA se determinan los cuatro elementos que lo forman (a,b,c,d):

$$a = a_p + F_x(u_E - u_W) + F_y(v_N - v_S) + F_z(w_T - w_B) + 2\lambda_x + 2\lambda_y + 2\lambda_z \quad (24)$$

$$b = \lambda_x - F_x(u_E + u_P) \quad (25)$$

$$c = \lambda_x + F_x(u_W + u_P) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} d = \lambda_y(T_N + T_S) + \lambda_z(T_T + T_B) - F_y(T_N v_N + T_N v_P - T_S v_S - T_S v_P) \\ - F_z(T_T w_T + T_T w_P - T_B w_B - T_B w_P) + a_p T_p^\circ \end{aligned} \quad (27)$$

y finalmente obtenemos la ecuación tridiagonal (ecuación 28) para cada volumen de control, generándose un sistema de ecuaciones que puede ser resuelto por el método TDMA.

$$aT_P = bT_E + cT_W + d \quad (28)$$

La ecuación discretizada de conservación de energía se resuelve en las tres direcciones. En el presente trabajo se presenta la discretización para la dirección x, sin embargo en el simulador desarrollado en este trabajo de tesis se ha aplicado mediante direcciones alternantes.

El algoritmo numérico TDMA ofrece la ventaja de ser un método implícito con un requerimiento de tiempo de cómputo significativamente corto y ofrece la ventaja de poder aplicarse para lograr una solución línea por línea (en direcciones

alternantes) en un plano k dado (Figura 2). De esta forma, al completar la solución en el plano k se analiza el plano siguiente $k+1$ y así sucesivamente hasta completar el dominio tridimensional total. Moya et al. (1995) reportaron que generar matrices tridiagonales y resolverlas por el método de direcciones alternantes mostró ser eficiente para estudios de convección. El criterio de convergencia es estricto. Por ejemplo, para el campo de temperaturas la convergencia se logra cuando en dos etapas sucesivas de solución los valores de temperatura normalizados no difieren en más de 1×10^{-4} .

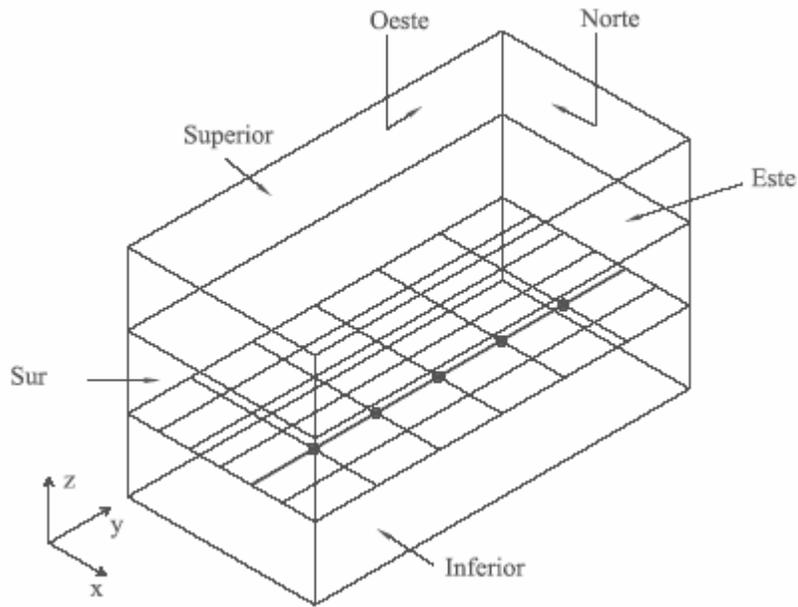


Figura 2. Aplicación del método TDMA en una geometría en tres dimensiones (modificado de Versteeg y Malalasekera, 1995).

Las condiciones iniciales y de frontera, tanto de temperatura como de velocidad se presentan en la Figura 3. En dicha figura se presentan las condiciones para dos dimensiones, sin embargo esto se hizo extensivo a las tres dimensiones.

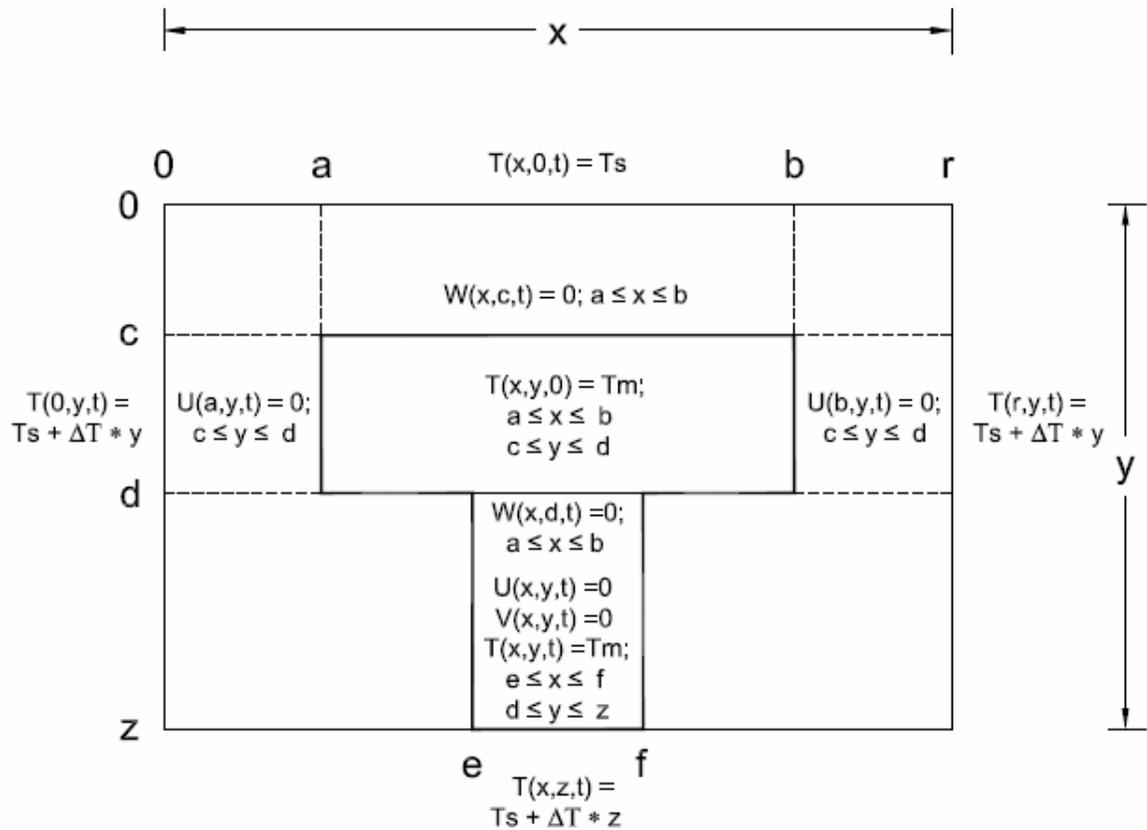


Figura 3 Condiciones iniciales y de frontera para el modelo de la cámara magmática en un plano, aclarándose que para su aplicación en el TCHEMSYS las condiciones son para las tres dimensiones.

Algunas de las apreciaciones más sobresalientes de estas condiciones en cuanto a temperatura son:

- Se considera que en la frontera superior la temperatura no cambia en el tiempo y es el promedio de la temperatura ambiental en la superficie ($T(x, 0, t) = T_s$).
- En las fronteras laterales, la temperatura depende linealmente de la profundidad (y) y del gradiente geotérmico del área bajo estudio (ΔT), así como de la temperatura en la superficie y no cambia en el tiempo ($T(0, y, t) = T_s + \Delta T * y$).
- En la frontera inferior, la temperatura no cambia en el tiempo y se determina con la ecuación siguiente, donde z es la profundidad total del dominio de simulación ($T(x, z, t) = T_s + \Delta T * z$).
- La temperatura inicial de emplazamiento del magma para toda la cámara es T_m .
- La temperatura inicial en todo el medio depende de la ecuación ($T(x, y, t) = T_s + \Delta T * y$).

Con respecto al campo de velocidades en 3D dentro de la cámara magmática se tiene que el campo cumple con la condición de conservación de masa. La velocidad fuera de la cámara y en sus fronteras se considera nula. Si se desea considerar la convección en el yacimiento, se ha supuesto un modelo similar de convección, dejándose para futuros trabajos el acoplar simuladores de yacimientos al presente.

Movimiento de magma

Mientras el magma permanece líquido se supone que existe un movimiento convectivo en la cámara magmática. Este movimiento provoca que la masa de un volumen de control (VC) pueda moverse hacia los volúmenes vecinos y a su vez recibir de otros. Cada VC tiene forma cúbica y tendrá 26 volúmenes vecinos (Figura 4). El magma dentro de cada VC tendrá sus componentes de velocidades (u, v, w) en las direcciones (x, y, z), respectivamente.

El aporte de masa de un VC sobre el central dependerá de que se conjuguen ciertas condiciones en cuanto a las direcciones de las componentes de velocidad. Los nodos en cuanto a su ubicación con respecto al central y de acuerdo a la Figura 4 se clasifican en VC de esquina, centrados en la cara, centrados en las aristas y central. El aporte de cada nodo con respecto al central se calcula mediante las siguientes ecuaciones:

VC de esquina

$$aporte = (u \cdot t)(v \cdot t)(w \cdot t) \quad (29)$$

VC centrados en la cara

$$VC_{(i+1, j, k), (i-1, j, k)} \quad aporte = (u \cdot t)(\Delta y - v \cdot t)(\Delta z - w \cdot t) \quad (30)$$

$$VC_{(i, j+1, k), (i, j-1, k)} \quad aporte = (\Delta x - u \cdot t)(v \cdot t)(\Delta z - w \cdot t) \quad (31)$$

$$VC_{(i, j, k+1), (i, j-1, k-1)} \quad aporte = (\Delta x - u \cdot t)(\Delta y - v \cdot t)(w \cdot t) \quad (32)$$

VC centrados en las aristas

$$VC_{(i+1, j+1, k), (i+1, j-1, k), (i-1, j+1, k), (i-1, j-1, k)} \quad aporte = (u \cdot t)(v \cdot t)(\Delta z - w \cdot t) \quad (33)$$

$$VC_{(i+1, j, k+1), (i-1, j, k-1), (i+1, j, k+1), (i-1, j, k-1)} \quad aporte = (u \cdot t)(\Delta y - v \cdot t)(w \cdot t) \quad (34)$$

$$VC_{(i, j+1, k+1), (i, j-1, k-1), (i, j+1, k+1), (i, j-1, k-1)} \quad aporte = (\Delta x - u \cdot t)(v \cdot t)(w \cdot t) \quad (35)$$

VC central

$$aporte = (\Delta x - u \cdot t)(\Delta y - v \cdot t)(\Delta z - w \cdot t) \quad (36)$$

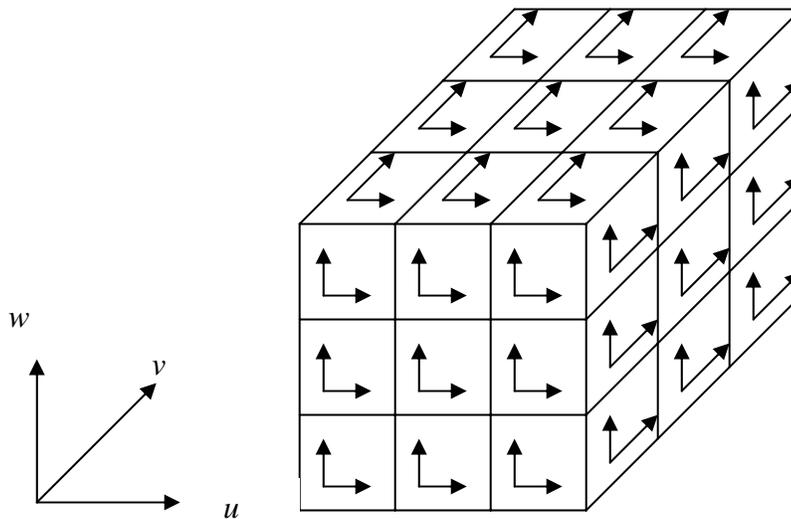


Figura 4 Diagrama que muestra los volúmenes de control vecinos (26) a uno central. Los componentes de la velocidad (u , v , w) se consideran positivos si están en el sentido indicado en la figura.

3.5 Algoritmo de solución

El algoritmo de solución consta de varios módulos que forman el simulador TCHEMSYS y se detallan a continuación siguiendo su arquitectura general, (Figura 1, Ap. E). Se describe a continuación cada uno de los módulos y se presentan además las características físicas y geológicas utilizadas para la simulación de la cámara magmática de Los Humeros.

3.5.1 Módulo HEAT FORMING

El objetivo de este módulo es simular el emplazamiento de la cámara magmática según el modelo geológico establecido para cada campo geotérmico bajo estudio. La simulación de esta etapa requiere la lectura de tres archivos de datos (boundary_conditions, emplacement_conditions, y mesh_construction; Figura 2a, Ap. E). Como condiciones de frontera se tiene la temperatura en la superficie (T_s en $^{\circ}\text{C}$). Las temperaturas en las fronteras norte, sur, este y oeste del dominio son obtenidas a partir del gradiente geotérmico local (ΔT_g en $^{\circ}\text{C}/\text{km}$) y la profundidad de cada nodo del dominio. Las condiciones iniciales del medio en el que se emplaza la cámara, se definen a partir del gradiente geotérmico y las condiciones de temperatura media en la superficie terrestre.

En cuanto a la geometría de la cámara, se supone que ésta tiene una forma cilíndrica con un volumen V_{cham} y con radio r_{cham} . A partir de estos datos, se calcula la altura h_{cham} de la misma cámara magmática. Asimismo se asume, de acuerdo con los resultados publicados por Prol y González-Moran (1982);

Fountain et al. (1989), y Oldenburg et al. (1989) la existencia de un conducto de forma cilíndrica en la base de la cámara (ver Figs. 4 y 5, Ap. E).

El dominio considerado en la simulación es de 30 km en la dirección norte – sur (N-S), 30 km en la este-oeste (E-W) y 20 km en la vertical. La malla de este dominio se logró mediante volúmenes de control cúbicos de 0.25 km de cada arista, lo que generó 120 nodos en las direcciones N-S, 120 en la dirección E-W, y 80 nodos en la sección vertical, teniéndose de esta forma un número total de 1,152,000 volúmenes de control.

Este dominio a su vez se dividió en capas horizontales de acuerdo con la geología del lugar. A cada capa geológica se le asignan las propiedades termofísicas de las rocas según los valores reportados en la literatura (p. ej., Contreras et al., 1990). Estas propiedades pueden variar espacialmente y también en función de la temperatura calculada en cada etapa de la simulación, para lo cual se emplearon correlaciones empíricas disponibles en la literatura especializada. El tiempo total de simulación para el emplazamiento de la cámara, así como los incrementos de tiempo usados para la simulación son proporcionados a través del archivo `emplacement_conditions`. El emplazamiento de la cámara se hace por capas horizontales, iniciándose en la parte centro de la cámara y en cada incremento de tiempo se agrega una capa de forma alternada (una arriba y después otra abajo) hasta completar su volumen total. A partir de la información geoquímica del área de estudio, se supone una temperatura de emplazamiento del magma como condición inicial.

Una vez formada la cámara se procede a calcular el campo de velocidades del magma en tres dimensiones (Fig. 5, Ap. E), el cual según trabajos previos pudiera tener una forma elíptica (Hansen y Yuen, 1990 y Oldenburg et al., 1990). El campo de velocidades calculado satisface las ecuaciones de conservación de momento. Los campos de temperatura y velocidad calculados en este módulo son almacenados en los archivos de salida `temperature.txt` y `velocity.txt`, respectivamente.

3.5.2 Módulo `BALANCE_MASS_FORMING`

Una vez que se tiene el valor de temperatura para cada uno de los nodos que forman la cámara magmática (96,000 nodos) se procede a calcular con este módulo la composición química de cada volumen de control. El modelo de evolución petrológica usado para obtener la cristalización fraccionada es el de Nielsen (1988). En este modelo se calculan las fases minerales formadas a partir del enfriamiento de un magma original. Las fases minerales y la composición del magma residual son función de la temperatura y de la composición química de magma original. Las fases minerales que se forman y de las cuales se calcula su porcentaje son olivino, plagioclasa, piroxenos, espinela, ilmenita y apatita. Para algunas de ellas se calcula la fracción de cada una de sus fases terminales como es el caso de los olivinos (forsterita y fayalita); plagioclasas (ortoclasa, albita y

anortita) y de los piroxenos (enstatita, wollastonita y ferrosilita). Para el cálculo de cada fase mineral, además del aporte de calor por su cambio de fase al cristalizar, se tomaron en cuenta: (i) los resultados del modelo de Nielsen (1988); (ii) los valores de los pesos atómicos de los óxidos mayores presentes en cada mineral (Verma et al., 2003), y (iii) las propiedades termofísicas y de densidad de estas especies minerales (Nicholls y Sout, 1982; Richet y Bottinga, 1984). Los resultados de este módulo son la composición del magma residual en cada volumen de control, la proporción de especies o fases minerales formadas, la proporción de magma residual y de sólidos formados y el aporte de calor al medio por cada volumen de control. Toda la información generada en este módulo se almacena en los archivos `chem_evolved.txt` y `heat_source.txt` (Figura 2b, Ap. E).

3.5.3 Módulo HEAT_CONVEC

Con este módulo se simula la evolución térmica en estado transitorio a partir de una cámara magmática. Para ello se utilizan los campos de temperaturas y velocidades obtenidos en el módulo descrito en la sección 3.5.1. Los archivos de entrada para este módulo son: `velocity`, `temperature`, `boundary_conditions`, `mesh_construction` y `heat_source`. En este módulo se calcula la transferencia de calor tanto por conducción como por convección en la cámara magmática y por conducción en la roca que la rodea. Se determina el campo de velocidades después de cada incremento de tiempo de simulación, según la proporción de la parte líquida del magma y de las propiedades físicas (densidad y temperatura) del magma. En este módulo se tiene la subrutina *sink* para tomar en cuenta el calor que se requiere para asimilar la roca que sobrepasa el punto de fusión. La salida de este módulo es un nuevo campo de temperaturas. El tiempo total de simulación para esta parte convectiva se determina cuando se han formado suficientes nodos que tengan la composición química del evento volcánico que da origen a la caldera en un campo geotérmico. Si no se logra lo anterior, la simulación se detiene cuando todos los nodos que forman la cámara han solidificado más del 40 % según lo propuesto por Kuritani (2004).

3.5.4 Módulo BALANCE_MASS_CONVEC

Este programa es similar al descrito en la sección 3.5.2 y con él se calcula para cada volumen de control las fracciones de sólidos y líquidos presentes, así como el aporte de calor por cristalización. La parte novedosa de este módulo es que incorpora el proceso de asimilación en la cámara de la roca que la contiene.

La composición de la fracción líquida (magma residual) se da mediante el porcentaje de sus 11 óxidos mayores (SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FeO , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O y P_2O_5). Esta composición es importante pues se utiliza para comparar con el evento eruptivo que dio origen a la caldera. Los valores de salida de este módulo son escritos en los archivos `chem_evolved.txt` y `heat_source.txt`. Uno de los aportes de este trabajo de tesis es el de poder unir la variable temperatura de cada volumen de control con la composición química del mismo en una cámara magmática considerando las tres dimensiones.

3.5.5 Módulo MOV_MAG_CONVEC

Con este módulo se calcula *in-situ* la composición química (elementos mayores) en tres dimensiones de cada uno de los volúmenes de control de la cámara magmática. Para calcular tal composición se toma en cuenta las componentes de la velocidad durante la convección en la cámara, así como el aporte de masa de los 26 volúmenes de control vecinos que rodean a cada uno de los centrales. En la ecuación 12 se presenta, a modo de ejemplo, el aporte de un nodo situado en una esquina $(i-1, j-1, k+1)$ sobre otro nodo central (i, j, k) :

$$S_{i-1, j-1, k+1} = fl_{i-1, j-1, k+1} \cdot |vx_{i-1, j-1, k+1}| \cdot |vy_{i-1, j-1, k+1}| \cdot |vz_{i-1, j-1, k+1}| \cdot \Delta t^3 \quad (37)$$

donde $fl_{(i-1, j-1, k+1)}$ es la fracción de líquido en el volumen de control $(i-1, j-1, k+1)$. Las variables vx , vy y vz son las componentes de la velocidad del movimiento del magma y Δt es el incremento de tiempo. Este módulo del programa TCHEMSYS es uno de los más novedosos, pues hasta donde se sabe, es el primer caso en el que se calcula la composición química de cada nodo de la cámara magmática de manera dinámica en tres dimensiones.

La salida de este módulo se escribe en el archivo chem_major_elements.txt y contiene la fracción de sólido y líquido, así como la composición química (11 óxidos mayores) de cada nodo, además se calcula la composición promedio de los minerales formados.

Es importante mencionar que los módulos descritos en las secciones 3.5.3 a 3.5.5 forman parte de un ciclo, el cual se repite mientras se tengan condiciones para que el magma se mueva. Durante este ciclo se espera que se cumplan las condiciones químicas de poder reproducir la química de las rocas eruptadas y que dieron lugar a la formación de la caldera.

3.5.6 Módulo NEWMESH_FORMING_ERUPT

Después de que se ha formado la caldera deben ser modificadas dos secciones del corte geológico con la ayuda del presente módulo. Primero la cámara magmática por dos razones: parte de ella a salido eruptada y además para considerar reinyección de magma en ella. La segunda sección a ser modificada es la parte que sobreyace a la cámara magmática, ya que el colapso caldérico modifica su distribución espacial. Debido a lo anterior, se modifica la distribución de las temperaturas de los nodos que se han movido, conjuntamente con sus correspondientes propiedades termofísicas. Los archivos temperature.txt, emplacement_conditions.txt y mesh_modification.txt son los archivos de entrada de este módulo y temperature.txt y mesh_modification.txt los de salida.

3.5.7 Módulo HEAT_CONDUCT

Con este módulo se calcula la distribución de temperaturas por conducción en todo el dominio tridimensional considerado en la simulación. Esta parte de la simulación se considera para la etapa en que la cámara ya está solidificada. Se puede considerar en este módulo condiciones de reinyección de magma en la cámara.

3.5.8 Módulo HEAT_RESERVOIR_CONVEC

Este módulo toma en cuenta la transferencia de calor por conducción en todo el dominio y además considera la convección en el yacimiento. Para considerar la transferencia de calor por convección en el yacimiento se requiere un trabajo detallado y profundo como el que realizaron Royer y Flores (1994) y Moya et al. (1995). Sin embargo, en el presente trabajo sólo se considera un modelo análogo de convección al utilizado en la cámara magmática.

Los valores de temperaturas obtenidos en esta simulación pueden ser comparados a modo de validación con las temperaturas mediadas en los pozos geotérmicos (Luheshi, 1983; Drury 1984; Shen y Beck, 1986; Cao et al., 1988; Deming y Chapman, 1988; Kutasov et al., 1988; Deming, 1989; Hermanrud et al., 1990; Nielsen et al., 1990; Wilhelm, 1990, 2000; Hasan y Kabir, 1991, 1994; Prensky, 1992; Santoyo et al., 2000; Kutasov, 2003; Kutasov y Eppelbaum, 2005; Fomin et al., 2003; Andaverde et al., 2005; Verma et al., 2006b, c). Para la ubicación de las zonas de convección se utiliza la información reportada de pozos en un determinado campo geotérmico bajo estudio. Los archivos de entrada para este módulo son aquellos que contengan las condiciones iniciales y de frontera y tenemos como salida el campo de temperaturas en el dominio de simulación.

3.6 Arquitectura del simulador

El simulador TCHEMSYS fue desarrollado en Fortran 90 y consiste de los 8 módulos descritos en la sección 3.5. En la Figura 1 (Ap. E) se presenta la arquitectura del simulador. Después de introducir los archivos que contienen las condiciones iniciales, de frontera y de generación de malla, se calcula la evolución térmica y química de la cámara desde su emplazamiento hasta el tiempo actual. Los resultados son almacenados en archivos tipo binarios que posteriormente pueden analizarse y visualizarse mediante algún paquete estadístico y/o de graficación.

Para resolver los problemas de memoria se siguieron dos estrategias combinadas. La primera utilizar memoria dinámica en FORTRAN, y la segunda correr por lotes los módulos empleando Visual Basic Script. El simulador TCHEMSYS puede ser ejecutado en una computadora personal (PC) con los requerimientos mínimos siguientes: 0.98 Gb de memoria RAM, con un procesador

de 2.40 GHz y un disco duro de 80 Gb. Con las características del equipo antes mencionadas, el tiempo requerido para una simulación es de aproximadamente seis horas. Este programa es probablemente uno de los primeros, hasta nuestro conocimiento el pionero, que combina la simulación térmica y química en 3D durante la evolución de una cámara magmática.

3.7 Validación

Se realizó la validación del programa en forma particular para cada una de las subrutinas que calculan el campo de velocidades, la transferencia de calor por conducción y la de conservación de masa en el movimiento del magma en la cámara. Para el campo de velocidades se compararon estadísticamente los resultados obtenidos con los publicados por Baïri (2003) y se encontró que no existen diferencias significativas entre los valores reportados en el trabajo antes citado y los obtenidos en el presente (Figura 5). Para el balance de masa en un volumen de control se requiere el campo de velocidades por lo que el porcentaje de error en dicho balance es un indicador de la validez del campo de velocidades determinado. Se calculó el balance de masa de cada volumen de control que forma parte de la cámara magmática. Se encontró que el error máximo en dicho balance es de 8.1% , ~3.2 % y de ~1.9 % para mallas con aristas de 1 km, 0.5 km y 0.25 km, respectivamente. Lo anterior indica que el campo de velocidades calculado es aceptable y que la ecuación de continuidad se cumple.

Otro aspecto es el de determinar la dependencia del incremento o delta de tiempo de simulación y los resultados obtenidos. Para realizar lo anterior se simuló la transferencia de calor durante 50 mil años con incrementos que varían de 10 a 5000 años, encontrándose que el error normalizado es menor al 1.5 %. En dicho estudio también se determinó el tiempo de cómputo requerido para cada simulación según el incremento de tiempo y en la Figura 6 se muestran los resultados obtenidos.

También se realizó la validación del módulo MOV_MAG_CONVEC donde se simula el aporte de magma diferenciado de los volúmenes vecinos a uno central. En este caso se calcula la diferencia entre el volumen de magma que entra en cada volumen de control y el que sale, esto para cada paso de tiempo. El error normalizado no sobrepasa el 1%, por lo que se asume que el módulo de movimiento de magma para calcular la composición química de un volumen de control fue desarrollado correctamente.

Para validar el programa de transferencia de calor en lo referente a la conducción se comparan los resultados obtenidos del simulador con los reportados por Jaluria y Torrance (1986), no encontrándose diferencias significativas entre ambos perfiles.

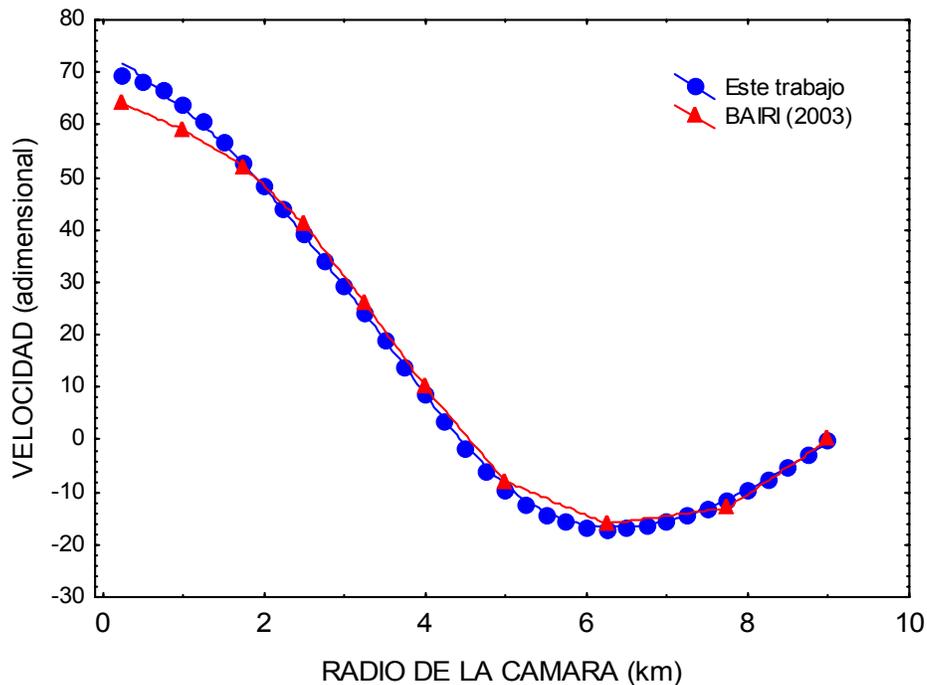


Figura 5 Comparación de las velocidades obtenidas en el presente trabajo y las reportadas por Bairi (2003). No se observan diferencias significativas por lo que se considera que el campo de velocidades es adecuado.

Durante las diferentes corridas se cumplió con dos criterios comúnmente utilizados para la convergencia en problemas de transferencia, el número de Peclet ($Pe = v\Delta x / \Gamma$) y el número de Courant ($C = v\Delta t / \Delta x$). Para el caso del número de Peclet su valor es menor que 2, para el caso del número de Courant menor que 1.

De manera global, tal y como se presenta en la siguiente sección, se validó el programa TCHEMSYS al obtenerse resultados tanto térmicos como químicos que no muestran diferencias significativas con los valores medidos en el fondo de los pozos (temperaturas) y en las rocas del campo bajo estudio, respectivamente.

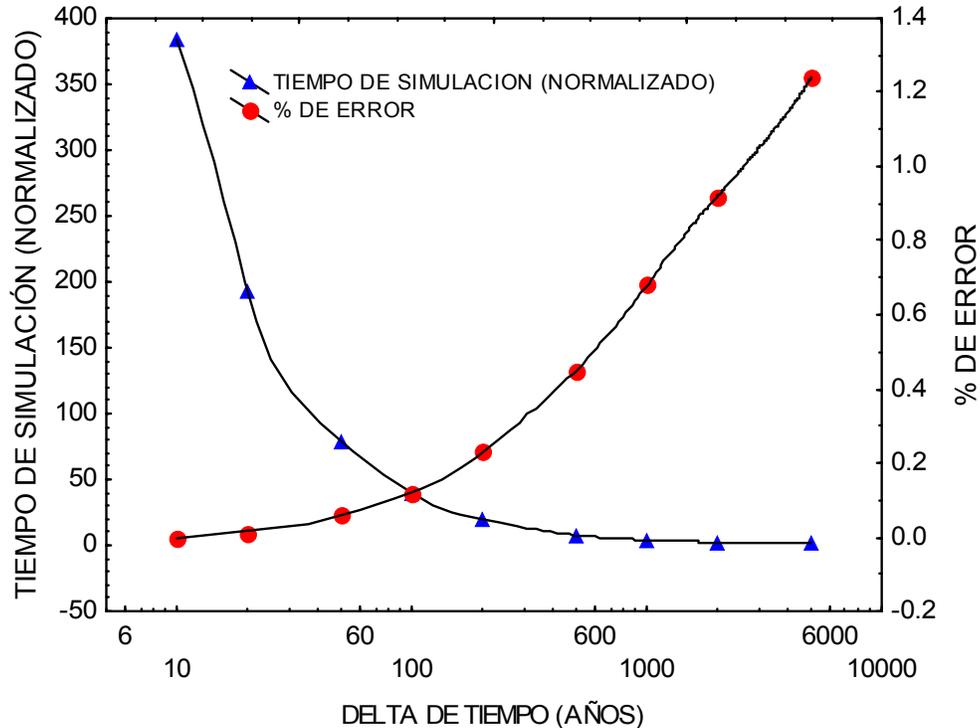


Figura 6. Gráfica de incremento o delta de tiempo contra el tiempo de simulación. Se presenta también la curva entre el incremento de tiempo y el % de error. En cuanto a este porcentaje se observa que es menor al 1.5 %. De esta grafica se puede determinar que el tiempo óptimo para futuras simulaciones es de incrementos de 100 años, ya que se tendrían tiempos de cómputo cortos y errores menores al 0.2 %.

3.8 Aplicación: Simulación de la evolución térmica y química en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla

Como se mencionó anteriormente, el CVM es una región volcánica activa con amplio potencial de generación de energía eléctrica asociado a los recursos térmicos del subsuelo. En el CVM se localiza el campo geotérmico de Los Humeros (CGLH), ubicado en el estado de Puebla, aproximadamente a $97^{\circ} 25'$ de longitud Oeste y $19^{\circ} 40'$ de latitud norte. Actualmente se producen en este campo 25 MW según lo reportado por La Comisión Federal de Electricidad en su sitio www.cfe.gob.mx (accesado el día 4 de octubre del 2006). La importancia del CGLH lo demuestra la serie de trabajos de múltiples disciplinas realizados sobre dicho campo: geológicos (Pérez- Reynoso, 1979; Ferriz, 1985; Cedillo-Rodríguez, 2000; Carrasco-Núñez y Branney, 2005); geoquímica de rocas (Verma y Lopez M., 1982; Verma, 1983, 1984, 1985, 2000; Ferriz, 1985; Ferriz y Mahood, 1987); geocronología (Ferriz y Mahood, 1984); geofísica (Flores- L. et al., 1978; Mena y González-Morán, 1978; Alvarez, 1978; Ponce y Rodríguez, 1978; González-Morán

y Suro-Pérez, 1982; López-Mendiola y Munguía- Bracamontes, 1987; Campos-Enríquez y Arredondo-Fragoso, 1992; Campos-Enríquez et al., 2005); geoquímica de fluidos (Tello-Hinojosa, 1992a); alteración hidrotermal (Arnold y González-Partida, 1986, 1987; Arnold et al., 1986; Viggiano-G. Y Quijano-L., 1989; Martínez-Serrano y Alibert, 1994; Martínez-Serrano, 2002; Bienkowski et al., 2005); propiedades termofísicas de rocas (Contreras et al., 1990); propiedades en pozos (Campos-Enríquez y Durán- M., 1986; Medina-Martínez, 2000); y estudios del yacimiento (Ferriz, 1982; Torres- M., 1988, 1995; López-Mendiola y Munguía-B., 1989; Medina et al., 1989; Barragan et al., 1991; Tello-Hinojosa, 1992b; Portugal et al., 2002). Como ya se reseñó anteriormente, también se han realizado una serie de trabajos sobre modelación térmica en dicho campo (Prol y González-Moran, 1982; Verma et al., 1990; Castillo-Román et al., 1991).

Para la construcción de la sección geológica de la Figura 7 (Ap. E) se tomó en cuenta toda la información de los trabajos antes mencionados. Con esta información se pudo reconstruir la historia eruptiva del CGLH y se ligó estrechamente a las simulaciones realizadas en el presente trabajo. Los rasgos más importantes del modelo geológico utilizado son: 20 km en la dirección norte - sur, 30 km en la dirección este – oeste y 30 km en la dirección vertical (profundidad), lo que nos da un dominio espacial de simulación de $18,000 \text{ km}^3$ de volumen total. Le sección esta compuesta en la parte inferior de 17 km de rocas intrusivas; esto inferido de la información obtenida de los modelos gravimétricos (Campos-Enríquez y Arredondo-Fragoso 1992; Campos-Enríquez et al., 2005, entre otros). Le sobreyace una capa de un km de calizas mesozoicas y sobre estas un km de rocas volcánicas (andesitas). Por último, sobre estas se encuentra una capa de ignimbritas y tobas de aproximadamente 1 km.

La forma de los volúmenes de control utilizados es cúbica con aristas de 0.25 km, lo que se transforma, para nuestro dominio en el CGLH en 1,152,000 volúmenes de control. En cuanto a las condiciones de frontera se considera en la superior temperatura de $25 \text{ }^\circ\text{C}$ y para los lados verticales y el fondo un gradiente de $30 \text{ }^\circ\text{C/km}$. Para las condiciones iniciales se supuso un mapa de temperaturas a partir de la temperatura en la frontera superior y el gradiente antes citado.

En cuanto a la cámara magmática se supuso forma cilíndrica, con un volumen total de 1500 km^3 , un radio de 9 km y una altura de $\sim 6 \text{ km}$ (Verma, 1985). La profundidad de la parte superior de la cámara se estableció en 5 km basado en los datos geológicos y geofísicos existentes del área de estudio. La temperatura de emplazamiento del magma fue de $1320 \text{ }^\circ\text{C}$ y se basó en los trabajos de Ferriz (1985) y Ferriz y Mahood (1987) y en los resultados de la simulación de la cristalización fraccionada utilizando el modelo de Nielsen (1988). El emplazamiento de magma fue por capas (un total de 24 capas) hasta completar el volumen total de la cámara.

Las propiedades termofísicas de las rocas (conductividad y difusividad térmica), así como densidad fueron tomadas del trabajo de Contreras et al. (1990) y de una base de datos mundial construida durante el desarrollo del presente

trabajo para este propósito. Los valores de las propiedades termofísicas de las rocas se establecieron en función de la temperatura según el modelo propuesto por Carslaw y Jaeger (1959) y los valores para las constantes de dicho modelo fueron tomados del trabajo de Dubois et al. (1995). Sin embargo, en el programa de simulación se pueden seleccionar entre un total de cinco modelos que relacionan la dependencia de la conductividad térmica con la temperatura (Seipold y Huenges, 1988; Furlong et al., 1991; Bonneville y Capolsini, 1999; Jokinen y Kukkonen, 1999). Las entalpías de fusión utilizadas para el cálculo del aporte de calor por cristalización de minerales o del sumidero de calor debido a la fusión de la roca asimilada por la cámara son las mostradas en la Tabla 3 (Ap. E). Estos valores fueron tomados de los trabajos de Nicholls y Stout (1982); Akaogi et al. (2004), y Kijitani y Akaogi (1997).

El tiempo de simulación se estima según las dataciones de las rocas del área de estudio. Los incrementos de tiempo pueden ser de fracciones hasta miles de años. En cuanto al modelo de velocidades se ha determinado para una geometría cilíndrica (cámara magmática) y en el se supone que el magma asciende por la parte central de la cámara y a medida que se acerca a la parte superior de la cámara las líneas de flujo tienden a incrementar sus valores horizontales y a disminuir los verticales. Después el magma tiende a bajar, invirtiéndose la relación entre las componentes verticales y horizontales (ver Figura 5, Ap. E). Los valores de velocidad máxima obtenidos son del orden de 5×10^{-7} m/s y tienden a ser cero a medida que los nodos se encuentran cerca del contacto lateral de la cámara con el medio geológico que la contiene.

El tiempo supuesto para el emplazamiento de la cámara es de 1000 años y mientras este tiene lugar se calcula el campo de temperaturas solamente por conducción. Al terminar de emplazarse la cámara se calculó el campo de velocidades en tres dimensiones. La información utilizada para las simulaciones está contenida en la Tabla 1 del Ap. E.

Se tomó como la química del magma menos diferenciado la muestra HF117 (Verma, 1983), ya que contiene el mayor valor del número de magnesio de las rocas del CGLH. En cuanto a la roca asimilada se consideró la química del granito reportado por Verma (2000). La erupción de la ignimbrita Xáltipan dio origen a la caldera de Los Humeros, por lo que es importante reproducirla durante las simulaciones térmicas y químicas. La composición promedio de esta ignimbrita se obtiene de los análisis reportados por Ferriz (1985) y Verma (1983, 2000).

4.- RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES TÉRMICA Y QUÍMICA EN EL CGLH

El simulador TCHMSYS fue utilizado para modelar la evolución tanto térmica como química en forma acoplada en el CGLH. A continuación se detallan algunos de los resultados más importantes obtenidos en dichas simulaciones.

4.1 Simulación térmica

Dentro de los resultados más relevantes en cuanto a la simulación térmica tenemos que se ha podido construir un simulador para calcular la distribución espacial y temporal del campo de temperaturas a partir de una cámara magmática. Este simulador puede tomar en cuenta varios mecanismos de transferencia de calor y algunos procesos petrológicos que dominan la evolución de una cámara.

Entre los mecanismos de transferencia de calor se implementó el de conducción en tres dimensiones para todo el dominio de simulación y el de convección para la cámara y el yacimiento. La convección se tomó en cuenta en la etapa inicial de la cámara (primeros 50 mil años después de emplazarse) y para la etapa final de la simulación en el yacimiento (últimos 20 mil años).

Las isothermas obtenidas en el presente trabajo (de 200 °C a 600 °C) reproducen los valores de las temperaturas estabilizadas de formación (TEF) de los pozos geotérmicos del CGLH (ver Figura 10b, Ap. E). Las TEF fueron calculadas mediante la metodología propuesta en el Ap. A.

Durante la simulación térmica se han supuesto dos conductos en la parte superior de la cámara. Estos conductos son apoyados por los estudios gravimétricos (Campos-Enríquez y Durán-M. 1986) y térmicos (Verma et al. 1990; Castillo-Román et al. 1991). En el presente trabajo dichos conductos fueron incluidos en la sección geológica y se confirma que son necesarios a fin de poder reproducir las temperaturas de los pozos del CGLH. Otro de los aspectos térmicos incluidos en la simulación es la convección en el yacimiento y en algunas zonas entre 1000 y 2000 metros de profundidad. La convección se simuló para los últimos 20 mil años de la simulación. Para la ubicación de las zonas de convección se tomaron en cuenta los resultados de los trabajos de yacimientos realizados en el CGLH (p.e Arredondo-Fregoso, 2000). En cuanto a los valores de permeabilidad se consideraron bajos según lo reportan Ascencio (1987), López-Mendiola y Munguía-B. (1989) y Tovar-Aguado y López-Romero (2000).

4.2 Simulación química

La ignimbrita Xáltipan fue la unidad volcánica más voluminosa **eruptada** y que formó la caldera en el CGLH. Esta erupción tuvo lugar hace 0.48 m.a. Las simulaciones han permitido establecer que el tiempo necesario para que el magma evolucione químicamente desde su emplazamiento hasta igualar a la composición de la Ignimbrita Xáltipan es de 26 mil años, lo que nos permite establecer que el emplazamiento de la cámara fue hace no menos de 0.506 m.a.

En la Figura 8 (Ap. E) se muestra el esquema geológico después de la erupción de la ignimbrita Xáltipan. Para simular esta erupción se extrajeron de la cámara 115 km³ de magma diferenciado. Para compensar dicha salida de

material ígneo se supuso una **reinyección** de magma en la cámara de $\sim 65 \text{ km}^3$. Esta reinyección se basa en el hecho de que por el volumen erupcionado se esperaría un colapso mayor al registrado en las perforaciones de los pozos. Cabe aclarar que el magma que ha salido a la superficie corresponde a magma que se ha diferenciado por **cristalización fraccionada** y el magma reinyectado ha quedado dentro de la cámara.

Se simuló la evolución química de la cámara magmática y se ubicaron los volúmenes de control dentro de ella que presentan composición química similar a la ignimbrita Xáltipan (Figura 9, Ap. E). La comparación entre la química simulada en cada volumen de control y la roca de referencia (ignimbrita Xáltipan) se hizo estadísticamente a un nivel de confianza de 99 %. Los resultados presentados en la Figura antes mencionada corresponden a cuatro de los óxidos mayores (SiO_2 , Al_2O_3 , MgO y CaO). Para igualar el volumen de nodos dentro de la cámara con los de la ignimbrita Xáltipan fue necesario tomar en cuenta la **asimilación** de rocas graníticas en la cámara durante la simulación.

Se observa en la Figura 9 (Ap. E) la distribución de los nodos cuyo magma ha evolucionado (diferenciado) hasta empatar con la Ignimbrita Xáltipan. En modelos anteriores se suponía una cámara magmática diferenciada de manera estratificada, lo que hacía suponer que el magma más diferenciado se encontraba mayoritariamente en el estrato superior de la cámara. De nuestros resultados se puede observar que los nodos diferenciados se encuentran tanto en las orillas de la cámara (cerca de la roca encajonante), así como en algunas zonas centrales de la cámara. La distribución de los nodos diferenciados sigue un patrón semejante a las celdas de **convección**, por lo que se concluye que el movimiento de magma tiene una influencia importante en la distribución del magma diferenciado.

En las simulaciones se supuso que la fase líquida y sólida del magma en la cámara se mueven a la misma velocidad, sin embargo, se debe de implementar el movimiento separado de las fases lo que implica una modelación de fluido bifásico y conocer las propiedades de viscosidad de los minerales en el magma y para esto es necesario su tamaño y forma.

El desarrollo del programa para simular la distribución y evolución de un magma en una cámara en tres dimensiones TCHEMSYS constituye el objetivo medular del presente trabajo de tesis. El poder involucrar durante las simulaciones los procesos de cristalización fraccionada, asimilación, reinyección y eyección de magma en una cámara ha sido el resultado de combinar la información generada por las diferentes áreas de las Ciencias de la Tierra. El modelo petrológico que explique el comportamiento de una cámara es complejo, sin embargo el presente estudio contribuye a refinar los ya existentes y contribuyó a plantear de manera más realista los procesos fisico-químicos en una cámara magmática.

5.- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

De los estudios de simulación numérica en el CGLH se puede concluir en cuanto al simulador desarrollado, lo siguiente:

- a) Se ha podido desarrollar un simulador llamado TCHEMSYS. Con el se ha simulado la evolución acoplada tanto térmica como química de una cámara magmática. Este simulador fue desarrollado en Fortran 90 y consiste de ocho módulos. Para su ejecución se utiliza Visual Basic Script.
- b) En el programa se incorpora el proceso de asimilación por parte de la cámara de la roca que la rodea. La asimilación se toma en cuenta tanto térmica como químicamente. Se concluye que la asimilación tiene lugar en la etapa inicial de la evolución de la cámara y equivale al 4 % del volumen de la cámara (~60 km³ de roca asimilada).
- c) En trabajos anteriores se consideraba que una cámara magmática se diferenciaba de forma estratificada, obteniéndose en este trabajo que la distribución química de los elementos dentro de la cámara sigue el patrón de movimiento del magma, por lo que podemos tener magma diferenciado en diferentes zonas de la cámara a lo largo de las celdas de convección.
- d) Se pudo calcular *in-situ* la composición química de cada uno de los nodos de la cámara, siendo esta la primera vez que se logra saber la composición del magma contenido en la cámara en forma discretizada (tridimensional) y no global (adimensional) como se había realizado hasta la fecha. Lo anterior permite saber que parte de la cámara es la eruptada durante un evento volcánico.
- e) EL simulador TCHEMSYS permite reproducir el campo de velocidades en una cámara magmática. Este campo fue desarrollado y validado según los resultados observados en trabajos internacionales publicados.

En cuanto a la aplicación del simulador TCHEMSYS a la cámara magmática del Campo Geotérmico de Los Humeros, las conclusiones obtenidas son las siguientes:

- a) Se ha logrado reproducir, mediante las simulaciones, la química de la ignimbrita Xáltipan. Las condiciones para reproducirlas es que se requiere un tiempo mínimo de 25 mil años después del emplazamiento de la cámara, considerar la convección del magma y la asimilación de una roca granítica encajonante.
- b) Se han podido reproducir mediante la simulación las temperaturas actuales en los pozos del CGLH. Para lograr lo anterior se requirió considerar la convección en el yacimiento para los últimos 20 mil años de la simulación.

Las recomendaciones sobre futuros trabajos en esta línea de la simulación térmica tenemos:

- a) Simular otros campos geotérmicos mediante el TCHEMSYS.
- b) Probar nuevos modelos de evolución química de magma para acoplarlos al simulador TCHEMSYS.
- c) Considerar el movimiento por separado del magma (líquido) y de los minerales (sólido) en una cámara. Esto nos permitiría estimar la sedimentación o flotación de minerales en la cámara.
- d) Modificar el programa a fin de que se consideren automáticamente las variaciones en cuanto a forma y ubicación de la cámara, esto nos permitiría determinar las mejores condiciones para reproducir las temperaturas medidas en los pozos, así como la química de las rocas.
- e) Anexar módulos al programa para poder considerar eventos eruptivos pequeños, pues en este trabajo sólo se ha considerado el principal que formó la caldera de Los Humeros (ignimbrita Xáltipan).

REFERENCIAS

- Akaogi, M., Yano, M., Tejima, Y., Iijima, M., Kojitani, H., 2004. High-pressure transitions of diopside and wollastonite: phase equilibria and thermochemistry of $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$, CaSiO_3 and CaSi_2O_5 - CaTiSiO_5 system. *Physics of the Earth and Planetary Interior* 143-144, 145-156.
- Albaréde, F., 1995. Introduction to geochemical modeling. Cambridge University Press, Cambridge.
- Álvarez, R., 1978. Telluric, self-potential, and surface temperature profiles on Los Humeros caldera. *Geofísica Internacional* 17, 445-460.
- Andaverde, J., Verma, S. P., Santoyo, E., 2005. Uncertainty estimates of static formation temperatures in boreholes and evaluation of regression models. *Geophysical Journal International* 160, 1112-1122.
- Andaverde, J., Verma, S. P., Shildknecht, F., 1993. Aporte de calor por cristalización fraccionada en dos campos geotérmicos del Cinturón Volcánico Mexicano. *Geofísica Internacional* 32, 331-339.
- Anguita, F., Verma, S. P., Márquez, A., Vasconcelos-F., M., López, I., Laurrieta, A., 2001. Circular features in the Trans-Mexican Volcanic Belt. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 107, 265-274.
- Arnold, M., Gonzalez Partida, E., 1986. Capacités oxydantes d'un fluide hydrothermal en ébullition. *Comptes Rendus de L Academie des Sciences du Paris* 303, 817-820.
- Arnold, M., González Partida, E., 1987. Le système hydrothermal actuel de Los Humeros (Mexique): etat du système SO_4^{--} — SH_2 à 300 °C, origine du soufre et phénomènes d'oxydation associés à l'ébullition du fluide ascendant. *Minerallium Deposita* 22, 90-98.
- Arnold, M., González Partida, E., Munguia Bracamontes, F., 1986. Le système sulfate-sulfure: preuves d'un équilibre chimique et isotopique à 300 °C; conséquences géochimiques. *Comptes Rendus de L Academie des Sciences du Paris* 303, 1097-1099.
- Arredondo_fragoso, J., 2000. Interpretación geofísica de una sección sísmica de reflexión con dirección E-W en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 16, 17-22.
- Ascencio, F., García, A., Rivera, J., Arellano, V., 1994. Estimation of undisturbed formation temperatures under spherical-radial heat flow conditions, *Geothermics* 23, 317-326.
- Ascencio, F., 1987. Análisis de sensibilidad para la generación de 55 MW del yacimiento geotérmico de Los Humeros, Puebla. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 3, 77-92.
- Baïri, A., 2003. Transient natural 2D convection in a cylindrical cavity with the upper face cooled by thermoelectric Peltier effect following an exponential law, *Applied Thermal Engineering* 23, 431-447.
- Barragán, R.M., Nieva, D., Santoyo, E., González, E., Verma, M.P. López-M., J.M., 1991. Geoquímica de fluidos del campo geotérmico de Los Humeros (México) *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 7, 23-47.
- Beardsmore, G.R., Cull, J.P., 2001. Crustal Heat Flow. Cambridge University Press. Harlow, USA.

- Bevington, P.R., Robinson, D.K., 2003. Data reduction and error analysis for the physical sciences. Mc Graw Hill, New York, 336 pp.
- Bienkowski, R., Torres-Alvarado, I. S., Hinderer, M., 2005. Geochemical modeling of acid fluids in Los Humeros geothermal field, Mexico. Paper presented at the Proceedings World Geothermal Congress 2005, Antalya, Turkey, 2005.
- Bohrson, W. A., Spera, F. J., 2001. Energy-constrained open-system magmatic processes II: application of energy-constrained assimilation - fractional crystallization (EC-AFC) model to magmatic systems. *Journal of Petrology* 42, 1019-1041.
- Bohrson, W. A., Spera, F. J., 2003. Energy-constrained open-system magmatic processes IV: geochemical, thermal and mass consequences of energy-constrained recharge, assimilation and fractional crystallization (EC-RAFC). *Geochemistry Geophysics Geosystems* 4, 8002, doi:10.1029/2002GC000316.
- Bonneville, A., Capolsini, P., 1999. THERMIC: a 2-D finite element tool to solve conductive and advective heat transfer problems in earth sciences. *Computers & Geosciences* 25, 1137 - 1148.
- Brennand, A.W., 1984. A new method for the analysis of static formation temperature test, Proc. 6th New Zeland Geothermal Workshop, New Zeland. 45-47.
- Campos E., J. O., Durán M., F., 1986. Determinación preliminar del campo de temperaturas en Los Humeros, Pue. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 2, 141-152.
- Campos-Enríquez, J. O., Arredondo-Fragoso, J. J., 1992. Gravity study of Los Humeros caldera complex, Mexico: structure and associated geothermal system. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 49, 69-90.
- Campos-Enríquez, J. O., Domínguez-Méndez, F., Lozada-Zumaets, M., Morales-Rodríguez, H. F., Andaverde-Arredondo, J. A., 2005. Application of the Gauss theorem to the study of silicic calderas: the calders of La Primavera, Los Azufres, and Los Humeros (Mexico). *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 147, 39-67.
- Cao, S., Lerche, I., Hermanrud, C., 1988. Formation temperature estimation by inversion of borehole measurements. *Geothermics* 53, 979-988.
- Carrasco-Núñez, G., Branney, M. J., 2005. Progressive assembly of a massive layer of ignimbrite with a normal-to-reverse compositional zoning: the Zaragoza ignimbrite of central Mexico. *Bulletin Volcanologique*. 68, 3-20.
- Carslaw, H.S., Jaeger, J.C. 1959. Conduction of heat in solids. Oxford University Press. London.
- Castillo-Román, J., Verma, S. P., Andaverde, J., 1991. Modelación de temperaturas bajo la caldera de Los Humeros, Puebla, México, en términos de profundidad de la cámara magmática. *Geofísica Internacional* 30, 149-172.
- Cedillo-Rodríguez, F., 2000. Geología del subsuelo del campo geotérmico de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 16, 7-16.
- Contreras L., E., Domínguez A., B., Rivera M., O., 1990. Mediciones petrofísicas en núcleos de perforación del campo geotérmico Los Humeros. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 6, 9-42.

- Correia, A., Safanda, J., 2001. Ground surface temperature history at a single site in southern Portugal reconstructed from borehole temperature. *Global and Planetary Change* 29, 155-165.
- Currie, I. G., 1993. *Fundamental mechanics of fluids*. Boston, McGraw Hill.
- Da-Xin, L. Non-linear fitting method of finding equilibrium temperature from BHT data. *Geothermics* 1986, 657-664.
- Deming, D., 1989. Application of bottom-hole temperature corrections in geothermal studies. *Geothermics* 18, 775-786.
- Deming, D., Chapman, D. S., 1988. Inversion of bottom hole temperature data: the Pineview field, Utah-Wyoming thrust belt. *Geophysics* 53, 707-720.
- Devlin, J.F., Eedy, R., Butler, B.J., 2000. The effects of electron donor and granular iron on nitrate transformation rates in sediments from a municipal water supply aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology* 46, 81-97.
- Dickin, A.P., 1995. Radiogenetic isotope geology. Cambridge University Press, Cambridge.
- Dowdle, W.L., Cobb, W.M., 1975. Static formation temperature from well logs - An empirical method. *Journal of Petroleum Technology* 11, 1326-1330.
- Drury, M. J., 1984. An a possible source of error in extracting equilibrium formation temperatures from borehole BHT data. *Geothermics* 13, 175-180.
- Dubois, M., Flores-Marquez, L., Royer, J. J., 1995. Numerical evaluation of pressure and temperature effects on thermal conductivity: implications for crustal geotherms. *Geofísica Internacional* 34, 377-384.
- Feczko, T., Marton, A., Molnár, A., Szentes, G., 2005. Estimation of uncertainty of direct radiative forcing of the aerosol for a rural site in central Europe. *Atmospheric Environment* 39, 7127-7136.
- Ferriz, H., 1982. Geologic and preliminary reservoir data on the Los Humeros geothermal system, Puebla, Mexico. Paper presented at the Proceedings Eighth Workshop Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California, 1982.
- Ferriz, H., 1985. Zoneamiento composicional y mineralógico en los productos eruptivos del centro volcánico de Los Humeros, Puebla, México. *Geofísica Internacional* 24, 97-157.
- Ferriz, H., Mahood, G. A., 1984. Eruption rates and compositional trends at Los Humeros volcanic center, Puebla, Mexico. *Journal of Geophysical Research* 89, 8511-8524.
- Ferriz, H., Mahood, G. A., 1987. Strong compositional zonation in a silicic magmatic system: Los Humeros, Mexican Neovolcanic Belt. *Journal of Petrology* 28, 171-209.
- Flores L., C., Álvarez, R., Singh, S. K., Urrutia, J., 1978. Aeromagnetic survey of Los Humeros caldera, Mexico. *Geofísica Internacional*, 17, 415-428.
- Fomin, S., Chugunov, V., Hashida, T., 2003. Analytical modelling of the formation temperature stabilization during the borehole shut-in period. *Geophysical Journal International* 155, 469-478.
- Fountain, J. C., Hodge, D. S., Shaw, R. P., 1989. Melt segregation in anatectic granites: a thermo-mechanical model. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 39, 279-296.

- Furlong, K.P., Hanson, R.B., Bowers, J.R., 1991. Modeling thermal regimes. *Review of Mineralogy* 26, 437-506.
- García-Estrada, G.H., 2000. Modelado del estado térmico inicial del campo geotérmico de Los Azufres, Michoacán, Mexico. Tesis Doctoral, UNAM, México.
- García-Valladares, O., Pérez-Segarra, C.D., Rigola, J., 2004. Numerical simulation of double-pipe condenser and evaporators. *International Journal of Refrigeration* 27, 656-670
- García-Valladares, O., Sánchez-Upton, P., Santoyo, E., 2006. Numerical modeling of flow processes inside geothermal wells: an approach for predicting production characteristics with uncertainties. *Energy Conversion Management* 47, 1621-1643.
- Giberti, G., Sartoris, G., 1989. Evaluation of approximations in modeling the thermal history of a volcanic area. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 36, 233-240.
- Giberti, G., Moreno, S., Sartoris, G., 1984a. Evaluation of approximations in modelling the cooling of magmatic bodies. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 20, 297-310.
- Giberti, G., Moreno, S., Sartoris, G., 1984b. Thermal history of Phlegraean fields (Italy) in the last 50,000 years: a schematic numerical model. *Bulletin Volcanologique* 47, 331-341.
- González-Morán, T., Suro-Pérez, V., 1982. Obtención de parámetros físicos de las estructuras principales localizadas en la caldera de los Humeros, Puebla. *Geofísica Internacional* 21, 57-68.
- Gorbatov, A., Kostoglodov, V., 1997. Maximum depth of seismicity and thermal parameter of the subducting slab: general empirical relation and its applications. *Tectonophysics* 277, 165-187.
- Gutiérrez-Negrín, L.C.A., Quijano-León, J.L., 2005. Update of geothermics in México. In Proc. World Geothermal Congress, Florence 2005.
- Hansen, U., Yuen, D. A., 1990. Nonlinear physics of double-diffusive convection in geological systems. *Earth-Science Reviews* 29, 385-399.
- Harris, R.N., Chapman, D.S., 1995. Climate change on the Colorado plateau of eastern Utah inferred from borehole temperatures. *Journal of Geophysical Research* 100, 6367-6381.
- Hasan, A. R., Kabir, C. S., 1991. Heat transfer during two-phase flow in wellbores: Part II - Wellbore fluid temperature. *Society of Petroleum Engineers SPE22948*, 695-708.
- Hasan, A. R., Kabir, C. S., 1994. Static reservoir temperature determination from transient data after mud circulation. *Society of Petroleum Engineers Drilling & Completion* 17-24.
- He, L., Xiong, L., Wang, J., 2002. Heat flow and thermal modeling of the Yinggehai basin, south China Sea. *Tectonophysics* 351, 245-253
- Hermanrud, C., Cao, S., Lerche, I., 1990. Estimates of virgin rock temperature derived from BHT measurements: bias and error. *Geophysics* 55, 924-931.
- Henry, S.G., Pollack, H.N., 1988. Terrestrial heat flow above the Andean subduction zone in Bolivia and Peru. *Journal of Geophysical Research* 93, 15153-15162.

- Horner, D.R., 1951. Pressure build-up in wells. In: Proc. Third World Petroleum Congress, The Hague, pp. 503-519.
- Hurter, S.J., Pollack, H.N., 1996. Terrestrial heat flow in the Paraná basin, southern Brazil. *Journal of Geophysical Research* 101, 8659-8671.
- Hyodo, M., Takasugi, S., 1995. Evaluation of the curve-fitting method and the Horner plot for estimation of the true formation temperature using temperature recovery logging data. Proceedings twentieth annual workshop geothermal reservoir engineering, Stanford University, 94-100.
- Jaluria, Y., Torrance, K.E., 1986. Computational heat transfer. Hemisphere Publishing Corporation. USA.
- Jaupart, C., Tait, S., 1995. Dynamics of differentiation in magma reservoirs. *Journal of Geophysical Research* 100, 17615-17636.
- Jokinen, J., Kukkonen, I., 1999. Inverse simulation of the lithospheric thermal regime using the Monte Carlo Method. *Tectonophysics* 306, 293-310.
- Kiyohashi, H., Kyo, M., Ishihama, W., Tanaka, S., 1983. Development of needle probe method to measure thermal conductivity rocks simply at high temperature and high pressure. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 5, 289-304.
- Kojitani, H., Akaogi, M., 1997. Melting enthalpies of mantle peridotite: calorimetric determinations in the system CaO-MgO-Al₂O₃-SiO₂ and application to magma generation. *Earth and Planetary Science Letters* 154, 209-222.
- Kuritani, T., 2004. Magmatic differentiation examined with a numerical model considering multicomponent thermodynamics and momentum, energy and species transport. *Lithos* 74, 117-130.
- Kutasov, I.M., 1999. Applied Geothermics for Petroleum Engineers. Elsevier. Amsterdam.
- Kutasov, I. M., 2003. Dimensionless temperature at the wall of an infinite long cylindrical source with a constant heat flow rate. *Geothermics* 32, 63 - 68.
- Kutasov, I. M., Eppelbaum, L. V., 2005. Determination of formation temperature from bottom-hole temperature logs - a generalized Horner method. *Journal of Geophysical Engineering* 2, 90-96.
- Kutasov, I. M., Caruthers, R. M., Targhi, A. K., Chaaban, H. M., 1988. Prediction of downhole circulating and shut-in temperatures. *Geothermics*, 17, 607-618.
- Lewis, T.J., Bentkowski, W.H., Davis, E.E., Hyndman, R.D., Souther, J.G., Wright, J.A., 1988. Subduction of the Juan de Fuca plate: thermal consequences. *Journal of Geophysical Research* 15207-15225.
- López-Mendiola, J. M., Munguía B., F., 1989. Evidencias geoquímicas del fenómeno de ebullición en el campo de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 5, 89-106.
- López-Mendiola, J. M., Munguía-Bracamontes, F., 1987. Configuración de isovalores de temperatura para el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 3, 255-261.
- Luheshi, M. N., 1983. Estimation of formation temperature from borehole measurements. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society* 74, 747-776.
- Marsh, B. D., 1996. The 1995 Hallimond Lecture. Solidification fronts and magmatic evolution. *Mineralogical Magazine* 60, 5-40.

- Marsh, J., 1989. Geochemical constraints on coupled assimilation and fractional crystallization involving upper crustal compositions and continental tholeiitic magma. *Earth and Planetary Science Letters* 92, 70-80.
- Martínez-Serrano, R.G., 2002. Chemical variations in hydrothermal minerals of the Los Humeros geothermal system, Mexico. *Geothermics* 31, 579-612.
- Martínez Serrano, R. G., Alibert, C., 1994. Características geoquímicas de las rocas volcánicas del sistema geotérmico Los Humeros, Puebla y su relación con la mineralogía de alteración. *Geofísica Internacional* 33, 605-585
- Medina Martínez, M., 2000. Intervalos productores de fluidos en los pozos H'35 y H'39 del campo geotérmico Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 16, 51-60.
- Medina, M., Aragón, A., Kruger, P., 1989. Análisis de irrupción térmica causada por reinyección, preliminar a la producción de las primeras unidades de 5Mwe en Los Humeros, Pue. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 5, 241-256.
- Mena, M., González-Morán, T., 1978. Regional gravity of Los Humeros volcanic area. *Geofísica Internacional* 17, 429-443.
- Miller, J.C., Miller, J.N., 2000. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry. Prentice Hall, Edimburgh.
- Moya, S.L., Ruiz, J.N., Aragón, A., Iglesias, E., 1995. Modelo numérico en diferencias finitas para transporte de masa y energía en yacimientos geotérmicos con bióxido de carbono. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 11, 37-51.
- Moya, S.L., Ramos, E., Sen, M., 1987. Numerical study of natural convection in a tilted rectangular porous material. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 30, 741-756.
- Mulchrone, K.F., 2005. An analytical error for the mean radial length method of strain analysis. *Journal of Structural Geology* 27, 1658-1665.
- Nicholls, J., Stout, M. Z., 1982. Heat effects of assimilation, crystallization, and vesiculation in magmas. *Contributions to Mineralogy and Petrology* 81, 328-339.
- Nielsen, R. L., 1988. A model for the simulation of combined major and trace element liquid line of descent. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 52, 27-38.
- Nielsen, S. B., Balling, N., Christian, H. S., 1990. Formation temperatures determined from stochastic inversion of borehole observations. *Geophysical Journal International* 101, 581-590.
- O'Hara, M.J., Herzberg, C., 2002. Interpretation of trace element and isotope features of basalts: relevance of field relations, petrology, major element data, phase equilibria, and magma chamber modeling in basalt petrogenesis. *Geochemica et Cosmochemica Acta* 12, 2167-2191.
- Oldenburg, C. M., Spera, F. J., Yuen, D. A., Sewell, G., 1989. Dynamic mixing in magma bodies: theory, simulations, and implications. *Journal of Geophysical Research* 94, 9215-9236.
- Oldenburg, C. M., Spera, F. J., Yuen, D. A., 1990. Self-organization in convective magma mixing. *Earth-Science Reviews* 29, 331-348.
- Patankar, S. V., 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York, McGraw Hill.

- Pérez Reynoso, J., 1979. Geología y petrografía de la caldera de Los Humeros. *Geomimet* 91, 97-106.
- Ponce, L., Rodríguez, C., 1978. Microearthquake activity associated to Los Humeros caldera, Mexico: preliminary survey. *Geofísica Internacional* 17, 461-478.
- Portugal, E., Izquierdo, G., Barragán, R.M., Romero, B.I., 2002. Hydrodynamic model of Los Humeros geothermal field, Mexico, based on geochemical, mineralogical and isotopic data. *Geofísica Internacional* 41, 415-420.
- Prensky, S., 1992. Temperature measurements in boreholes: an overview of engineering and scientific applications. *The Log Analyst* 33, 313-333.
- Prol, R. M., González-Morán, T., 1982. Modelo preliminar del régimen térmico conductivo en la caldera de Los Humeros, Puebla. *Geofísica Internacional* 21, 295-307.
- Richet, P., Bottinga, Y., 1984. Anorthite, andesine, wollastonite, diopside, cordierite and pyrope: thermodynamics of melting, glass transitions, and properties of the amorphous phases. *Earth and Planetary Science Letters* 67, 415-432.
- Royer, J.J., Flores, L., 1994. Two-dimensional natural convection in an anisotropic and heterogeneous porous medium with internal generation. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 37, 1387-1399.
- Sánchez-Upton, P., 2006. Modelado numérico del flujo vertical ascendente de fluidos bifásicos tricomponentes (H₂O – CO₂ – NaCl) en pozos geotérmicos. Ph. D. Thesis, in preparation, Posgrado en Ingeniería - Energía (UNAM), México.
- Santoyo, E., 1997. Transient numerical simulation of heat transfer processes during drilling of geothermal wells. Ph. D Thesis, University of Salford, U.K., 351 p.
- Santoyo, E., Garcia, A., Espinosa, G., Hernandez, I., Santoyo, S., 2000. STATIC_TEMP: a useful computer code for calculating static formation temperatures in geothermal wells. *Computers & Geosciences* 26, 201-217.
- Santoyo, E., Verma, S.P., 1993. Evaluación de errores en el uso de los geotermómetros de SiO₂ y Na/K para la determinación de temperaturas en sistemas geotérmicos. *Geofísica Internacional* 32, 287-298.
- Seipold, U., Huenges, E., 1998. Thermal properties of gneisses and amphibolites – high pressure and high temperature investigations of KTB-rock samples. *Tectonophysics* 291, 173-178.
- Shane, P., Nairn, I.A., Smith, V.C., 2005. Magma mingling in the ~ 50 ka Rotoiti eruption from Okataina volcanic centre: implications for geochemical diversity and chronology of large volume rhyolites. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 139, 295-313.
- Shen, P.Y., Beck, A.E., 1986. Stabilization of bottom hole temperature with finite circulation time and fluid flow. *Geophysical Journal of Astronomical Society* 86, 63-90.
- Spera, F. J., 1980. Thermal evolution of plutons: a parametrized approach. *Science* 207, 299 - 301.
- Spera, F. J., Bohrsen, W. A., 2001. Energy-constrained open-system magmatic processes I: general model and energy-constrained assimilation and fractional crystallization (EC-AFC) formulation. *Journal of Petrology* 42, 999-1018.
- Spera, F. J., Bohrsen, W. A., 2002. Energy-constrained open-system magmatic processes 3: energy-constrained recharge, assimilation and fractional

- crystallization (EC-RAFC). *Geochemistry Geophysics Geosystems* 3, 8001, doi:10.1029/2002GC000315.
- Spera, F. J., Yuen, D. A., Kirschvink, S. J., 1982. Thermal boundary layer convection in silicic magma chambers: effects of temperature-dependent rheology and implications for thermogravitational chemical fractionation. *Journal of Geophysical Research* 87, 8755-8767.
- Stimac, J. A., Goff, F., Wohletz, K., 2001. Thermal modeling of the Clear Lake magmatic-hydrothermal system, California, USA. *Geothermics* 30, 349-390.
- Sun, G., Ranson, K.J., Kharuk, V.I., Kovacs, K., 2003. Validation of surface height from shuttle radar topography mission using shuttle laser altimeter. *Remote Sensing of Environment* 88, 401-411.
- Tait, S. R., 1988. Samples from the crystallising boundary layer of a zoned magma chamber. *Contributions to Mineralogy and Petrology* 100, 470-483.
- Tello Hinojosa, E., 1992a. Características geoquímicas e isotópicas de los fluidos producidos por los pozos de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 8, 3-48.
- Tello Hinojosa, E., 1992b. Composición química de la fase líquida a descarga total y a condiciones de reservorio de pozos geotérmicos de Los Humeros, Puebla, México. *Geofísica Internacional* 31, 383-390.
- Tiampo, K. F., Rundle, J. B., Fernandez, J., Langbein, J. O., 2000. Spherical and ellipsoidal volcanic sources at Long Valley caldera, California, using a genetic algorithm inversion technique. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 102, 189-206.
- Torres R., M. A., 1988. Aplicación de la función de derivada en el análisis de pruebas de presión en los pozos del campo geotérmico de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 4, 203-211.
- Torres R., M. A., 1995. *Characterization of the reservoir of the Los Humeros, Mexico geothermal field*, Vol. 3. Italy, International Geothermal Association.
- Tovar-Aguado, R., López-Romero, O., 2000. Resultados de una prueba de inyección de alcohol empleado como trazador, en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla, México. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 16, 45-50.
- Valentine, G. A., 1992. *Magma chamber dynamics*. In: Encyclopedia of Earth System Science, 3, 1-17, Academic Press.
- Valentine, G. A., 1994. Multifield governing equations for magma dynamics. *Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics* 78, 193-210.
- Valentine, G. A., Zhang, D., Robinson, B. A., 2002. Modeling complex, nonlinear geological processes. *Annual Reviews of Earth and Planetary Sciences* 30, 35-64.
- Verma, M. P., Verma, S. P., Sanvicente, H., 1990. Temperature field simulation with stratification model of magma chamber under Los Humeros caldera, Puebla, Mexico. *Geothermics* 19, 187-197.
- Verma, S. P., 1983. Magma genesis and chamber processes at Los Humeros caldera, Mexico - Nd and Sr isotope data. *Nature* 301, 52-55.
- Verma, S. P., 1984. Alkali and alkaline earth element geochemistry of Los Humeros caldera, Puebla, Mexico. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 20, 21-40.

- Verma, S. P., 1985. On the magma chamber characteristics as inferred from surface geology and geochemistry: examples from Mexican geothermal areas. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 41, 207-214.
- Verma, S.P., 1998. Error propagation in geochemical modeling of trace elements in two-component mixing. *Geofísica Internacional* 37, 327-338.
- Verma, S. P., 2000. Geochemical evidence for a lithospheric source for magmas from Los Humeros caldera, Puebla, Mexico. *Chemical Geology* 164, 35-60.
- Verma, S.P., 2005. Estadística básica para el manejo de datos experimentales con aplicación en la geoquímica (geoquimiometría). México, UNAM
- Verma, S. P., Andaverde, J., 1995 Temperature field distribution from cooling of a magma chamber, Florence, 1995.
- Verma, S. P., Andaverde, J., 1996. Temperature distributions from cooling of a magma chamber in Los Azufres geothermal field, Michoacán, Mexico. *Geofísica Internacional* 35, 105-113.
- Verma, S. P., Andaverde, J., 2006 Coupling of thermal and chemical simulations in a 3-D integrated magma chamber-reservoir model: A new energy research frontier. Edited book *Geothermal Energy Research Frontiers* (Editor Frank Columbus), Sometido.
- Verma, S. P., Lopez M., M., 1982. Geochemistry of Los Humeros caldera, Puebla, Mexico. *Bulletin Volcanologique* 45, 63-79.
- Verma, S. P., Rodríguez-González, U., 1997. Temperature field distribution from cooling of a magma chamber in La Primavera Caldera, Jalisco, Mexico. *Geothermics* 26, 25-42.
- Verma, S.P., Santoyo, E., 1997. New improved equations for Na/K, Na/Li and SiO₂ geothermometers by outlier detection and rejection. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 79. 9-23.
- Verma, S. P., Torres-Alvarado, I. S., Velasco-Tapia, F., 2003. A revised CIPW norm. *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen* 83, 197-216.
- Verma, S. P., Andaverde, J., Santoyo, E., 2006b. Statistical evaluation of methods for the calculation of static formation temperatures in geothermal and oil wells using an extension of the error propagation theory. *Journal of Geochemical Exploration* 89, 398-404.
- Verma, S. P., Andaverde, J., Santoyo, S., 2006c. Application of the Error Propagation Theory in estimates of static formation temperatures in geothermal and petroleum boreholes. *Energy Conversion and Management* 47, 3659-3671.
- Versteeg, H. K., Malalasekera, W., 1995. *An introduction to computational fluid dynamics The finite volume method*. Harlow, England, Pearson, Prentice Hall.
- Viggiano-G., J.C., Quijano-L., J.L., 1989. Alteración hidrotermal en el campo geotérmico de Los Humeros, Pue. III. Interacción agua-roca. *Geotermia Revista Mexicana de Geoenergía* 5, 411-432.
- Vosteen, H.D., Schellschmidt, R. 2003. Influence of temperature on thermal conductivity, thermal capacity and thermal diffusivity for different types of rocks. *Physics and Chemistry of the Earth* 28, 499-509.
- Wilhelm, H., 1990. A new approach to the borehole temperature relaxation method. *Geophysical Journal International* 103, 469-481.

- Wilhelm, H., 2000. Undisturbed temperature in the main drillhole of the German continental deep drilling program predicted from temperature logs recorded after shut-in. *Geothermics* 29, 393-406.
- Wohletz, K., Civetta, L., Orsi, G., 1999. Thermal evolution of the Phlegraean magmatic system. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 91, 381-414.