



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA  
INSTITUTO DE GEOFISICA  
EXPLORACIÓN, AGUAS SUBTERRANEAS, MODELACIÓN Y PERCEPCIÓN REMOTA

La modelación matemática como una herramienta para  
probar hipótesis: caso de salmueras mineralizantes  
en una cuenca sedimentaria  
con yacimientos estratiformes de cobre

## TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRA EN CIENCIAS DE LA TIERRA

PRESENTA:  
MÓNICA AZUCENA LUNA ANDRADE

Director de tesis:  
Dra. Graciela Herrera Zamarrón  
Instituto de Geofísica

Ciudad Universitaria, CD. MX. Agosto 2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

## **Dedicatoria**

A mis padres,  
por su especial amor incondicional  
(y su paciencia con esta hija).

A Diego, Isabel y Mimi,  
por caminar juntos, hermanitos.

A mi abuelita Juana,  
que ahora me aconseja desde el cielo.

## **Agradecimientos**

En esta página deseo reconocer a quienes estuvieron junto a mí en el trayecto de mi maestría.

En primer lugar al Dr. Ismael Herrera Revilla por inspirarme a encontrar mi espacio en la UNAM y mostrarme la grandeza y el poder de las matemáticas.

A la Dra. Graciela Herrera, por guiarme con paciencia, dar seguimiento a mi trabajo y su calidad humana. GRACIAS.

Agradezco a mis sinodales, los doctores Carles Canet, Ernesto Rubio y Eduardo González quienes me ayudaron a concluir este trabajo con sus valiosos comentarios y sugerencias.

Al personal del Posgrado en Ciencias de la Tierra, en especial a la Lic. Araceli Chamán por su amabilidad y orientaciones acompañadas de una sonrisa para todo trámite.

A los doctores Guillermo Hernández, Norberto Vera, y Luis Miguel de la Cruz del Grupo de Geofísica Computacional en el Instituto de Geofísica por la convivencia, su apoyo y enseñanzas.

A CONACYT por la beca otorgada para realizar mis estudios de maestría.

A Alberto Rosas por sus consejos y su amistad.

A aquellos que estuvieron pero se tuvieron que ir.

*Mónica Azucena Luna Andrade*

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>III</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Antecedentes, importancia y objetivos del estudio	2
1.2. Organización de la tesis	3
<b>2. Yacimiento de cobre de San Marcos</b>	<b>4</b>
2.1. Localización	4
2.2. Geología de los sedimentos alojados en el yacimiento de cobre de San Marcos	5
2.2.1. Estratigrafía local del área de San Marcos	5
2.2.2. Estructura y rocas anfitrionas del yacimiento	6
2.3. Modelo de la diagénesis del yacimiento	8
<b>3. Modelación matemática del flujo impulsado por densidad</b>	<b>10</b>
3.1. Flujo impulsado por densidad	10
3.2. Propiedades del agua	11
3.2.1. Dependencia de la temperatura	12
3.2.2. Dependencia de la salinidad	16
3.2.3. Dependencia de la presión	19
3.2.4. Dependencia de la temperatura, salinidad y presión	20
3.3. Formulación axiomática de flujo impulsado por cambios de densidad en medios porosos	23
3.3.1. Balance de energía	28
3.3.2. Transporte en medios porosos	35
<b>4. Revisión de software</b>	<b>37</b>
4.1. Comparación del software disponible	38
4.1.1. HYDROTHERM	38
4.1.2. OpenGeoSys	38
4.1.3. SEAWAT	38
4.1.4. SUTRA	38
4.1.5. SHEMAT	39
4.2. Conclusiones de la comparación	43
<b>5. Prueba de hipótesis mediante la modelación matemática del yacimiento de cobre de San Marcos</b>	<b>44</b>
5.1. Parámetros generales del medio poroso	45
5.2. Hipótesis 1: El flujo de alto calor produce la circulación convectiva del agua que hace que ésta ascienda a través de la falla de San Marcos	47
5.2.1. Objetivo	47
5.2.2. Dominio	47
5.2.3. Descripción del flujo	49
5.2.4. Descripción del transporte de energía	50
5.2.5. Condiciones de frontera	51
5.2.6. Resultados	52

5.3.	Hipótesis 2: La presión debida a infiltración del agua meteórica produce la circulación ascendente del agua a través de la falla de San Marcos	54
5.3.1.	Objetivo	54
5.3.2.	Dominio	54
5.3.3.	Descripción del flujo	54
5.3.4.	Descripción del transporte de solutos	55
5.3.5.	Condiciones de frontera	56
5.3.6.	Resultados	59
5.4.	Cuantificación de la cantidad de cobre en el yacimiento de la falla de San Marcos	61
<b>6.</b>	<b>Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>67</b>
<b>7.</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>69</b>
<b>I.</b>	<b>Anexo: Formulación axiomática</b>	<b>73</b>
A.	Modelo matemático sin considerar densidad variable para fluidos en medios porosos	74
B.	Balance de energía	81
C.	Transporte en medios porosos	88
D.	Condiciones iniciales y de frontera	90
<b>I.</b>	<b>Anexo: Lista de símbolos</b>	<b>92</b>
<b>II.</b>	<b>Principales características y limitaciones de SUTRA</b>	<b>93</b>

## Resumen

Los modelos matemáticos pueden usarse para probar hipótesis cuando un fenómeno ya ha ocurrido y deseamos explicar sus causas. En este caso, los modelos pueden probar las hipótesis inferidas mediante otras ciencias integrando la información disponible a través de un modelo matemático derivado de las principales leyes físicas y químicas que rigen el fenómeno de interés.

En esta tesis se prueba, mediante modelación matemática, una hipótesis propuesta por García-Alonso et al. (2010) para explicar la génesis del yacimiento de cobre de San Marcos, localizado en la parte sureste de la región de Cuatrociénegas, Coahuila, y se propone y se prueba una hipótesis adicional producto de este trabajo. Para probarlas, consideramos una salmuera (es decir, un fluido con una alta concentración de sales) de temperatura moderadamente alta. El patrón de flujo de la misma depende de la densidad en las diferentes posiciones espaciales, por lo tanto, el flujo está impulsado por la densidad. Por otro lado, la densidad es función principalmente de la concentración de sales y de la temperatura. Por lo que, en este estudio modelamos matemáticamente el flujo del fluido dentro de un medio poroso, de modo que la fase sólida (areniscas muy compactas) es estática y la fase líquida (salmuera) fluye por el espacio poroso y su patrón de flujo depende de la densidad de la misma. No consideramos el vapor porque el agua no hierve en las condiciones de presión y temperatura del acuífero sobre el que se formó el yacimiento de cobre.

Con los modelos numéricos probamos dos hipótesis de ascenso del fluido a través de la falla de San Marcos: a) el flujo ascendente se debe a la presión producida por la recarga meteórica, y b) el flujo ascendente se debe a la convección producida por la variación de temperatura en la cuenca. Para esto probamos los efectos en el patrón de flujo de los cambios de densidad debidos a la concentración de sales, en el primer caso, y los efectos debidos a la temperatura, en el segundo. Estas hipótesis se analizan con simulación numérica utilizando el programa SUTRA del USGS.

Los resultados del modelo de transporte de sales muestran que el fluido que contiene cobre asciende a través de la falla de San Marcos a pesar de su alta densidad (salinidad), debido a la presión inducida por la recarga meteórica. Por otro lado, la influencia de la temperatura es insignificante de acuerdo con el modelo de transporte de energía; por lo tanto, el gradiente geotérmico por sí mismo no produce un movimiento convectivo que haga fluir a la salmuera por la falla. Como la convección se puede producir por un efecto combinado de la temperatura y la salinidad, en trabajo futuro sería deseable probar matemáticamente si en el caso de estudio ésta se da y pudiera producir el ascenso de la salmuera por la falla.



# 1. Introducción

Esta tesis se realizó motivada por el potencial de los modelos matemáticos. Para comenzar, un modelo es una representación de un objeto, sistema o idea de alguna otra forma que la entidad en sí misma (Holzbecher, 1998). Los modelos pueden ser: *conceptuales* cuando puntualizan los objetivos del fenómeno que se va a predecir o probar; *matemáticos*, compuestos por un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que reúnen el conocimiento científico y tecnológico que se utilizará; *numéricos*, que convierten esas ecuaciones en un sistema de ecuaciones numéricas; y *computacionales*, formados por códigos o programas de cómputo que al ser ejecutados por una computadora proporcionan la predicción del comportamiento (Herrera y Pinder, 2012).

Los modelos matemáticos pueden clasificarse como predictivos cuando permiten estimar cuál es el comportamiento esperado de un fenómeno que está por suceder; y cuando los fenómenos ya han ocurrido y las ciencias se han encargado de generar hipótesis para explicarlos, los modelos matemáticos se pueden utilizar para hacer pruebas de las hipótesis y con ello corroborar los resultados obtenidos mediante estas ciencias. Éste último tipo es el que se utiliza en el estudio que se reporta en esta tesis. Los modelos como prueba de hipótesis pueden servir de ayuda en la formulación regional de reglamentos y como herramientas de detección para identificar regiones adecuadas o inadecuadas para alguna acción propuesta. (Anderson y Woessner, 1992).

## **1.1. Antecedentes, importancia y objetivos del estudio**

El modelo conceptual del flujo y transporte de salmueras mineralizantes en yacimientos estratiformes de cobre que se presenta en esta tesis surge con la necesidad de explicar la génesis del modelo geológico del yacimiento de cobre de San Marcos en Coahuila. La formación de este yacimiento data de más de 50 millones de años, está delimitado por el contacto con la falla sinsedimentaria de San Marcos y la mineralización ocurrió entre las calizas y los lechos rojos correspondientes a las formaciones Cupido y San Marcos respectivamente.

En un trabajo publicado previamente (García-Alonso, et. al, 2011) se propuso un modelo conceptual para la formación del yacimiento de cobre de San Marcos en Coahuila que pertenecen a depósitos minerales de cobre alojados en lechos rojos. Un factor fundamental en dicho modelo fue que “en la cuenca sedimentaria existieron salmueras hidrotermales capaces de lixiviar y transportar grandes cantidades de cobre, las cuales ascendieron desde lo profundo de la cuenca a través de la falla sinsedimentaria de San Marcos y, al pasar a través del límite redox marcado por la transición de los lechos rojos a caliza, tuvo lugar la precipitación del cobre”.

En la literatura existen diferentes teorías respecto a la formación de este tipo de mineralizaciones de cobre asociadas a los lechos rojos, (Collings, Sherman, y Ragnarsdottir, 2000) entre las cuales se encuentra el cinturón de Zambia en África, uno de los yacimientos más importantes a nivel mundial de cobre (Brown, 2009).

En esta tesis se revisa el modelo conceptual propuesto por García-Alonso et al. (2011) y se propone una modificación al mismo; se plantean las hipótesis respecto a la formación del yacimiento de cobre de San Marcos que sería pertinente probar con un modelo matemático y computacional; utilizando una formulación axiomática (Herrera y Pinder, 2012) se derivan las ecuaciones de flujo y transporte necesarias para la modelación matemática del problema; y por último, se revisan los programas computacionales de código abierto que podrían utilizarse para resolverlo y, con las restricciones que conlleva, y, por último, se presentan los resultados de la modelación de las hipótesis que se proponen, las conclusiones y propuestas de trabajo futuro.

## **1.2. Organización de la tesis**

Una vez que hemos presentado el propósito de este estudio al lector en esta introducción, en el capítulo 2 detallamos el yacimiento de cobre de San Marcos y en el capítulo 3 mostramos el modelo matemático basado en la formulación axiomática de flujo impulsado por cambios de densidad en medios porosos. Luego mostramos la revisión de software libre que hicimos en busca del más adecuado para modelar este tipo de sistemas físicos considerando la alta salinidad de los fluidos mineralizantes responsables de la lixiviación del cobre en el yacimiento en el capítulo 4.

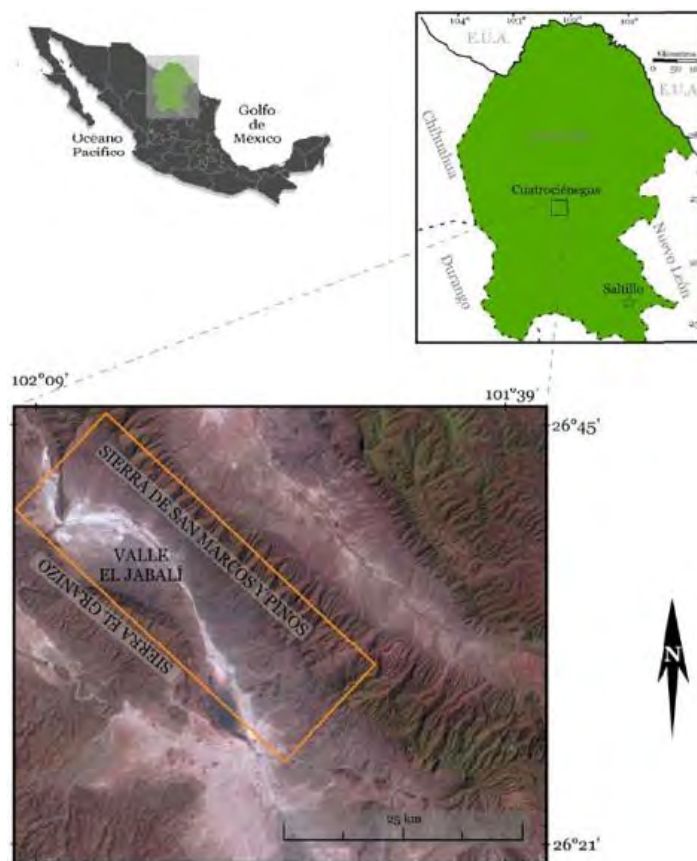
Posteriormente, en el capítulo 5 explicamos un modelo simplificado del yacimiento de cobre de San Marcos y ponemos en evidencia las hipótesis que probamos en esta tesis. En el capítulo 6, a manera de cierre, podemos leer las conclusiones a las que llegamos después de realizar esta faena de investigación utilizando el software SUTRA para las hipótesis que abordamos del modelo de flujo y transporte de las salmueras mineralizantes en el yacimiento estratiforme de cobre de San Marcos así como unas sugerencias de trabajo a futuro.

## 2. Yacimiento de cobre de San Marcos

Las características geológicas del noreste de México son el producto de una compleja actividad tectónica que ha tenido lugar durante el Paleozoico, Mesozoico y Cenozoico, la cual ha resultado en la configuración actual de la orografía y en la metalogenia de esta región (García-Alonso, 2010).

### 2.1. Localización

El área de estudio se localiza en la porción noreste de la República Mexicana, específicamente en la parte sureste de la región de Cuatro Ciéneas, Coahuila. Geográficamente, está comprendida en la Provincia de la Sierra Madre Oriental, dentro de la Subprovincia de Sierras y Cuencas de Coahuila, concretamente en la Cuenca de Sabinas.



## **2.2. Geología de los sedimentos alojados en el yacimiento de cobre de San Marcos**

Los depósitos de sedimentos de cobre alojado están localizados cerca de 30 Km al sur de la ciudad de Cuatro Ciénegas. Ellos ocurren con la frontera entre el bloque de Coahuila y la cuenca Sabinas, la cual está delineada por la escala regional del cinturón San Marcos. Cuatro ocurrencias de cobre sedimentario alojado depositado se encontraron en ambas ramas de una falla NW-SE yacente anticlinal. La rama noreste configura la serie San Marcos y Pinos, el cual encierra las ocurrencias de cobre de Rincón de la Presa, La Rinconada y El Rosillo. La rama suroeste figura en la serie El Granito, donde aflora el depósito Manto Negro, el más grande del área de estudio

### **2.2.1. Estratigrafía local del área de San Marcos**

Las rocas estructurales del bloque Coahuila son pobremente expuestas a través del área de estudio. Pocos afloramientos adyacentes al cinturón de San Marcos comprenden metareniscas con menor intercalamiento de mármol, presumiblemente del Paleozoico tardío. Sin embargo, rocas graníticas a granodioríticas del Pérmico-Triásico o Triásico tardío constituyen la litología predominante en los conglomerados que cubre el Jurásico.

Las rocas jurásicas en su mayoría afloran en las faldas al norte de la serie de El Granizo, de manera inversa con la falla de contacto de la secuencia del Cretácico suprayacente. Con un grosor total arriba de 2000 m posiblemente, que consisten en conglomeráticos rojos y areniscas de grano muy grueso, decrecen hacia arriba de la sucesión. Sus clastos son polimnéticos, pobremente clasificados y tienen bajo grado de redondez. Podrían estar relacionados con la formación La Casita. La secuencia del Jurásico está separada de las series superpuestas del Cretácico por un síndrome de ruptura menor en una discontinuidad estratigráfica. Descansando en la discontinuidad están los lechos rojos del Cretácico inferior de la Formación San Marcos, que en el área de estudio alcanzan cerca de 1000 metros en espesor.

La Formación San Marcos consiste mayormente en granos gruesos, pobremente clasificados, arcosas rojas, mostradas atravesando los lechos. La base y lo más alto de la Formación San Marcos está marcada respectivamente por (a) lechos conglomerados menores, y (b) calizas micríticas y limolitas carbonáceas.

La mineralización del cobre sedimentario alojado ocurre en lo alto de la Formación San Marcos, unos pocos metros debajo del contacto transicional con la superposición de calizas de la Formación Cupido. La última formación oscila entre los 300 a 600 metros de espesor en el área de estudio y consiste en lechos de calizas micríticas ricas en nódulos de sílex en la base, con facies arrecifales en la parte superior. Es concordantemente cubierta por los lechos de lutitas marinas profundas de la Formación La Peña, la que en la serie de San Marcos y Pinos alcanza sólo pocos metros en espesor. De manear concordante se superponen las calizas micríticas de la Formación Aurora, la cual representa lo más alto de la secuencia Mesozoica que es expuesta en el área de estudio.

### **2.2.2. Estructura y rocas anfitrionas del yacimiento**

Los depósitos de cobre sedimentario de San Marcos tuvieron lugar como varias capas sucesivas decimétricas, concordantes, cobre-mineralizadas, en granos de finos a medios en las capas clásticas. El intervalo mineralizado muestra clarificación a los ciclos de alza que consisten en la alternancia decímetro a metro de espesor de las calizas conglomeradas, areniscas y limolitas. La mineralización de cobre esencialmente consiste en: supergénica de crisocola, malaquita y azurita. Estos minerales secundarios de cobre dan a los horizontes un llamativo color azul verde. Todos los depósitos y ocurrencias están bien expuestos por las cortas trincheras de exploración y ejes que no penetran más allá de la cubierta intemperada de los yacimientos.

Hay dos ocurrencias menores de cobre, Rincón de la Presa y Rinconada, situadas 3.5 km de cada uno, están casi simétricamente localizadas a ambos lados de los ejes de NW-SE anticlinal, por lo tanto, podría ser equivalente a intervalos mineralizados. El Rincón de la Presa se encuentra en la extremidad invertida de la anticlinal, metiendo 70° SE hacia el eje del pliegue.

Se ven cuatro capas mineralizadas, 10-50 cm de espesor, y consisten en lechos de areniscas de grano medio consistentemente puestas en la parte superior de los lechos conglomerados y subyacentes a los estratos de limolitas. En otras palabras, La Rinconada se encuentra en la extremidad normal de la anticlinal, bajando 45° NE. Un intervalo mineralizado general de aproximadamente 14 m está expuesto; no obstante, además de algunas costras cupríferas de origen supergénico sin importancia, sólo una capa mineralizada ocurre con unos 15 cm de espesor de capa verde de grano fino de arenisca que se encuentra en la parte superior del lecho de conglomerado y debajo de una capa de limo.

Situada a unos 32 km más al sureste en la misma pendiente que el rango de San Marcos y Pinos, el depósito de cobre sedimentario alojado El Rosillo, tiene dos capas mineralizadas de 30 y 60 centímetros de espesor extendidas lateralmente por cerca de 300 metros. Además hay areniscas cupríferas de grano fino que ocurren en la parte superior de los lechos microconglomerados.

Manto Negro es el depósito de cobre más importante en el área de estudio en términos del espesor y grados de mineral. Este se localiza al norte de la cordillera de El Granizo, cerca de 16.5 km al sur de La Rinconada y Rincón de la Presa. El depósito está alojado en una cuña de la Formación San Marcos, el cual está en contacto tectónico con la secuencia clástica Jurásica. Su inmersión en el estrato es de aproximadamente 20° al noreste. El intervalo global mineralizado es de cerca de 4m de espesor, contiene tres capas discretas que contienen cobre, de 30,90 y 50 cm (de la base a lo superior), y tiene una extensión lateral expuesta de 200m. Esas capas son areniscas de grano fino, muy ricas en minerales secundarios de cobre, intercaladas con decímetros a centímetro de espesor de capas de limolitas carbonáceas.

### 2.3. Modelo de la diagénesis del yacimiento

Para la revisión de la diagénesis del yacimiento, partimos del modelo que proponen García-Alonso et al. (2011). Éste se resume a continuación.

- De acuerdo a sus características tectonosedimentarias, morfológicas y geoquímicas, los depósitos de cobre de San Marcos pertenecen a depósitos minerales de cobre alojado en lechos rojos.
- Aunque los conjuntos observables de cobre se han originado por alteración supergénica, la mineralización primaria de cobre se formó durante la diagénesis temprana, cuando el rift de la cuenca Sabinas del Mesozoico seguía activo.
- Los fluidos mineralizantes eran salmueras moderadamente oxidantes que se formaron a partir del agua de mar e impulsadas por la gravedad se infiltraron en las partes más profundas de la cuenca y disolvieron evaporitas.
- Como resultado, se convirtieron en fluidos hidrotermales de baja temperatura ( $\leq 140^{\circ}\text{C}$ ) y alta salinidad (aproximadamente 30% en peso de CaCl equivalente) capaces de lixiviar y transportar grandes cantidades de cobre.
- La fuente de este metal podrían ser los granos máficos detríticos y los óxidos de hierro de los gruesos lechos rojos subyacentes del Jurásico y del Cretácico inferior.
- La precipitación de cobre se llevó a cabo cuando el movimiento ascendente de las salmueras mineralizantes pasaron a través de la frontera redox marcada por la transición de los lechos rojos a calizas.
- El movimiento ascendente de las salmueras mineralizantes, desde lo profundo de la cuenca a la posición de los depósitos de cobre sedimentario fue propiciado por un flujo de alto calor que permitió su circulación convectiva y su ascenso a lo largo de la falla sinsedimentaria de San Marcos.



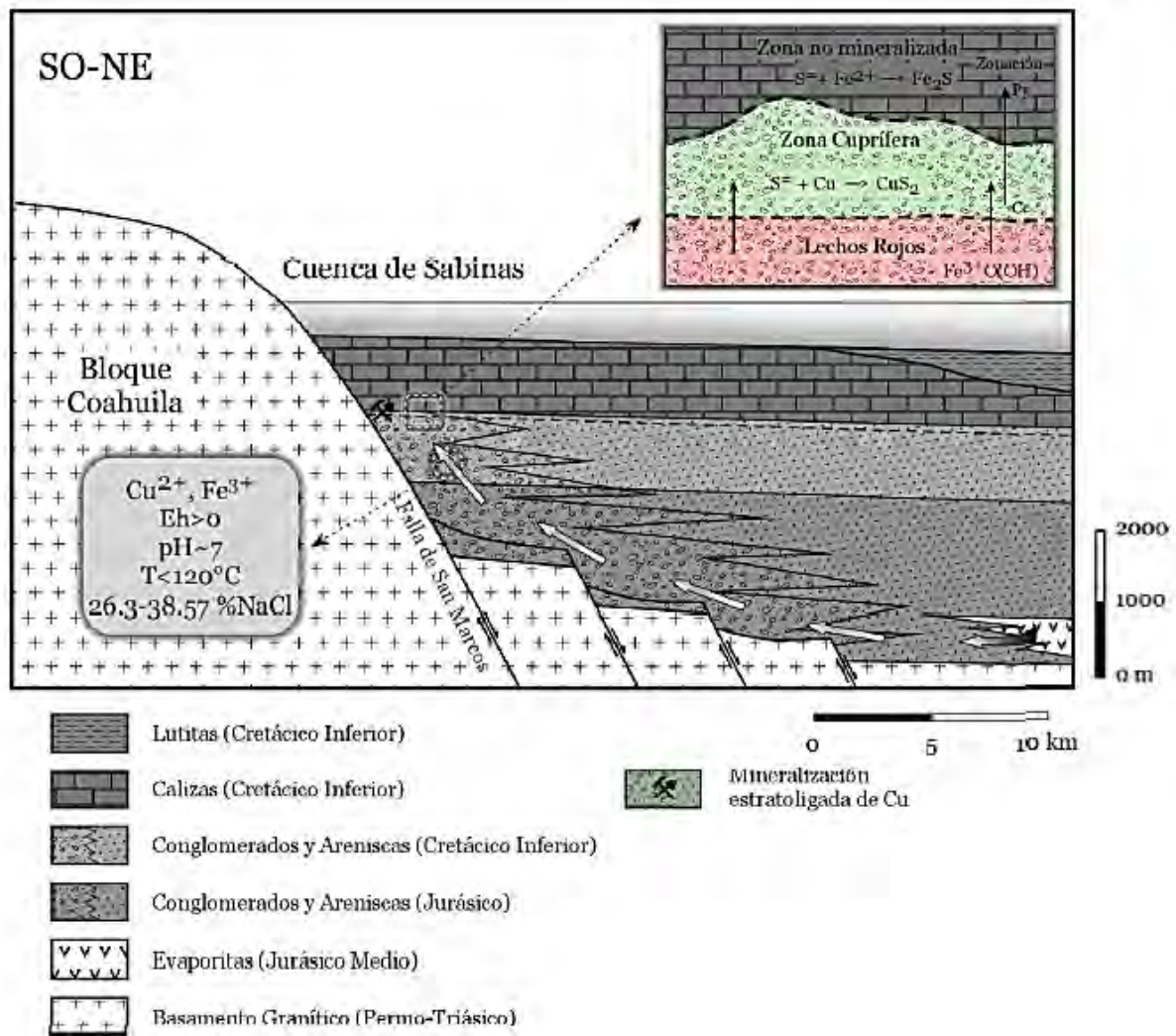


Figura 2.1. Esquema del modelo para el depósito de cobre en un ambiente REDOX en las formaciones San Marcos y Cupido, en la región de la Cuenca de Sabinas. Tomado de García-Alonso (2010)

### **3. Modelación matemática del flujo impulsado por densidad**

En esta tesis probamos varias hipótesis mediante modelación matemática, cada uno de los modelos que se emplean requiere su propio conjunto de ecuaciones que, aunado a las condiciones iniciales y de frontera, permiten encontrar soluciones al modelo en cuestión. Ya que el papel tanto de la salmuera y como de la temperatura es fundamental en el problema que estamos considerando, y ambos producen cambios en la densidad del agua, primero abordamos el conjunto de ecuaciones para la hipótesis que considera el flujo impulsado por cambios de densidad en el medio poroso.

A continuación, presentamos algunos conceptos básicos del tema flujo impulsado la densidad en medios porosos, las secciones 3.1 y 3.2 se basan principalmente en el libro de Holzbecher (1998).

#### **3.1. Flujo impulsado por la densidad**

Se dice que el flujo de un fluido está impulsado por la densidad si el patrón de flujo se debe a diferencias en la densidad del fluido. La condición necesaria para que este tipo de flujo se dé es que la densidad difiera de una posición a otra. Si el sistema es transitorio además habrá cambios temporales en la densidad.

El flujo impulsado por la densidad puede ocurrir en sistemas con varias fases. En esta tesis nos centraremos en el flujo del agua en un medio poroso, estos son sistemas que contienen una fase sólida, la roca, que no presenta movimiento, y una fase líquida, el agua, que fluye en el espacio de los poros de la roca y que puede estar impulsada por la densidad. Como supondremos que la roca está en reposo en nuestros modelos, únicamente modelaremos el movimiento del fluido. Sin embargo, la temperatura de la roca sí cambia y la conductividad de la roca se involucra en la ecuación del balance de energía, como se verá más adelante.

La densidad a la que nos referiremos en lo que sigue es la densidad del agua  $\rho$ . La densidad de la roca puede ser relevante para ciertos procesos que se dan en medios porosos por lo que posiblemente podría influir en el flujo, pero en esta tesis no se considerará. La densidad del agua es influenciada principalmente por la temperatura y la salinidad, aunque también depende de la presión, ésta es de menor importancia y aquí la despreciaremos.

### **3.2. Propiedades del agua**

Entre las propiedades de los fluidos que se requieren para estudiar el flujo del agua se encuentran la densidad, compresibilidad, viscosidad, calor específico, capacidad calorífica, coeficiente de expansión térmica, conductividad térmica, y tensión superficial (Holzbecher, 1998). En este trabajo se considera el comportamiento del flujo impulsado por la densidad, sin embargo, se tienen que considerar otras propiedades de los fluidos porque con los cambios de densidad también cambian otras propiedades.

Como hemos comentado antes, las propiedades del agua cambian con la temperatura, la concentración en la salinidad y la presión. En el estado del arte se pueden encontrar muchos artículos relacionados con la interacción entre esas tres variables, en los que se deja variar un parámetro mientras que se presentan suposiciones sobre las otras dos que comúnmente se consideran constantes. Por ejemplo, Ohmoto (1986) considera que las variaciones en la temperatura y la salinidad de los fluidos mineralizantes inicialmente calientes, pueden ser debido a la interacción con aguas debajo de la superficie (más frías y oxigenadas) localizadas en acuíferos someros, o a la mezcla de aguas meteóricas descendentes con los fluidos mineralizantes calientes y salinos ascendentes, lo cual traería como consecuencia la precipitación de la carga mineral de los fluidos y desprecia la influencia de la presión en la densidad.

A continuación mencionamos algunas dependencias que utilizamos para modelar el caso de estudio de esta tesis.

### **3.2.1. Dependencia de la temperatura**

Las variaciones de la temperatura del subsuelo se deben, en primera instancia, a las condiciones climáticas en la superficie de la Tierra ya que una parte del agua proveniente de las lluvias sobre la superficie se evapora y otra parte es absorbida por las plantas.

Existen variaciones temporales y espaciales de la temperatura del agua subterránea. Respecto a las temporales, el cambio de la temperatura es más notorio entre estaciones del año que entre el día y la noche. Con respecto a las espaciales, en la corteza terrestre, las temperaturas aumentan de 20 a 30°C por kilómetro, sin embargo, la temperatura crece a menor velocidad en el manto y el núcleo, (Tarbuck y Lutgens, 2005) además cuando el clima no es muy caliente, la magnitud de la temperatura del suelo crece gradualmente con la profundidad desde la superficie por el flujo de calor del interior de la Tierra, a lo que se le llama gradiente geotérmico.

En varias partes del mundo se ha determinado con valores de aproximadamente 3°C por cada 100 m de profundidad, aunque esto sólo aplica para fondos en la corteza terrestre, ya que en capas inferiores las temperaturas llegan a incrementarse varios cientos de grados centígrados; otro caso especial es que en regiones con actividad geotérmica el gradiente puede llegar arriba de 6°C por cada 100 m.

El gradiente geotérmico depende del ambiente geológico local en el subsuelo. Sin embargo, los movimientos convectivos del fluido en el subsuelo pueden modificar el comportamiento de la temperatura. Entonces, los perfiles de temperatura dependen del régimen de flujo local, que puede ser ascendente, descendente u horizontal.

A continuación describimos la dependencia de algunas propiedades de los fluidos con respecto a los cambios de temperatura.

### 3.2.2. Densidad

La densidad del agua dulce se aproxima mediante funciones que tienen validez en diferentes intervalos de temperatura. Batzle y Wang (1992) proponen las ecuaciones 3.1 y 3.2 para la densidad del agua  $\rho_w$  y de la salmuera  $\rho_s$ , respectivamente, con unidades del sistema internacional,  $\text{kg/m}^3$ , basándose en el rango de aplicabilidad para la modelación de salmueras mineralizantes en cuencas sedimentarias que coincide con nuestro caso de estudio (Tabla 3.2):

$$\rho_w = \rho_w(T, P) = 10^3[1 + 10^{-6}(-80T - 3.3T^2 + 0.00175T^3 + 489P - 2TP + 0.016T^2P - 1.3 \times 10^{-5}T^3P - 0.333P^2 - 0.002TP^2)]; \quad (3.1) \quad (1)$$

$$\rho_s = \rho_s(T, P, S) = \rho_w + 10^3S\{0.668 + 0.44S + 10^{-6}[300P - 2400PS + T(80 + 3T - 3300S - 13P + 47PS)]\}, \quad (3.2) \quad (2)$$

donde la salinidad  $S$  es adimensional, la presión  $P$  está en MPa y la temperatura  $T$  en  $^{\circ}\text{C}$ .

### 3.2.3. Viscosidad dinámica

Existen diferentes expresiones de la viscosidad dinámica dependiendo del rango de temperaturas (ver Holzbecher, 1998); por ejemplo, con unidades de  $\text{Pa} \cdot \text{s}$  se tiene

$$\mu = 10^{-3}\{1 + 0.015512(T - 293.15)\}^{-1.572} \quad (3)$$

Aquí utilizaremos la ecuación de la viscosidad dinámica del modelo de SUTRA que está dada por la siguiente función (Voss y Provost, 2010):

$$\mu(T) \cong (239.4 \times 10^{-7})10^{\left(\frac{248}{T+133.15}\right)} \quad (4)$$

donde la temperatura está dada en °C y las unidades de la viscosidad son Pa·s. Para el rango de temperaturas de 60°C a 140°C en nuestro caso de estudio, tenemos que la viscosidad dinámica calculada con la ecuación (4) se encuentra entre  $4.6 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$  y  $1.94 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ .

Comparamos la expresión de la viscosidad dinámica de Holzbecher con la de Voss y Provost (2010) que es la que usa el modelo en SUTRA y obtuvimos que la diferencia entre ellas está dada por la siguiente gráfica en la que se muestra que conforme mayor es la temperatura, la diferencia va en aumento.

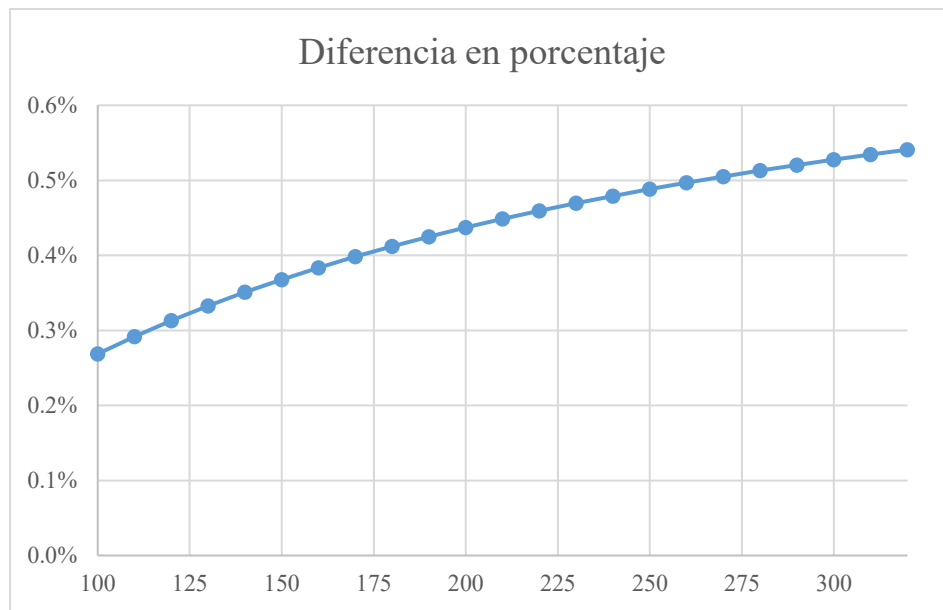


Figura 3.1. Gráfica de la diferencia en porcentaje entre las expresiones de la viscosidad dinámica dependiente de la temperatura de Holzbecher (1998) y Voss y Provost (2010).

### 3.2.4. Calor específico

De acuerdo con lo presentado por Holzbecher (1998) el calor específico del agua dulce a temperaturas entre 100°C y 320°C pueden aproximarse por

$$C = 3.3774 - 1.12665 \times 10^{-2}T + 1.34687 \times 10^{-5}T^2 \quad (5)$$

Sus unidades son cal/g/°K y para estar en unidades del Sistema Internacional (J/kg/°K) deben multiplicarse por 4187.6. Debajo de los 100°C Holzbecher menciona que el calor específico se muestra como una constante con un valor aproximado de 4200 J/kg/°K, un 40% menos que en el intervalo de 100°C a 300°C.

En el modelo en SUTRA, se toman los valores de Voss y Provost (2010), para el fluido  $c_w = 4182 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$  y para la matriz sólida  $c_s = 840 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$ .

### 3.2.5. Conductividad térmica

Entre los parámetros que dependen de la temperatura también se encuentra la conductividad térmica del agua  $\lambda$  que para temperaturas entre 0 y 350°C, con la temperatura en °K,  $T_0 = 273.15$  está dada por la función (Holzbecher, 1998)

$$\lambda_f = -922.47 + 2839.5 \left( \frac{T}{T_0} \right) - 1800.7 \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 + 525.77 \left( \frac{T}{T_0} \right)^3 - 73.44 \left( \frac{T}{T_0} \right)^4 \quad (6)$$

Analizando esta función se puede observar que la conductividad térmica del agua tiene un máximo cerca de 140°C. En nuestro caso, para el modelo de transporte de energía, empleamos  $\lambda = \sigma_w = 0.6 \text{ J/m}^\circ\text{C}\cdot\text{s}$  que corresponde a la conductividad térmica del fluido (Voss y Provost, 2010).

En el sistema completo del medio poroso con el fluido, es importante la conductividad térmica, por ejemplo, si la variación de la conductividad de la roca es menor que la del agua, los cambios de las dos fases de la conductividad son más chicos que esos en  $\lambda_f$ .

### 3.2.6. Dependencia de la salinidad

La concentración de sal en el agua casi siempre se da en unidades físicas que expresan la relación de la masa de la sal con respecto al volumen del agua en mg/l o g/m<sup>3</sup>. Sin embargo, también podemos encontrar la concentración expresada en fracciones de masa que consideran la masa de la sal con respecto a la masa del agua; en este caso, frecuentemente las unidades adimensionales se encuentran en ppt, ppm, ppb, etc. Para intercambiar entre estos tipos de unidades, se necesita conocer la densidad del fluido. Si la densidad es igual a la de referencia del agua dulce  $\rho_f = 1000 \frac{kg}{m^3}$  entonces,  $1000 \frac{mg}{l} = 1 ppm$ .

También se puede emplear la conductividad eléctrica por unidad de longitud como una medición indirecta de la concentración de sales en el agua. Esto se debe a que el agua subterránea se puede considerar como una solución electrolítica, con los iones de sus constituyentes mayores y menores disueltos, lo que hace que entre más salina sea el agua, mayor sea su conductividad eléctrica. Sin embargo, esta medición no distingue el tipo de iones particulares que se encuentran en el agua, por lo que da una caracterización global únicamente. La conductividad eléctrica se mide comúnmente en  $\mu S/cm$ .

Para medir la concentración de sales en el agua también se pueden usar los sólidos disueltos totales (TDS, por sus siglas en inglés), y para convertir entre  $\mu S/cm$  y TDS en mg/l para aguas naturales el factor de conversión está usualmente entre 0.55 y 0.75 (Holzbecher, 1998).

A partir del propósito para el cual se vaya a utilizar el agua, podemos clasificarla, por ejemplo, el agua de mar tiene una concentración de TDS de 1025 kg/m<sup>3</sup>, que, al compararla con una salmuera saturada, tiene una baja concentración, pues ésta es de alrededor de 1350 kg/m<sup>3</sup>. Sin embargo, para propósitos comunes como el riego de cultivos, el agua de mar es demasiado salada pues éstos con frecuencia no toleran ese nivel de concentración, lo mismo sucede con su uso como agua potable o para propósitos industriales, donde, por ejemplo, sus efectos corrosivos no le permiten que se utilice para enfriar centrales térmicas.



A continuación se presenta una tabla en la que se muestra una clasificación del agua a partir de la cantidad de TDS en mg/l.

<b>Categoría</b>	<b>Sólidos disueltos totales (mg/l)</b>
Agua dulce	0–10 <sup>3</sup>
Agua salobre	10 <sup>3</sup> –10 <sup>4</sup>
Agua salada (de mar)	10 <sup>4</sup> –10 <sup>5</sup>
Salmuera	>10 <sup>5</sup>

Tabla 3.1. Clasificación del agua por TSD (Holzbecher, 1998).

A continuación describimos la dependencia de algunas propiedades de los fluidos con respecto a los cambios de salinidad.

### 3.2.7. Densidad

En términos de la fracción de masa y la temperatura, se utiliza Holzbecher (1998) menciona la ecuación

$$\rho = 1000(1 + 0.805 c_m - 65 \times 10^{-6}(T - 4 + 220 \cdot c_m)^2) \quad (7)$$

Donde se considera que la densidad del agua en la superficie del mar puede encontrarse entre 1022 y 1028  $\frac{kg}{m^3}$  dando como densidad promedio del mar 1025  $\frac{kg}{m^3}$ . Las características del agua de mar a 20°C se muestran en la siguiente tabla (Holzbecher, 1998).

<b>Fracción de masa</b>	<b>Salinidad <math>c_m</math> (ppt)</b>	<b>Clorinidad (ppt)</b>	<b>Densidad <math>\left(\frac{kg}{m^3}\right)</math></b>
3.5	34.84	19.29	1024.5

Tabla 3.2. Características medidas del agua de mar a 20°C (Holzbecher, 1998).

Si se establece una relación lineal entre la salinidad y la densidad, Holzbecher menciona que el coeficiente de variabilidad está dado por  $700 \frac{kg}{m^3}$  y que hay autores que sugieren  $756 \frac{kg}{m^3}$ .

Otra relación para la mezcla de fluidos con densidades  $\rho_0$  y  $\rho_s$  en términos de la fracción de masa está dada por:

$$\rho^{-1} = (1 - c_m)\rho_0^{-1} + c_m\rho_s^{-1} \quad (8)$$

Que en comparación con los datos medidos a 20°C y 1 atm de presión, muestra que la relación coincide con la relación exponencial

$$\rho = \rho_0 \left( \frac{\rho_s}{\rho_0} \right)^{c_m} \quad (9)$$

La comparación de estas expresiones va a hasta el límite de la solubilidad del 26%. Holzbecher menciona también que una prueba relacionada con la sal emplea la fórmula:

$$\rho = \rho_0 e^{0.6923 c_m} \quad (10)$$

Donde  $c_m$  representa la concentración de masa de NaCl que es el único componente de sal en esta expresión,  $\rho_0$  es la densidad del agua dulce dada por  $998.2 \frac{kg}{m^3}$ .

En SUTRA se supone una relación lineal entre la salinidad y la densidad, el coeficiente de variabilidad de la densidad está dado como  $700 \text{ kg/m}^3$  (Voss y Provost, 2010).

### **3.2.8. Viscosidad dinámica**

La dependencia de la viscosidad dinámica de un fluido con respecto a la salinidad tiene varias maneras de representarse de acuerdo con Holzbecher (1998). Por ejemplo, dada en términos de la fracción de masa tenemos:

$$\mu = \mu_0(1 + 1.85 c_m - 4.1 c_m^2 + 44.5 c_m^3) \quad (11)$$

Donde  $\mu_0 = 0.001002 \text{ Pa} \cdot \text{s}$  es la viscosidad dinámica del agua dulce.

O también Holzbecher tiene la expresión

$$\mu = \mu_0(1 + 0.005\sqrt{\sum_{i=1,N} c_i} + \sum_{i=1,N} A_i c_i) \quad (12)$$

Donde  $c_i$  representa la concentración de un ion  $i$  y  $A_i$  son las temperaturas que dependen de los coeficientes.

### 3.2.9. Dependencia de la presión

#### 3.2.9.1. Compresibilidad

Uno de los parámetros que indiscutiblemente depende de la presión es la compresibilidad. Holzbecher (1998) indica que a 1.02 atmósferas se puede considerar  $\beta = 5.11 \times 10^{-5} [1/\text{bar}]$  mientras que Ahmed (2001) la considera como  $\beta = 4.47 \times 10^{-10} \frac{\text{m} \cdot \text{s}^2}{\text{kg}}$  para areniscas compactadas. En el modelo de esta tesis, utilizamos los valores de Ahmed (2001) porque la roca de nuestro caso de estudio es arenisca.

### 3.2.10. Dependencia de la temperatura, salinidad y presión

Hay expresiones que no dependen solamente de uno de los parámetros, sino de dos o hasta de los tres. En esta sección mostramos algunas para la densidad y la viscosidad dinámica.

#### 3.2.10.1. Densidad

En la tabla 3.3 se muestran los rangos de aplicabilidad para el cálculo de la densidad de la salmuera calculadas con estas ecuaciones. De acuerdo con los parámetros que mencionamos en el capítulo 2, es idónea para nuestro caso de estudio.

Estudio	Presión (MPa)	Temperatura (°C)	Salinidad (fracción de masa)
Batzle y Wang (1992)	5-100	20-350	$\leq 0.32$

Tabla 3.3. Rangos de aplicabilidad para calcular la densidad de una salmuera.

Para hacer la modelación computacional en SUTRA, para tener una densidad apropiada a las condiciones de salinidad, presión y temperatura, se requiere una recta que aproxime los valores correspondientes. En nuestro caso, se utilizó una recta para aproximar la densidad, basándonos en Koziy (2009). A continuación se muestra la gráfica de la densidad de la salmuera como función de la salinidad, la presión y la temperatura.

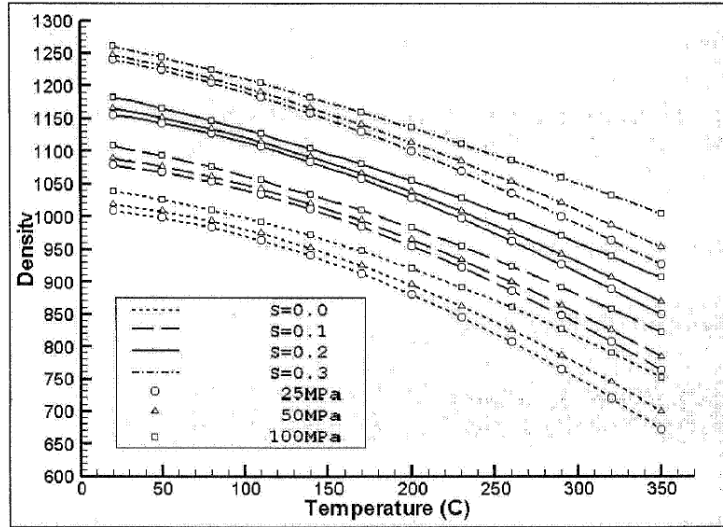


Figura 3.2. Gráfica de la densidad como función de la temperatura para algunos valores de salinidad y presión usando las ecuaciones 3.1 y 3.2 (tomada de Koziy, 2009).

### 3.2.10.2. Viscosidad dinámica

Si consideramos la dependencia de la viscosidad dinámica del fluido con respecto a la concentración de sales y la temperatura, podemos utilizar la expresión de Batzle y Wang (1992) para salinidades de 0, 240000 y 100000 ppm y temperaturas menores a 250°C:

$$\mu_B(T, S) = 0.1 + 0.333S + (1.65 + 91.9S^3)e^{\{-[0.42(S^{0.8}-0.17)^2 + 0.045]T^{0.8}\}} \quad (13)$$

donde  $\mu_B$  es la viscosidad dinámica de la salmuera en cP, S es la salinidad en fracción de masa y T es la temperatura en °C. Las unidades para la viscosidad dinámica utilizadas en el modelo son Pa·s, 1 Pa·s = 1 000 cP.

En la siguiente gráfica se observa la viscosidad dinámica dependiendo de la temperatura para distintos valores de salinidad.

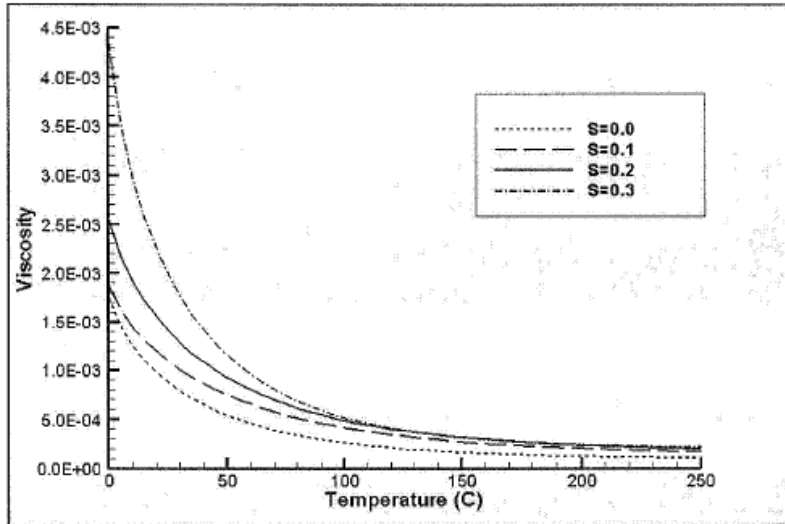


Figura 3.3. Viscosidad dinámica con dependencia de la salinidad. Los valores están en Pa·s. Tomada de Koziy (2009).

Comparando los valores arrojados por esta expresión con los de Voss y Provost (2010), vemos que para temperaturas de hasta 120°C la diferencia es mínima.

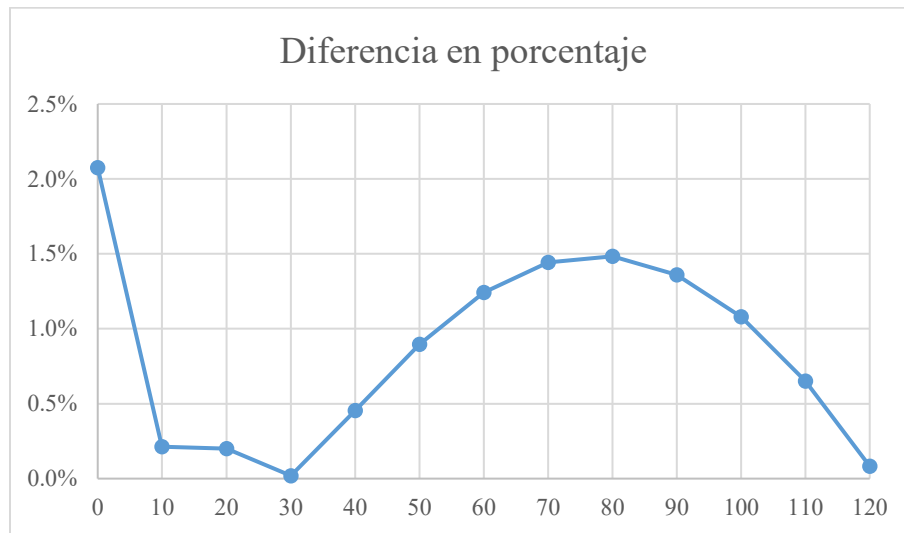


Figura 3.4. Diferencia en porcentaje entre las expresiones de viscosidad dinámica tomadas de Koziy (2009) y Voss y Provost (2010).

### **3.3. Formulación axiomática de flujo impulsado por cambios de densidad en medios porosos**

Derivaremos el modelo matemático del problema que nos interesa mediante la formulación axiomática que se presenta en el libro de Herrera y Pinder (2012). Ésta se basa en las ecuaciones generales de balance que permiten plantear las ecuaciones diferenciales parciales que describen el problema.

El primer paso en la formulación axiomática es especificar las hipótesis del modelo a desarrollar. En este caso éstas son:

- La matriz del medio poroso está saturada por el fluido que contiene sales disueltas provenientes de las evaporitas de La Virgen y Minas Viejas.
- La matriz sólida no se mueve.
- La matriz sólida es elástica. Específicamente, la porosidad depende de la presión del agua.
- El fluido es incompresible.
- La densidad del fluido satisface una ecuación de estado en la que la densidad depende de la concentración de sales y de la temperatura.
- La velocidad del fluido satisface la ley de Darcy.
- El fluido no está sujeto a procesos de difusión.
- La temperatura de la matriz sólida es igual a la del fluido (ya que la transferencia de calor entre las fases es un proceso rápido con respecto a otros mecanismos de transferencia de calor).

Se considera que el sistema en cuestión tiene dos fases: 1) la sólida, correspondiente a la matriz rocosa, y 2) la líquida, correspondiente al fluido con las sales disueltas.

Fases	Componentes
Líquida	Sales disueltas
Sólida	Matriz sólida

Tabla 3.4. Fases y componentes para la formulación axiomática del modelo matemático

En cada lugar del acuífero hay una sola partícula de cada fase y ésta se mueve a su propio ritmo, por ello, si subdividimos el acuífero en subdominios más pequeños y nos fijamos en uno en el que se encuentren dos conjuntos de partículas, cada uno correspondiente a cada una de las fases, en un instante de tiempo posterior, pueden ya no ser los mismos conjuntos de partículas y aquellos en los que nos fijamos al principio, pueden estar ocupando subdominios distintos del acuífero.

En nuestro problema, aunque el sistema de flujo es de dos fases: la matriz sólida y el fluido que se contiene en sus poros, suponemos que la fase sólida está en reposo y esto nos permite tratarlo como una sola fase, la líquida con el fluido como único componente. Por lo anterior, la única propiedad extensiva será la masa del fluido. Como la matriz sólida está saturada, la masa del fluido contenido en un volumen  $B(t)$  ocupado por el sistema se da por

$$M_w(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) \rho_w(\underline{x}, t) dx \quad (14)$$

donde  $\varepsilon$  es la porosidad y  $\rho_w$  es la densidad del agua que depende de la concentración de sales, la temperatura y la presión  $\rho_w(S, T, P)$  en nuestro modelo.

Como nos interesa el movimiento de la salmuera, entonces  $B(t)$  se moverá con la velocidad del fluido. Cuando el medio poroso está saturado, la parte del espacio físico ocupado por el fluido es la porosidad. Entonces  $\varepsilon \rho_w$  es la masa de fluido por unidad de volumen del espacio físico ocupado por el sistema completo a lo que denominaremos la propiedad intensiva asociada con la masa del fluido.

Entonces, la ecuación diferencial de balance está dada por



$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_w \underline{v}) = 0 \quad (15)$$

donde  $\varepsilon\rho_w$  está en función de la temperatura y de la concentración de sales en el fluido. Ahora, necesitamos explicitar la dependencia de  $\varepsilon\rho_w$  con la presión del fluido. Esto es, expresar la derivada de  $\varepsilon\rho_w$  con respecto al tiempo en términos de la derivada de la presión.

Para ello, procedemos a descomponer la derivada de  $\varepsilon\rho_w$  respecto al tiempo en dos contribuciones: una para la compresibilidad del fluido y otra para la elasticidad de la matriz sólida si aplicamos la fórmula de la derivada para un producto:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial(\rho_w)}{\partial t} + \rho_w \frac{\partial(\varepsilon)}{\partial t} \quad (16)$$

Aquí el término  $\frac{\partial(\rho_w)}{\partial t}$  es la contribución de la compresibilidad del fluido, mientras que el término  $\frac{\partial(\varepsilon)}{\partial t}$  es la contribución de la elasticidad de la matriz sólida como un todo.

Resumiendo, tenemos que  $\rho_w(S, T, P)$  y la ecuación de balance  $\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_w \underline{v}) = 0$ .

A continuación introduciremos la ley de Darcy y el nivel piezométrico que arroja la carga hidráulica. La primera nos permite establecer la velocidad fluido y el segundo se mide como una altura del fluido en unidades de longitud.

$$\underline{u} = -\frac{k}{\mu} (\nabla P + \rho_w \underline{g}) = -\frac{k\rho_w \hat{g}}{\mu} \left( \frac{\nabla P}{\rho_w \hat{g}} + (0, 0, 1) \right) = -\frac{K}{\mu} \nabla h \quad (17)$$

donde  $\underline{K} = \frac{\rho_w \hat{g}}{\mu} \underline{k}$ ;  $\hat{g}$  es la gravedad,  $\rho_w$  depende de  $S, T$  y  $P$  y  $\underline{u}$  es la componente de la velocidad del fluido.

Con lo anterior podemos escribir la ecuación de balance como

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \underline{u}) = 0 \quad (18)$$

entonces

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_w \underline{K} \nabla h) = 0 \quad (19)$$

Si el fluido es incompresible la carga hidráulica depende de la presión y un nivel de referencia  $z$ , es decir,  $h(\underline{x}, t) \equiv H(P(\underline{x}, t), z(\underline{x}))$  o más explícitamente

$$h(x, t) \equiv \frac{P(x, t) - P_0}{\rho_w \hat{g}} + z(x) \quad (20)$$

Otra propiedad importante de la carga piezométrica, que a su vez motiva su uso extensivo, es

$$\nabla P + \rho_w \bar{g} \nabla z = \rho_w \bar{g} \nabla h. \quad (21)$$

Continuando con nuestro análisis tenemos que

$$h_0 = \frac{P}{\rho_0 \hat{g}} + z, \quad \underline{K}_0 = \frac{\rho_0 \hat{g}}{\mu} \underline{k} \quad (22)$$

donde  $h_0$  es la carga hidráulica inicial y  $\rho_0$  es la densidad inicial del fluido.

Entonces

$$P = (h_0 - z) \rho_0 \hat{g} \quad (23)$$

Considerando que  $\bar{g} = (0, 0, -1)$ , considerando que  $z$  es positivo hacia abajo y sustituyendo en (17) tenemos

$$\begin{aligned}
\underline{u} &= -\frac{k}{\mu} \left( \nabla \left[ (h_0 - z) \rho_0 \hat{g} \right] + \rho_w \bar{g} \right) \\
&= -\frac{k}{\mu} \left( \rho_0 \hat{g} \nabla h_0 - \rho_0 \hat{g} (0,0,1) - \rho_w \bar{g} \right) \\
&= -\frac{k}{\mu} \left( \rho_0 \hat{g} \nabla h_0 - \hat{g} (\rho_0 - \rho_w) (0,0,1) \right) \\
&= -\frac{k}{\mu} \rho_0 \hat{g} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) (0,0,1) \right) \\
&= -\frac{k_0}{\mu} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right).
\end{aligned} \tag{24}$$

Por lo anterior,

$$\nabla \cdot (\rho_w \underline{u}) = \nabla \cdot \left( \rho_w \left[ -\frac{k_0}{\mu} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right) \right] \right) \tag{25}$$

Finalmente, para escribir completa la ecuación de balance de la masa del fluido volvemos a la ecuación

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \rho_w \bar{g} \frac{\partial h}{\partial t} \tag{26}$$

y como

$$P = (h_0 - z) \rho_0 \hat{g} \tag{27}$$

entonces

$$\frac{\partial h_0}{\partial t} = \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t} \tag{28}$$

por lo tanto

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_w}{\partial t} = \rho_w \left\{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{tot} - \beta_s) \right\} \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t} \tag{28}.$$

Así tenemos la ecuación para la carga hidráulica obtenida mediante la formulación axiomática

$$\rho_w \left\{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{tot} - \beta_s) \right\} \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_w \left[ -\frac{k_0}{\mu} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right) \right] \right) = 0 \tag{29}$$

### 3.3.1. Balance de energía

En el caso que nos ocupa es posible hacer el balance de energía utilizando la velocidad asociada a la fase correspondiente.

Para nuestro sistema las propiedades extensivas serán energía total de la fase líquida  $E^w(t)$  y la energía total de la fase sólida  $E^s(t)$  de tal manera que

$$E^w(t) \equiv \int_{B_w(t)} \varepsilon \rho_w S_w \left( \frac{1}{2} |\underline{v}^w|^2 + U_w \right) d\underline{x} \quad (30)$$

y ya que la velocidad de la fase sólida es cero

$$E^s(t) \equiv \int_{B_s(t)} (1 - \varepsilon) \rho_s U_s d\underline{x} \quad (31)$$

donde

$U_\alpha$  es la energía interna específica por unidad de masa de la fase sólida o líquida, según corresponda.

$S_w$  se refiere a la fracción del volumen de los poros en la matriz sólida ocupada por el agua.

$S_w = 1$  ya que en la fase líquida tenemos una sola componente.

La energía cinética del agua es despreciable pues  $\underline{v}^w$  es muy pequeña, entonces la ecuación (30) queda como sigue

$$E^w(t) \equiv \int_{B_w(t)} \varepsilon \rho_w U_w d\underline{x} \quad \left( S_w = 1, |\underline{v}^w| \approx 0 \right) \quad (32)$$

Con lo anterior identificamos la propiedad intensiva para la fase agua  $\psi^w = \varepsilon \rho_w U_w$  y la propiedad intensiva para la fase sólida  $\psi^s = (1 - \varepsilon) \rho_s U_s$ .

Ahora obtengamos las ecuaciones de balance, partiendo de la derivada total

$$\frac{dE^w}{dt} = \int_{B_w(t)} \left\{ \rho_w [\varepsilon h_w - g(\underline{u}_w)_z] - q_L^w + g_I^{E^w} \right\} d\underline{x} + \int_{\partial B_w} (\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \underline{\underline{v}}^w + q^w) \cdot \underline{nd\underline{x}} \quad (33)$$

donde

$\rho_w \varepsilon h_w$  es la tasa por unidad de volumen del espacio físico en el que se suministra energía interna a la fase líquida por fuentes distribuidas en el interior del cuerpo (por ejemplo, reacciones químicas exotérmicas),

$q_L^w$  es la pérdida de calor de la fase líquida por la sobrecarga por unidad de volumen del espacio físico,

$g(\underline{u}_w)_z$  (g aceleración de la gravedad  $\underline{u}_w = \varepsilon \underline{v}^w$ ) es el trabajo mecánico realizado por la fuerza gravitacional en la fase líquida,

$g_I^{E^w}$  energía total que entra en la fase líquida proveniente de la fase sólida

y los flujos de energía ( $\tau^w$ 's) que entran a la fase líquida por su frontera son:

$q^w$  flujo de calor

$\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \underline{\underline{v}}^w$  trabajo mecánico realizado en la frontera de la fase  $w$  y

$$g_I^{E^w} + g_I^{E_s} = 0.$$

Suponemos que  $g(\underline{u}_w)_z = 0$ , es decir, despreciamos el trabajo realizado por fuerzas viscosas

$$\underline{\underline{\sigma}}^w = -P_w \underline{\underline{I}}$$

donde

$P_w$  es la presión de la fase líquida

$\underline{\underline{I}}$  es la identidad

$$\int_{\partial B_w} (\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \underline{\underline{v}}^w) \cdot \underline{nd\underline{x}} = \int_{\partial B_w} (\varepsilon P_w \underline{\underline{I}} \underline{\underline{v}}^w) \cdot \underline{nd\underline{x}} = \int_{\partial B_w} P_w \underline{u}^w \cdot \underline{nd\underline{x}} \quad (34)$$

Entonces

$$\frac{dE^w}{dt} = \int_{B_w} \left\{ \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^{E^w} \right\} d\underline{x} + \int_{\partial B_w} (q^w - P_w \underline{u}^w) \cdot \underline{nd\underline{x}} \quad (35)$$

donde

$$g^w = \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^{E^w} \quad (36)$$

$$\tau^w = q^w - P_w \underline{u}^w \quad (37)$$

Recordando la ecuación general de balance

$$\frac{\partial(\phi^w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^w \phi^w) = \nabla \cdot \tau^w + g^w \quad (38)$$

en ella ahora podemos sustituir los términos correspondientes

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w U_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^w \varepsilon \rho_w U_w) = \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^w. \quad (39)$$

Para introducir la temperatura usando la formulación del libro de Herrera y Pinder (2012) tenemos

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} = U_w \frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \varepsilon \rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} \quad (40)$$

y

$$\nabla \cdot (\underline{u}^w \rho_w U_w) = U_w \nabla \cdot (\underline{u}^w \rho_w) + \rho_w \underline{u}^w \nabla \cdot U_w. \quad (41)$$

Por la ecuación de continuidad en medios porosos

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \underline{u}^w) = 0 \quad (42)$$

Por consiguiente

$$\varepsilon \rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} + \rho_w \underline{u}^w \cdot \nabla U_w = \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^w. \quad (43)$$

Recordando que  $\frac{D(\bullet)}{Dt} = \frac{\partial(\bullet)}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla(\bullet)$  tenemos

$$\varepsilon \rho_w \frac{D(U_w)}{Dt} = \varepsilon \rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} + \rho_w \underline{u}^w \cdot \nabla U_w = \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^w \quad (44)$$

entonces

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{1}{\varepsilon \rho_w} \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}. \quad (45)$$

Consideremos

$$\nabla \cdot (P_w \underline{u}^w) = \nabla \cdot (\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + \varepsilon P_w \nabla \cdot \underline{v}^w \quad (46)$$

Y ahora sustituimos en la ecuación que teníamos de  $\frac{DU_w}{Dt}$  para obtener

$$\frac{DU_w}{Dt} = \nabla \cdot \frac{\underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{1}{\varepsilon \rho_w} \left( \nabla (\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + \varepsilon P_w \nabla \cdot \underline{v}^w \right) + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^{E_w}}{\varepsilon \rho_w} (**) \quad (47)$$

Volviendo a la ecuación de continuidad tenemos

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \varepsilon \rho_w \nabla \cdot \underline{v}^w + \underline{v}^w \cdot \nabla(\varepsilon \rho_w) = 0 \quad (48)$$

Entonces

$$\varepsilon \rho_w \nabla \cdot \underline{v}^w = -\frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} \quad (49)$$

Entonces

$$\nabla \cdot \underline{v}^w = -\frac{1}{\varepsilon \rho_w} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} \quad (50)$$

Sustituyendo en la ecuación (49) tenemos

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla (\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{P_w}{\varepsilon \rho_w} \left( \frac{1}{\varepsilon \rho_w} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} \right) + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^{E_w}}{\varepsilon \rho_w} \quad (51)$$

Entonces

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla (\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{P_w}{\varepsilon \rho_w^2} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^{E_w}}{\varepsilon \rho_w} \quad (52)$$

Como  $V_w \equiv \frac{1}{\rho_w}$  entonces

$$\frac{DV_w}{Dt} = \frac{\partial V_w}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla V_w = \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla (\rho_w^{-1}) = -\rho_w^{-2} \frac{\partial \rho_w}{\partial t} - \rho_w^{-2} \underline{v}^w \cdot \nabla \rho_w = -\frac{1}{\rho_w^2} \frac{D\rho_w}{Dt} \quad (53)$$

Además

$$\frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} = \varepsilon \frac{D(\rho_w)}{Dt} + \rho_w \frac{D(\varepsilon)}{Dt} \quad (54)$$

Y por otro lado tenemos que por la incompresibilidad de un fluido en un medio poroso

$$\frac{D(\varepsilon)}{Dt} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \underline{v}^w) = 0 \quad (55)$$

Por lo que  $\rho_w \frac{D(\varepsilon)}{Dt} = 0$ , entonces  $\frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} = \varepsilon \frac{D(\rho_w)}{Dt}$ .

Reescribiendo tenemos

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + P_w \frac{D(V_w)}{Dt} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w} \quad (56)$$

Podemos suponer que  $U(T)$  y sabemos que  $\rho_w(S, T, P)$  por lo que

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\partial U_w}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla U_w = \frac{dU_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \left( \frac{dU_w}{dT_w} \nabla T_w \right) \quad (57)$$

Además recordemos que  $\nabla U_w = \left( \frac{\partial U_w}{\partial x_1}, \frac{\partial U_w}{\partial x_2}, \frac{\partial U_w}{\partial x_3} \right)$ ;  $\frac{\partial U_w}{\partial x_i} = \frac{dU_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial x_i}$  y como  $V_w = \rho_w^{-1}$  y

$\rho_w(S, T, P)$  entonces  $V_w(S, T, P)$  por lo que

$$\frac{DV_w}{Dt} = \frac{dV_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial t} + \frac{\partial V_w}{\partial T_w} \underline{v}^w \cdot \nabla T_w = \frac{\partial V_w}{\partial T_w} \frac{DT_w}{Dt} \quad (58)$$

Sustituyendo



$$\frac{dU_w}{dT_w} \frac{DT_w}{Dt} + P_w \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial T_w} \frac{DT_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w} \quad (59)$$

donde el calor específico es  $c_w = \frac{dU_w}{dT_w} + P_w \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial T_w}$

entonces nos queda la ecuación de balance para el líquido

$$c_w \frac{DT_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w} \quad (60)$$

$$c_w \left\{ \frac{\partial T_w}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla T_w \right\} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

y ahora procedemos con el desarrollo de la ecuación de balance para el sólido, donde la propiedad extensiva es  $E^s$  y la propiedad intensiva asociada es  $(1-\varepsilon)\rho_s U_s$  con las que podemos escribir la ecuación

$$\frac{dE^s}{dt} = \int_{B(t)} \{g_I^s - q_L^s\} d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} q^s \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (61)$$

Consideramos que  $\underline{v}_s = 0$  y lo escribimos en la ecuación de balance en su forma de ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s \quad (62)$$

entonces

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} + U_s \frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s}{\partial t} \quad (63)$$

y por la ecuación de continuidad para el sólido  $\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s}{\partial t} = 0$  nos queda

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s \quad (64)$$

dividimos por  $(1-\varepsilon)\rho_s$  y obtenemos

$$\frac{\partial U_s}{\partial t} = \frac{1}{(1-\varepsilon)\rho_s} (\nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s) = \frac{dU_s}{dT_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (65)$$

Con lo que tenemos la ecuación de balance para el sólido

$$(1-\varepsilon)\rho_s \frac{dU_s}{dT_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + g_{T_s}^{E_s} - q_{L_s}^s \quad (66)$$

$$c_s = \frac{dU_s}{dT_s} \quad (67)$$

Sumando las ecuaciones de balance para el sólido y el líquido donde suponemos que  $T_s = T_w = T$ , ya que se igualan instantáneamente, y multiplicando por  $\varepsilon\rho_w$  tenemos

$$\varepsilon\rho_w c_w \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla T \right\} = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + h_w \varepsilon\rho_w - q_{L_w}^w + g_{T_w}^{E_w} \quad (68)$$

$$\left[ (1-\varepsilon)\rho_s c_s + \varepsilon\rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon\rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + h_w \varepsilon\rho_w - q_{L_w}^w - q_{L_s}^s + \nabla \cdot \underline{q}^s \quad (69)$$

Recordemos que  $g_{T_w}^{E_w} + g_{T_s}^{E_s} = 0$  es el intercambio de energía del sólido con el líquido y que no hay fuentes o sumideros de la fase sólida. Además, no hay fuentes internas de energía, las fuentes por reacciones químicas son despreciables. Por tanto, la ecuación queda:

$$\left[ (1-\varepsilon)\rho_s c_s + \varepsilon\rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon\rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w - q_{L_w}^w - q_{L_s}^s + \nabla \cdot \underline{q}^s \quad (70)$$

Definimos la emisión de calor específico de fuentes de calor en el agua  $Q_T^w$  del término  $-q_{L_w}^w = \varepsilon\rho_w Q_T^w$  y análogamente, la emisión de calor específico de fuentes en la fase sólida  $Q_T^s$  a partir de  $-q_{L_s}^s = (1-\varepsilon)\rho_s Q_T^s$ .

Por otro lado, los términos difusivos son:

$$\underline{q}^w = \varepsilon(\underline{\lambda}_w \cdot \nabla T + \underline{\lambda}_D \cdot \nabla T) \quad (71)$$

$$\underline{q}^s = (1-\varepsilon)(\underline{\lambda}_s \cdot \nabla T) \quad (72)$$

donde  $\underline{\lambda}_w$  es el coeficiente de la conductividad térmica del agua (tensor diagonal),  $\underline{\lambda}_D$  es el tensor de dispersión térmica y  $\underline{\lambda}_s$  es el coeficiente de conductividad térmica de la matriz sólida.

El término  $-\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w$  proviene del trabajo mecánico en la frontera de w

$$\int_{\partial B_w} (\underline{\varepsilon} \underline{\sigma}^w \cdot \underline{v}^w) \cdot n d\underline{x} \quad (73)$$

De acuerdo con Herrera y Pinder (2012), si despreciamos el calor que se deriva del trabajo producido por las fuerzas viscosas, el término derivado de eso es

$$\underline{\varepsilon} \underline{\sigma}^w \cdot \underline{v}^w = -P_w \underline{u}_w \quad (74)$$

En un trabajo previo, todo el calor producido por el trabajo en la frontera se desprecia, por lo que  $P_w \underline{u}_w = 0$  (Koziy, 2009) y finalmente queda la ecuación de la siguiente manera

$$\left[ (1-\varepsilon) \rho_s c_s + \varepsilon \rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (\varepsilon (\underline{\lambda}_w \cdot \nabla T + \underline{\lambda}_D \cdot \nabla T)) + \varepsilon \rho_w Q_T^w + (1-\varepsilon) \rho_s Q_T^s + \nabla \cdot ((1-\varepsilon) (\underline{\lambda}_s \cdot \nabla T))$$

y simplificamos usando

$$c_e = \left[ (1-\varepsilon) \rho_s c_s + \varepsilon \rho_w c_w \right] \quad (75)$$

$$\underline{\lambda}_e = \varepsilon \underline{\lambda}_w + (1-\varepsilon) \underline{\lambda}_s \quad (76)$$

$$Q_T = \varepsilon \rho_w Q_T^w + (1-\varepsilon) \rho_s Q_T^s \quad (77)$$

Para tener

$$c_e \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot ((\underline{\lambda}_e + \varepsilon \underline{\lambda}_D) \cdot \nabla T) + Q_T \quad (78)$$

### 3.3.2. Transporte en medios porosos

Como suponemos que el acuífero se encuentre saturado, pero el agua únicamente llena los poros de la roca, y cualquier soluto está disuelto en el agua, la masa del soluto en el fluido está dada por:

$$M_s(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (79)$$

donde  $c(\underline{x}, t)$  es la concentración del soluto en el fluido, dada en nuestro problema por la masa de sales por volumen de agua. Entonces, la propiedad intensiva asociada a la masa del soluto es la porosidad por la concentración del soluto:  $\varepsilon(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t)$ .

La ecuación global del balance para la masa de un soluto es:

$$\frac{dM_s}{dt}(t) = \int_{B(t)} g_s(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B} \tau_s(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (80)$$

que es equivalente a:

$$\frac{\partial(\varepsilon c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) = g_s + \nabla \cdot \tau_s \quad (81)$$

El vector del flujo difusivo está dado por

$$\tau_s(\underline{x}, t) = \varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c \quad (82)$$

donde  $\underline{D}$  es el tensor de dispersión hidrodinámica, cuya expresión es

$$D_{ij} = D_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|} + D_a \theta \delta_{ij} \quad (83).$$

A éste se le puede descomponer en dos partes: el tensor de dispersión molecular  $D_{ij}^m = D_a \theta \delta_{ij}$  y

el tensor de dispersión mecánica  $D_{ij}^M = D_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|}$ . Aquí,  $\theta$  es un número real,

menor que uno, y se refiere a la tortuosidad, lo cual depende de la estructura de la matriz sólida.

$D_T$  es el coeficiente de dispersividad mecánica transversal y  $D_L$  es el coeficiente de dispersividad mecánica longitudinal.

La ecuación queda entonces como:

$$\frac{\partial(\varepsilon c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) - \nabla \cdot (\varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c) = g_s \quad (84)$$

## 4. Revisión de software

Los modelos matemáticos por lo general tienen solución analítica para problemas sencillos únicamente, por lo que, para aplicarlos a casos reales, éstos se convierten en modelos numéricos, basados en discretizaciones de sus ecuaciones (PONER ALGUNA REFERENCIA). A su vez, para resolver los modelos numéricos es conveniente desarrollar modelos computacionales, que son la implementación de las ecuaciones numéricas y sus soluciones a través de programas de cómputo (software). En esta tesis hacemos uso de un simulador ya existente, sin embargo, no siempre es posible utilizar un programa que esté disponible tal como comentamos en el capítulo 1.

En esta tesis se hizo una revisión de software libre disponible para resolver el problema de interés. Notamos que cada programa permite el uso de diversas ecuaciones y parámetros y es específico para distintos tipos de problemas relacionados con el flujo de agua, el flujo de agua con densidad similar a la del mar o variaciones de temperatura en el flujo. Aunque ya existen programas que permiten simular problemas semejantes al de esta tesis como el desarrollado por Koziy (2009) o COMSOL Multiphysics, éstos no tienen libre acceso para ser compartidos, utilizados o modificados.

Los programas mostrados en la siguiente tabla permiten simular las diversas hipótesis que hemos abordado en esta tesis desde varias perspectivas, sin embargo, para elegir el que se ajustaba mejor a nuestro caso de estudio, debíamos cuidar varios aspectos, por ejemplo, la manera en que el software aborda las no linealidades en el sistema de ecuaciones, los rangos de presión, de temperatura y de salinidad y algunas propiedades del fluido como la densidad y la viscosidad, que rigen el flujo en un medio poroso.

## **4.1. Comparación del software disponible**

### **4.1.1. Hydrotherm**

Este software del USGS simula flujo de agua subterránea en múltiples fases y el transporte de energía térmica asociada en tres dimensiones. Está desarrollado en Fortran 90 y utiliza el método de diferencias finitas. No permite la estimación de parámetros. Puede manejar altas presiones de fluido, de hasta  $1 \times 10^9$  Pa ( $10^4$  atm) y altas temperaturas de hasta 1200 °C.

No puede simular aguas subterráneas con salinidad mayor a la del agua de mar.

### **4.1.2. OpenGeoSys**

Simulador de medios porosos fracturados con procesos térmicos, hidráulicos, mecánicos y químicos acoplados mediante multiplataformas.

### **4.1.3. SEAWAT**

Basado en los paquetes de MODFLOW y MT3DMS, es un simulador de flujo de aguas subterráneas impulsado por cambios de densidad en 3D y transporte de especies entre las que puede considerarse el calor, aunque no está diseñado para este último. La formulación de la viscosidad desprecia la dependencia débil de la viscosidad en la presión del fluido.

### **4.1.4. SUTRA**

Software del USGS para flujo de agua subterránea con densidad variable y transporte de energía o de solutos. Puede simular transporte de solutos o de energía, pero no ambos al mismo tiempo.

#### **4.1.5. SHEMAT**

Simulador de acuíferos en 2D y 3D de RWTH AACHEN University. Es muy utilizado en hidrogeotermia por su capacidad de predicción en extracción de calor en acuíferos calientes con salmueras altamente salinas.

Admite el acoplamiento entre el flujo de fluidos, la transferencia de calor y el transporte de especies, por ejemplo, la dependencia de las propiedades del fluido (viscosidad, densidad, conductividad térmica y capacidad de calor específica en la temperatura), la dependencia de la densidad del fluido en la concentración o la conducción de calor no lineal por la dependencia de la temperatura de las conductividades térmicas de la roca.

Tabla 4.1. Comparación de software para la modelación

Nombre	Descripción	Temperatura	Presión	Salinidad	Tipo/Método numérico
HYDROTHERM	Este software del USGS simula flujo de agua subterránea en múltiples fases y el transporte de energía térmica asociada en tres dimensiones. Está desarrollado en Fortran 90 y utiliza el método de diferencias finitas. No permite la estimación de parámetros. Puede manejar altas presiones de fluido, de hasta $1 \times 10^9$ Pa ( $10^4$ atm) y altas temperaturas de hasta 1200 °C. No puede simular aguas subterráneas con salinidad mayor a la del agua de mar.	De 0 a 1200°C	$5 \times 10^4$ Pa o $0.5$ atm a $1 \times 10^9$ pascales o $10^4$ atm	Menor que el agua de mar.	Libre/DF
OpenGeoSys	Simulador de medios porosos fracturados con procesos térmicos, hidráulicos, mecánicos y químicos acoplados mediante multiplataformas.	De acuerdo con los tres estados de fase en el software, se utilizan transformaciones de las siguientes ecuaciones de estado: $S = 0 \text{ y } x_l^1 \leq X_m(P, 0)$ $0 \leq S \leq 1 \text{ y } X_m(P, S) - x_l^1 = 0$ $x_g^1 - X_m(P, S) = 0$ $S = 1 \text{ y } x_g^1 \leq X_m(P, 1)$ Donde S es la saturación, P es la presión, $X_m$ es la fracción molar y $x_l^1$ y $x_g^1$ son las variables			Libre/EF



Nombre	Descripción	Temperatura	Presión	Salinidad	Tipo/Método numérico
		desconocidas de las componentes de la fase líquida y gaseosa respectivamente. (Shao et al., 2015)			
SEAWAT	Basado en los paquetes de MODFLOW y MT3DMS, es un simulador de flujo de aguas subterráneas impulsado por cambios de densidad en 3D y transporte de especies entre las que puede considerarse el calor aunque no está diseñado para este último. La formulación de la viscosidad desprecia la dependencia débil de la viscosidad en la presión del fluido.	<p>“Para flujo que acopla la densidad variable y la simulación de transporte, la densidad del fluido se asume como una función únicamente de la concentración del soluto. Los efectos de la presión y temperatura en el fluido no se consideran. La ecuación lineal que representa la densidad del fluido como una función de la concentración del soluto es:</p> $\rho = \rho_f + \frac{\partial \rho}{\partial C} C$ <p>Los valores para <math>\rho_f</math> y para <math>\frac{\partial \rho}{\partial C}</math> los mete el usuario y dependen de las unidades de la simulación. Para la mayoría de las simulaciones, <math>\rho_f</math> es la densidad del agua dulce y <math>\frac{\partial \rho}{\partial C}</math> se calcula para el rango de las densidades esperadas y las concentraciones.”</p> <p>(Langevin et al., 2003)</p>			Libre/DF
SUTRA	Software del USGS para flujo de agua subterránea con densidad variable y transporte de energía o de solutos.	Se hace una aproximación lineal a la densidad mediante:	Se hace una aproximación lineal a la	Amplio rango incluye intrusión salina	Libre/EF

Nombre	Descripción	Temperatura	Presión	Salinidad	Tipo/Método numérico
	Únicamente puede simular transporte de solutos o de energía, pero no ambos al mismo tiempo.	$\rho = \rho(T)$ $\cong \rho_o$ $+ \frac{\partial \rho}{\partial T}(T - T_o)$	densidad mediante: $\rho = \rho(C)$ $\cong \rho_o$ $+ \frac{\partial \rho}{\partial C}(C - C_o)$		
SHEMAT	<p>Simulador de acuíferos en 2D y 3D de RWTH AACHEN University. Es muy utilizado en hidrogeotermia por su capacidad de predicción en extracción de calor en acuíferos calientes con salmueras altamente salinas.</p> <p>Admite el acoplamiento entre el flujo de fluidos, la transferencia de calor y el transporte de especies, por ejemplo, la dependencia de las propiedades del fluido (viscosidad, densidad, conductividad térmica y capacidad de calor específica en la temperatura), la dependencia de la densidad del fluido en la concentración o la conducción de calor no lineal por la dependencia de la temperatura de las conductividades térmicas de la roca.</p>	0 a 1000°C	0 a 100 MPa	Salmueras altamente salinas, inyección salina, soluciones altamente salinas	Libre comprando libro/DF

## 4.2. Conclusiones de la comparación

Para la modelación del caso de estudio en esta tesis se puede emplear SEAWAT que puede simular la temperatura como una de las especies al introducir los coeficientes de transporte necesarios, sin embargo, se deben hacer varias consideraciones para ellos, por ejemplo, para rangos altos de temperaturas la capacidad calorífica del agua puede no ser constante, y también la conductividad térmica es una función de la temperatura en dichos rangos de acuerdo con la documentación de este software; además, se fija una densidad del fluido representativa para la simulación independientemente de si la densidad cambia o no, utilizando un “coeficiente de retardación” para transporte de solutos y calor:  $K_{d_{temp}} = \frac{C_{p_{solid}}}{C_{p_{fluid}}}$  que contiene la densidad del fluido, por lo que el usuario debe asignar un valor de densidad para el fluido antes de ejecutar la simulación.

Mientras que SEAWAT está formulado en términos de una carga de referencia, SUTRA está formulada en términos de la presión (Langevin et al, 2008).

Elegimos utilizar SUTRA porque es un programa bien conocido y bien documentado además de que permite analizar los casos que se hicieron por separado, como un acercamiento sencillo al problema: nos permite simular de manera acoplada presión y temperatura, pero nos permite visualizar los efectos por separado de estos parámetros en la densidad y flujo del fluido.

En un estudio futuro se podría utilizar SHEMAT u OpenGeoSys para abordar el problema desde un enfoque más completo, considerando tanto el efecto de la temperatura como el de la salinidad en la densidad del agua.

## **5. Prueba de hipótesis mediante la modelación matemática del yacimiento de cobre de San Marcos**

En este capítulo presentamos la prueba de dos hipótesis sobre cómo se genera el movimiento ascendente de las salmueras en la diagénesis del yacimiento de cobre de San Marcos mediante un modelo matemático sencillo utilizando SUTRA del USGS (Voss y Provost, 2010).

En la primera hipótesis suponemos que el gradiente geotérmico produce un movimiento convectivo ascendente a través de la falla de San Marcos, como lo proponen García-Alonso et al. (2010). Esta hipótesis requiere de un modelo de flujo y transporte de energía, y si la convección produjera un patrón de flujo que ascendiera por la falla, se requeriría incorporar también un modelo de transporte de sales. En esta tesis se modela únicamente el flujo y transporte de energía por las limitaciones que tiene el software para modelar ambos transportes (ver Anexo 2.8). Para la segunda hipótesis consideramos que el fluido podría ser agua meteórica que ingresa desde las Sierras altas (el lado derecho de la cuenca en la figura 5.2) y nos planteamos la cuestión de si la presión producida por esta recarga sería suficiente para hacer que las salmueras con cobre disuelto pudieran subir por la falla sinsedimentaria de San Marcos hasta llegar a donde está localizado actualmente el yacimiento de cobre (se está modelando únicamente el efecto de la salmuera y no el del calor por las razones indicadas). Esta hipótesis implica que el patrón de flujo generado por la recarga hace que el fluido pase por las evaporitas y las disuelva generando la salmuera. Para probar esta hipótesis utilizamos un modelo de flujo y de transporte de sales.

En el capítulo 3 se detallaron las ecuaciones del modelo matemático para el problema de esta tesis, a continuación describimos los parámetros que utilizamos en SUTRA para responder las preguntas que guiaron este trabajo de investigación tanto para el modelo de transporte de energía como para el de flujo estacionario y transporte transitorio en lo que concierne a las características del medio poroso. Posteriormente, describimos los pormenores de cada uno de estos modelos computacionales y algunas gráficas de sus resultados.

## 5.1. Parámetros generales del medio poroso

Uno de los parámetros que requieren los modelos de transporte, como se vio en el capítulo 3, es la porosidad,  $\epsilon$ , que en este caso corresponde a las areniscas. En la literatura ésta está en rangos que oscilan entre 5 y 30% (Schwartz y Zhang, 2003). Sanders (1998) considera valores para las arenas finas o limosas en rangos de porosidad total del 20 al 50% y eficaz entre 10 y 28%. Debido a la heterogeneidad del medio poroso, elegimos utilizar un valor de 10% de acuerdo con Voss y Provost (2010) que sugieren una porosidad promedio.

<b>Sedimento</b>	<b>Porosidad total</b>	<b>Porosidad eficaz</b>
Arcillas	40 a 60	0 a 5
Limos	35 a 50	3 a 19
Arenas finas, arenas limosas	20 a 50	10 a 28
Arena gruesa o bien clasificada	21 a 50	22 a 35
Grava	25 a 40	13 a 26
Shale intacta	1 a 10	0.5 a 5
Shale fracturada/alterada	30 a 50	
Arenisca	5 a 35	0.5 a 10
Calizas, dolomías no carstificadas	0.1 a 25	0.1 a 10
Calizas dolomías carstificadas	5 a 50	5 a 40
Rocas ígneas y metamórficas sin fracturar	0.01 a 1	0.0005
Rocas ígneas y metamórficas fracturadas	1 a 10	0.00005 a 0.01

Tabla 5. 1. Valores estimados de la porosidad según Sanders (1998).

La permeabilidad, que es una propiedad intrínseca de las rocas y tiene dimensiones de superficie (Phillips, 2009), se requiere para el modelo de flujo. En el modelo de esta tesis utilizamos  $k = 3 \times 10^{-16} m^2$ , como valor medio de la información en la tabla 5.2, tomada de Phillips (2009).

Material	Permeabilidad ( $m^2$ )		
	Muestras de laboratorio	Medidas in situ	Porosidad
Areniscas	$10^{-12} - 10^{-16}$	$10^{-10} - 10^{-14}$	$5 \times 10^{-2}$
Calizas Dolomita	$10^{-14} - 10^{-22}$	$10^{-10} - 10^{-12}$	$(5 - 20) \times 10^{-2}$
Metamórficas/Graníticas	$10^{-16} - 10^{-21}$	$10^{-12} - 10^{-16}$	$10^{-2}$

Tabla 5.2. Órdenes de magnitud de la permeabilidad y porosidad para algunas rocas.

La compresibilidad de la roca,  $\alpha$ , que se utiliza en la ecuación de flujo, la define Ahmed (2001) como “el cambio fraccionario en el volumen del material rocoso sólido por unidad de cambio en la presión”. En este trabajo se consideró homogénea y se supuso uniforme en todo el dominio, igual a  $0.0001 \frac{m \cdot s^2}{kg}$ , lo cual es admisible para las rocas de nuestro caso. Por otro lado, de acuerdo con Voss y Provost (2010), la compresibilidad para el agua pura a 20°C es de  $4.47 \times 10^{-10} \frac{m \cdot s^2}{kg}$ .

## **5.2. Hipótesis 1: El flujo de alto calor produce la circulación convectiva del agua que hace que ésta ascienda a través de la falla de San Marcos**

Para responder qué es lo que hace que el agua se mueva en el yacimiento, García-Alonso et al. (2010) proponen que el flujo de alto calor produce la circulación convectiva del agua, sin embargo, no explican cuál es la fuente de calor. Para probar esta hipótesis requerimos un modelo de flujo acoplado con uno de transporte de energía. En el modelo suponemos que el aumento de la temperatura se debe al gradiente geotérmico.

### **5.2.1. Objetivo**

Usar SUTRA para simular el transporte de calor a través del medio poroso en el que se encuentran salmueras mineralizantes para verificar si con la variación de la temperatura, las direcciones del flujo se ven influenciadas para generar un movimiento convectivo que haga ascender el fluido a lo largo de la falla de San Marcos.

### **5.2.2. Dominio**

Con base en la explicación geológica, hidrogeológica y geoquímica, consideramos que las calizas son impermeables y supondremos la diferencia de conductividades entre la falla y los lechos, así como las permeabilidades correspondientes. Por la evidencia del yacimiento de cobre en el sitio de estudio, suponemos que el flujo está ligado a la falla, lo cual justifica emplear esta hipótesis. Además, por las evidencias de la dirección de este flujo y para simplificar el problema, modelamos una sección transversal, por lo que usamos un modelo en dos dimensiones.

Para incluir la sección transversal del acuífero en el que se produce el movimiento del agua e identificar las fuentes de sales acudimos a González (2008) para echar una mirada de la cuenca sedimentaria completa. Hemos simplificado el esquema de González de su interpretación de la configuración interna restituida, anterior a la Orogenia Larámide, para elaborar uno de acuerdo con las estructuras geológicas que nos atañen. Esta estructura, mostrada en la Figura 5.1, tiene la intención de dar la base de la geometría para el modelo de la hidrodinámica del acuífero estudiado en este texto.

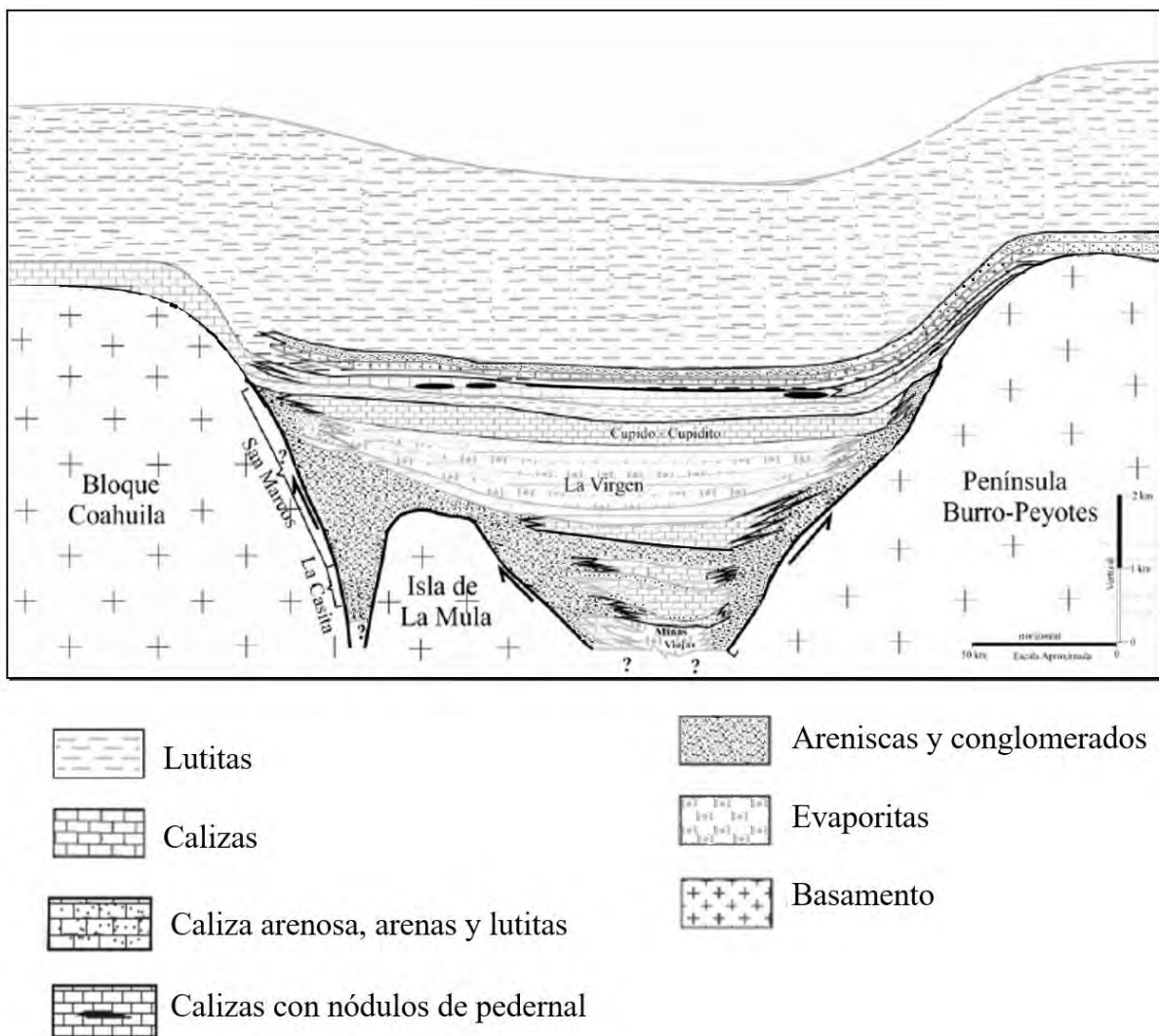


Figura 5.1. Esquema del modelo. Modificado de González (2007).



El dominio se modela, de manera simplificada, mediante un rectángulo de 200 km en el eje  $x$  y 3 km en el eje  $y$ . La malla está formada por 2400 elementos regulares de 250 m de lado.

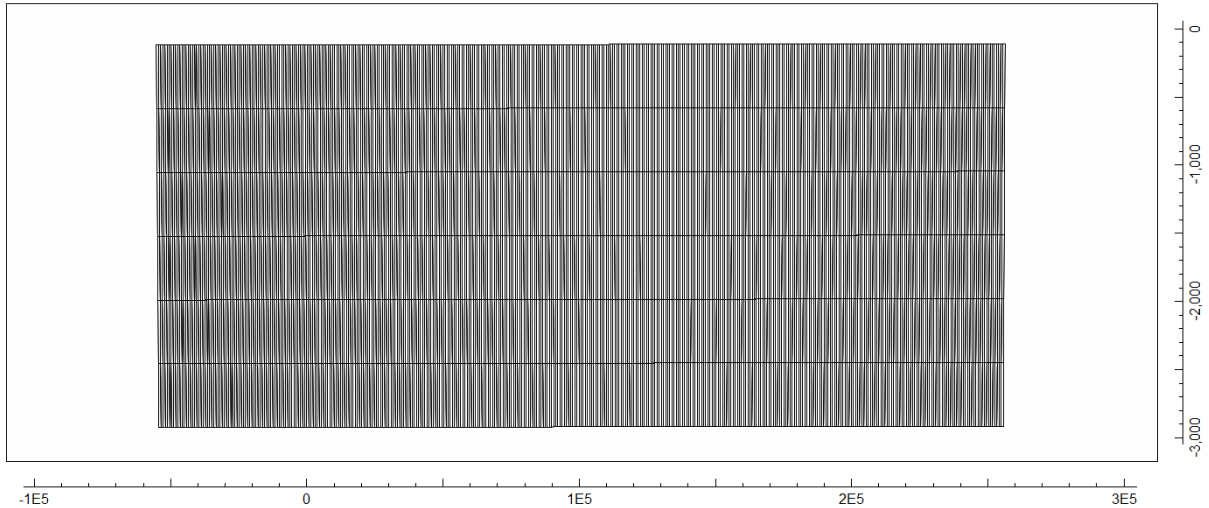


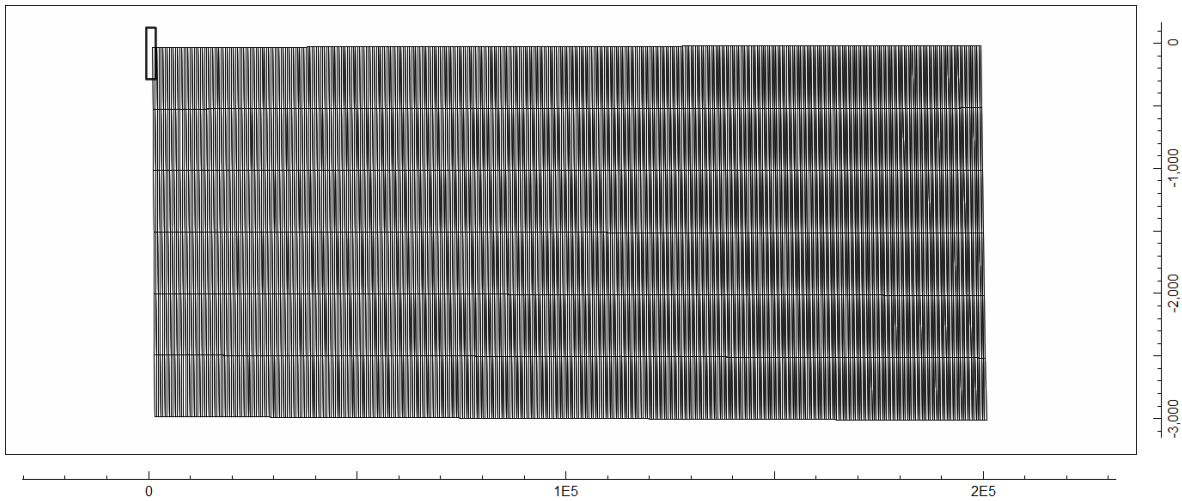
Figura 5.2. Dominio y malla de elementos finitos regulares para la simulación del modelo de flujo y transporte de energía.

### 5.2.3. Descripción del modelo de flujo

El movimiento del agua dentro de la matriz rocosa se describe mediante las características del medio poroso y del fluido. Consideramos que el medio poroso está saturado por el fluido, la matriz sólida permanece en reposo durante el proceso de flujo del fluido, la matriz sólida es elástica, la velocidad del fluido cumple con la ley de Darcy, la masa del fluido se conserva, el fluido se considera homogéneo y el fluido no está sujeto a procesos de difusión ni existen fuentes externas para el ingreso de agua.

Como suponemos un medio isotrópico y el modelo de dispersión estándar de SUTRA supone valores independientes de la dispersividad longitudinal  $\alpha_L$  y transversal  $\alpha_T$ , para asignar los valores en el modelo nos basamos en la información en Koziy (2007): las dispersividades *in situ* tienen varios órdenes de magnitud comparadas con las dispersividades medidas en el

laboratorio, además la variabilidad de los valores de dispersión oscilan de 20 a 40000 m y se acostumbra usar una dispersividad transversal de un tercio de la longitudinal cuando las dispersividades transversales son de hasta dos órdenes de magnitud menores. Koziy utilizó el menor valor de la gama de valores para la dispersividad longitudinal y eligió la dispersividad transversal mediante  $\alpha_T = 0.01\alpha_L$ , por tanto, los valores que usamos son  $\alpha_L = 200$  m y  $\alpha_T = 2$  m.



5.3. Asignación de condiciones de frontera para modelo de flujo.

#### 5.2.4. Descripción del transporte de energía

Para el transporte de energía se considera una conductividad térmica del fluido  $\lambda_w = 0.6 \frac{m^2}{s}$ , capacidad calorífica específica del fluido  $c_w = 4182 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$  y capacidad calorífica específica del grano sólido  $c_s = 840 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$ .

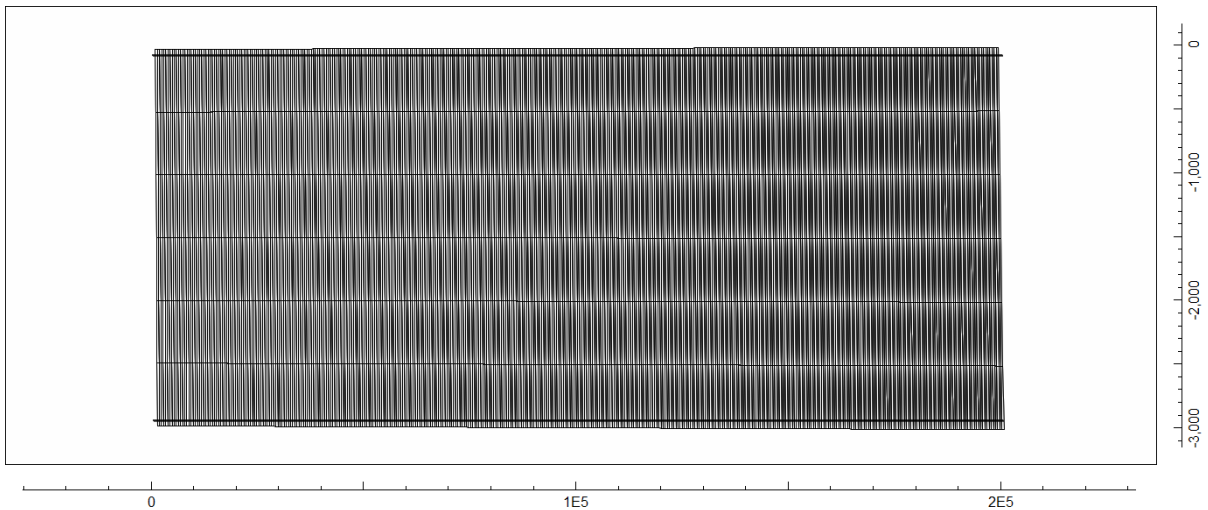
La densidad en los modelos de SUTRA se obtiene mediante

$$\rho(T_o) = \rho_o + \frac{\partial \rho}{\partial T}(T - T_o) \quad (87)$$

Donde usamos la densidad inicial  $\rho_o = 1250 \frac{kg}{m^3}$  y la temperatura inicial del fluido  $T_o = 60^\circ C$  (García-Alonso, 2010) y por consiguiente, tenemos que el cambio de la densidad con respecto a la temperatura  $\frac{\partial \rho}{\partial T} = -0.75 \frac{kg}{m^3 \cdot ^\circ C}$ .

### 5.2.5. Condiciones de frontera

No existe flujo en los lados izquierdo y derecho del rectángulo del modelo. No hay fuentes de energía. En el borde superior asignamos una temperatura de  $60^\circ C$  y en la inferior  $140^\circ C$ , de acuerdo con los valores utilizados en el modelo hidrogeoquímico de García-Alonso et al. (2011). El resto del dominio suponemos una temperatura de  $0^\circ C$  inicialmente. Las fronteras de los lados no permiten el flujo de calor.



5.4. Asignación de condiciones de frontera para transporte de energía.

### 5.2.6. Resultados

Para el modelo de flujo, las distribuciones de presión se presentan de acuerdo con la siguiente gráfica.

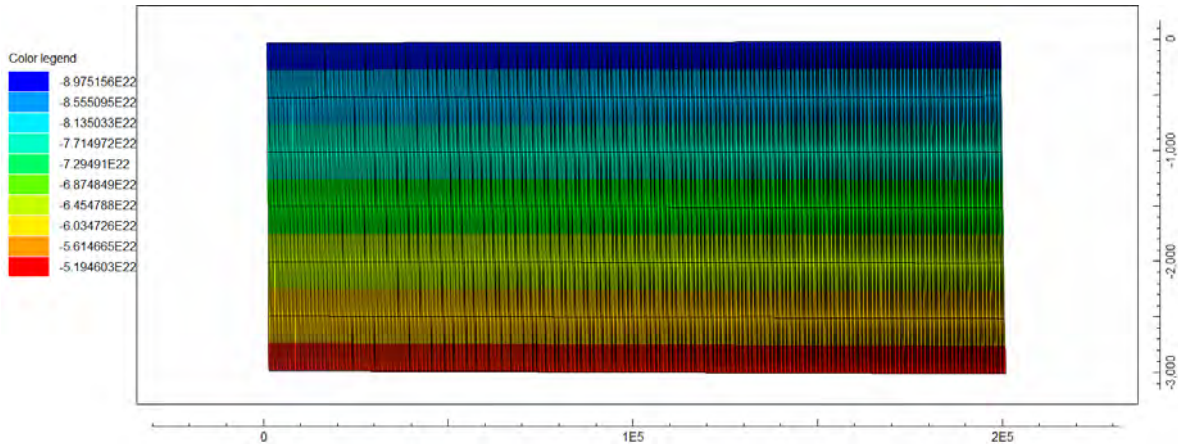


Figura 5.5. Distribución de la presión en la simulación.

Para esta hipótesis el modelo reproduce la distribución del gradiente geotérmico en todo el dominio.

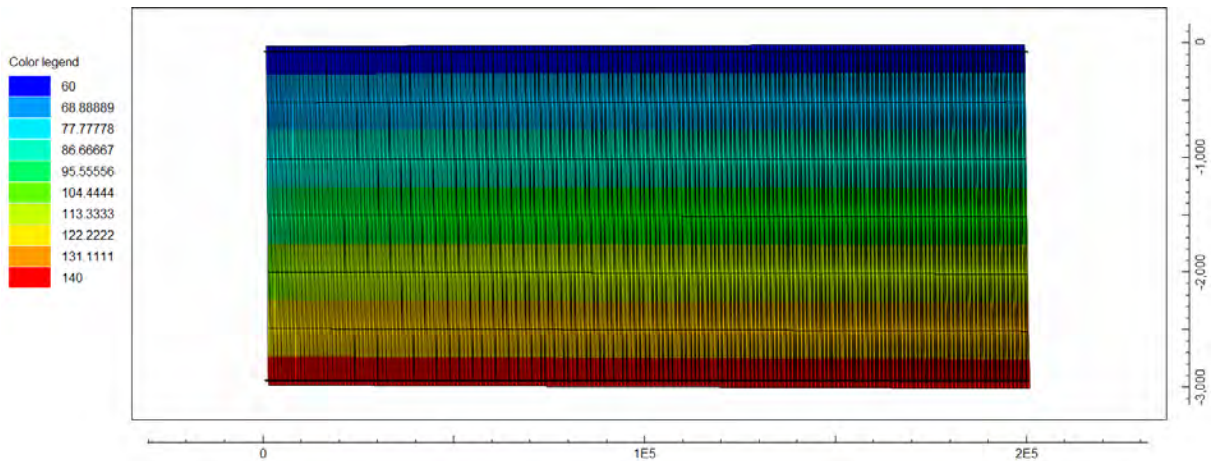


Figura 5.6. Flujo de calor en la simulación.

Sin embargo, las direcciones del flujo no indican que haya un flujo ascendente a través de la falla, lo cual no coincide con el modelo conceptual de García-Alonso et al. (2010).

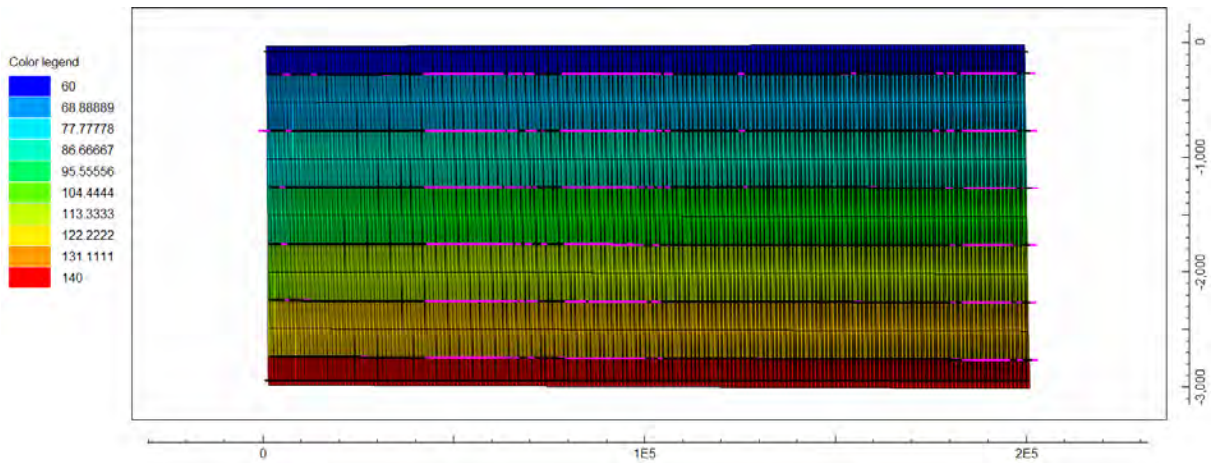


Figura 5.7. Gráfica de temperatura con los vectores de las velocidades del flujo.

La influencia de la temperatura resulta despreciable de acuerdo con este modelo de transporte de energía pues el gradiente geotérmico no juega un papel importante en el movimiento del fluido.

### **5.3. Hipótesis 2: La presión debida a infiltración del agua meteórica produce la circulación ascendente del agua a través de la falla de San Marcos**

Ya que la temperatura del agua no parece generar flujo convectivo que ascienda por la falla, formulamos una segunda hipótesis, esta es, que la presión es la responsable de este flujo ascendente a pesar de la alta salinidad del agua. Para esto generamos un modelo de flujo estacionario y transporte de solutos que describimos a continuación en esta tesis.

#### **5.3.1. Objetivo**

Usar SUTRA para simular el flujo de las salmueras mineralizantes en el acuífero con flujo estacionario y transporte transitorio de solutos y verificar si se cumple la hipótesis de fluido ascendente hasta alcanzar la concentración de 0.30 de sales en la transición de lechos rojos a caliza de acuerdo con García-Alonso et al. 2010.

#### **5.3.2. Dominio**

El dominio se modela mediante un rectángulo de 200 km en el eje  $x$  y 3 km en el eje  $y$ . La malla está formada por 2400 elementos regulares de 250 m de lado. Corresponde con el utilizado en el modelo de transporte de energía.

#### **5.3.3. Descripción del flujo**

Igual que en el caso anterior excepto por las condiciones de frontera. No consideramos pasos de tiempo pues usamos un modo estacionario para el flujo.

### 5.3.4. Descripción del transporte de solutos

La concentración inicial de sales en el modelo es nula y se somete a la carga hidráulica de la columna de agua que se supone como recarga meteórica. En el acuífero se modelan las evaporitas de Minas Viejas y La Virgen como rectángulos con una concentración constante de 0.30. En este caso, se desprecia la influencia de la temperatura en el flujo.

El medio poroso se encuentra saturado por el fluido y al disolverse las evaporitas, cargan de solutos al fluido que se transporta en éste con su misma velocidad. Suponemos que en el transporte de solutos no tenemos fenómenos de adsorción y la difusividad molecular del soluto en el fluido puro es  $\sigma_w = 1 \times 10^{-9} \frac{m^2}{s}$  (Voss y Provost, 2010) incluyendo los efectos de la tortuosidad.

De acuerdo con la documentación de SUTRA, la densidad inicial a partir de una aproximación lineal es de  $\rho_o = 980 \frac{kg}{m^3}$ . Para asignar el cambio de la densidad con respecto a la concentración en las propiedades del fluido empleamos la expresión

$$\rho(C) = \rho_o + \frac{\partial \rho}{\partial C}(C - C_o) \quad (85)$$

Con concentración inicial  $C_o = 0$ , tenemos el cambio de la densidad con respecto a la concentración de  $733 \frac{kg^2}{kg \cdot m^3}$ .

La viscosidad  $\mu$  es una función de la presión y de la concentración y depende en primera instancia de la temperatura del fluido (Voss y Provost, 2010):

$$\mu(T) = (239.4 \times 10^{-7}) 10^{\left(\frac{248.37}{T+133.15}\right)} \quad (86)$$

Considerando que la temperatura promedio en el intervalo de 60 a 140°C es de 100°C:

$$\begin{aligned}\mu(100^{\circ}C) &= (239.4 \times 10^{-7})10^{\left(\frac{248.37}{100+133.15}\right)} \\ &= (239.4 \times 10^{-7})10^{(1.0653210)} \\ &= 2.7823 \times 10^{-4} [Pa \cdot s]\end{aligned}$$

### 5.3.5. Condiciones de frontera

En el modelo, un rectángulo representa los estratos del modelo en un corte transversal. El lado izquierdo y el derecho del rectángulo son impermeables. En la falla de San Marcos, la única presión especificada es la presión hidrostática en la celda superior izquierda, calculada mediante:

$$h = 35311.87 \text{ m}$$

$$\rho_{agua} = 1000 \frac{kg}{m^3}$$

$$g = 9.81 \frac{m}{s^2} = 9.94 \times 10^{14} \frac{m}{año^2}$$

$$P_{falla} = \rho_{agua}gh = \left(1000 \frac{kg}{m^3}\right) \left(9.94 \times 10^{14} \frac{m}{año^2}\right) (35311.87 \text{ m}) = 3.51 \times 10^{22} \text{ Pa}$$

En el extremo derecho tenemos una carga hidráulica inicial de 412.47 m equivalente al espesor del rectángulo que representa las formaciones; la presión asignada en la celda superior del lado derecho es:

$$h = 412.47 \text{ m}$$

$$\rho_{agua} = 1000 \frac{kg}{m^3}$$



$$g = 9.81 \frac{m}{s^2} = 9.94 \times 10^{14} \frac{m}{año^2}$$

$$P_{falla} = \rho_{agua}gh = \left(1000 \frac{kg}{m^3}\right) \left(9.94 \times 10^{14} \frac{m}{año^2}\right) (412.47 m) = 4.1 \times 10^{20} Pa$$

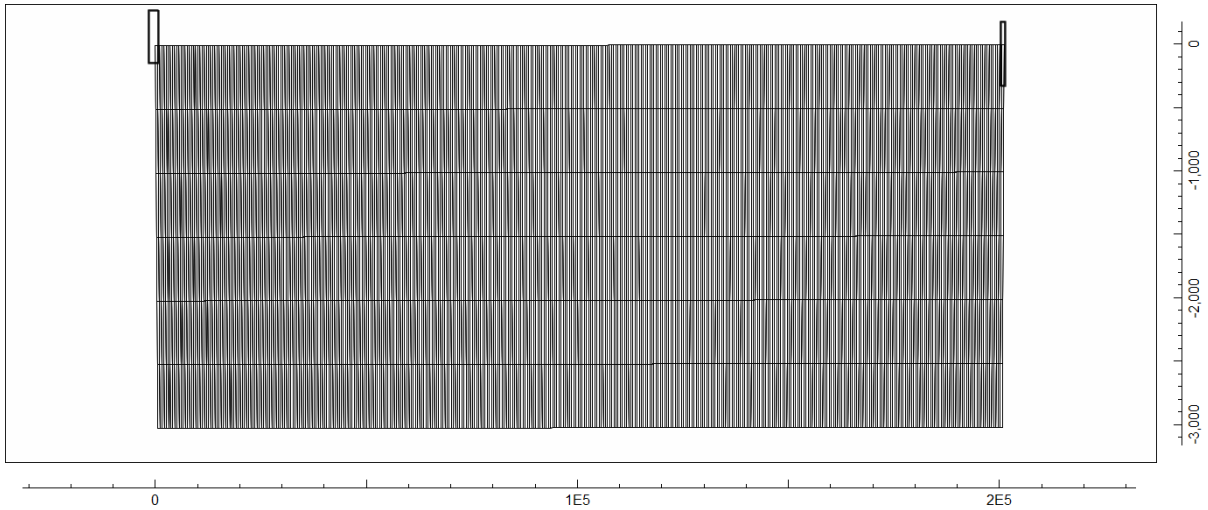


Figura 5.8. Asignación de condiciones de frontera en el modelo de flujo.

La presión se establece en función del flujo de entrada de agua meteórica debido a la carga de la columna en el extremo derecho de la cuenca. Todos los lados del rectángulo se consideran impermeables, es decir, sin entradas ni salidas de flujo.

El software asigna la diferencia de presiones de tal manera que se concentra en la parte inferior derecha debido a la recarga que se asignó en la celda superior y se observan menores en el lado superior izquierdo, del lado donde estamos suponiendo la falla de San Marcos. Lo anterior se muestra en la siguiente imagen.

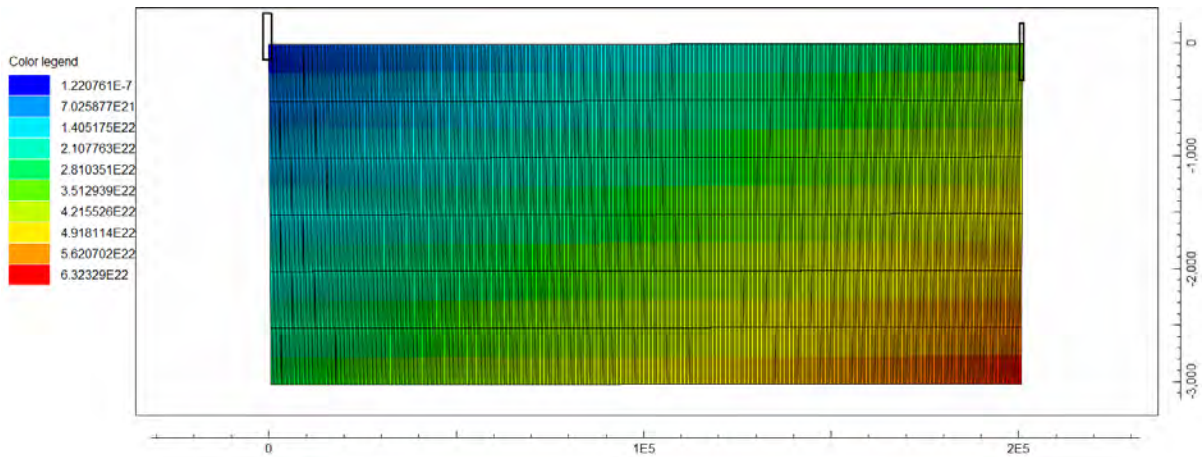


Figura 5.9. Distribución de la presión en el modelo.

La concentración de sales es cero en todas partes excepto en La Virgen y Minas Viejas representadas por los rectángulos en el centro de la cuenca.

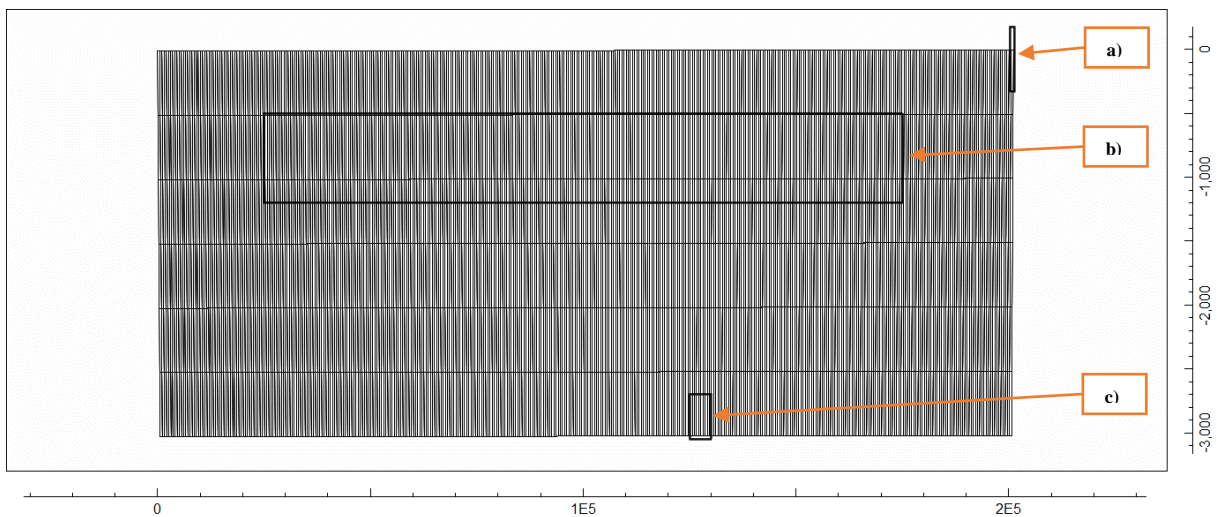


Figura 5.10. a) Asignación de carga hidráulica por recarga meteórica. b) Representación de evaporitas en La Virgen con concentración constante de 0.3. c) Representación de evaporitas en Minas viejas con concentración constante de 0.3.

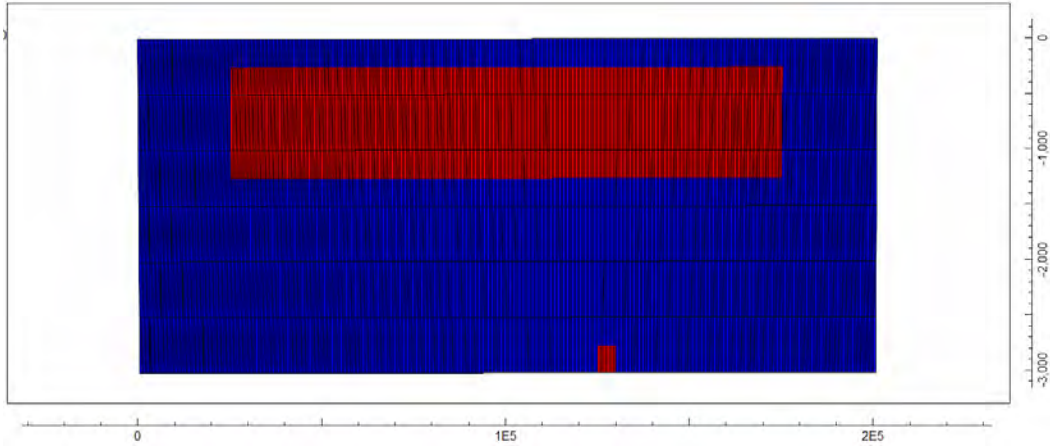


Figura 5.11. Condiciones iniciales de las concentraciones. El color rojo indica la concentración de 0.3 en las evaporitas.

### 5.3.6. Resultados

El modelo de flujo en el resultado final nos proporciona la distribución de la presión y los vectores de velocidad en la simulación.

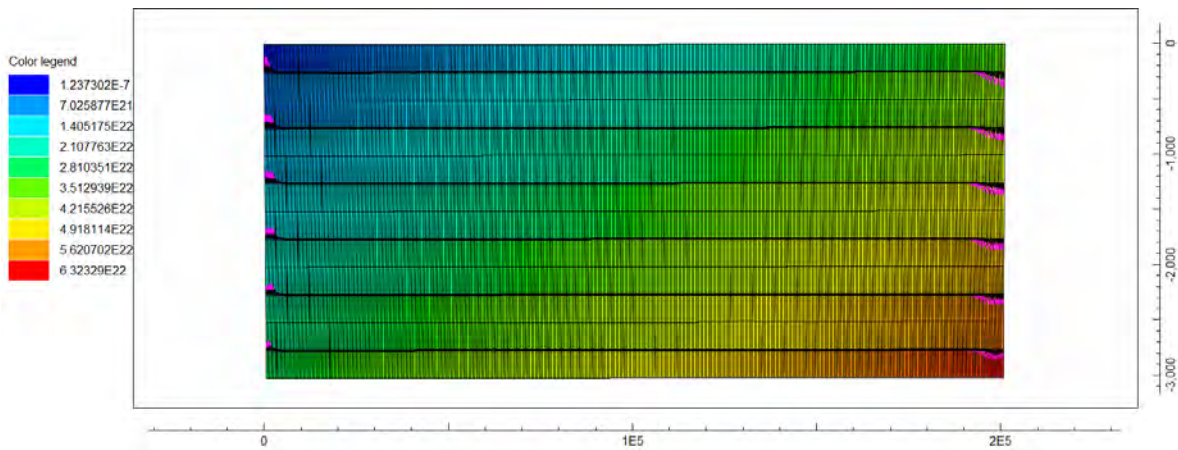


Figura 5.12. Distribución de la presión final en el modelo.

El modelo de transporte de sales para la hipótesis 2 arroja la siguiente gráfica que indica un flujo que llega a la falla con concentraciones del 30% en peso.

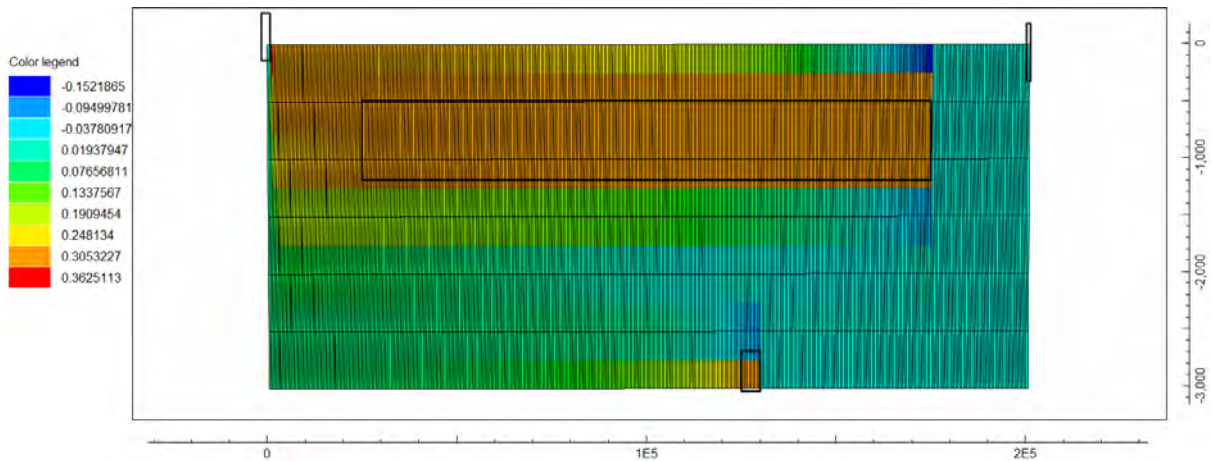


Figura 5.13. Concentración de sales en simulación de flujo en estado estacionario.

Además, las direcciones de flujo indican que hay un flujo ascendente a través de la falla, lo cual coincide con el modelo conceptual de García-Alonso et al. (2010).

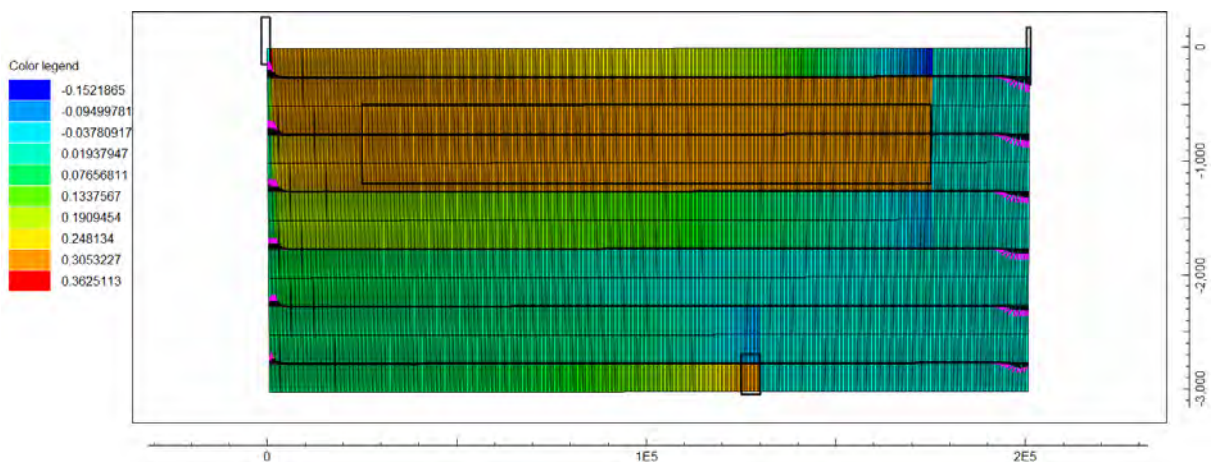


Figura 5.14. Gráfica de concentración de sales en donde se muestran los vectores de velocidades de flujo.

El flujo del agua subterránea se mueve, de acuerdo con nuestros resultados, por la recarga del agua meteórica. Este modelo de transporte de sales muestra que el fluido enriquecido en sales subió a través de la falla de San Marcos a pesar de su alta densidad debida a la salinidad por la presión inducida debido a la recarga meteórica.

En su artículo, Brown (2009) comenta que el éxito aparente de su estimación para explicar el contenido de cobre de los depósitos de cobre estratificado real sedimentado no puede tomarse como prueba de que el modelo de recarga meteórica es el único medio satisfactorio a escala de cuenca para formar este tipo de mineralización. Los argumentos a favor de esa afirmación se derivan en gran medida de la incapacidad de los modelos alternativos para explicar los orígenes de las salmueras capaces de transportar cantidades significativas de cobre.

#### **5.4. Cuantificación de la cantidad de cobre en el yacimiento de la falla de San Marcos**

Una de las hipótesis que se consideran en este trabajo es que el flujo ascendente por la falla de San Marcos se debió a la recarga debida al agua meteórica en las zonas altas de la cuenca. Ésta coincide con el modelo conceptual presentado por Brown (2009, figura 3).

Además, Brown presenta un análisis que aprovechamos aquí para hacer una aproximación de la cuantificación del cobre en el yacimiento de San Marcos.

Él asegura que aproximadamente 1.1 Mt de cobre podría ser transportado a través de los sedimentos y depositado en la transición a caliza en un millón de años de diagénesis. La mayoría de las estimaciones del tonelaje total de metal de cobre lixiviado de los lechos rojos en depósitos estratiformes de cobre se basan en las cantidades de cobre a niveles de partes por millón que podrían derivarse del volumen de lechos rojos subyacentes al cobre estratiforme alojado en los depósitos sedimentarios (Brown, 2009).

Si estimamos que el volumen del yacimiento de cobre es de 2 millones de metros cúbicos, dado por 2 m de ancho por 2000 m de largo por 500 m de espesor, y consideramos una densidad de las areniscas de  $2.4 \text{ ton/m}^3$  (Jones, 2007), entonces la masa de areniscas en ese volumen es

$$M = (2 \text{ m})(2000 \text{ m})(500 \text{ m})\left(2.4 \frac{\text{ton}}{\text{m}^3}\right) = 4\,800\,000 \text{ ton}$$

y como  $1 \text{ ton} = 10^9 \text{ mg}$ , la masa en el volumen considerado es de  $4.8 \times 10^{15} \text{ mg}$ .

Por otro lado, calculamos el promedio del contenido de cobre en muestras de rocas mineralizadas igual a 66380 ppm (ver Tabla 5.3).

Número de muestra	Concentración de cobre (ppm)
1	91400
2	96600
3	53100
4	61700
5	66200
6	73000
7	77200
8	42400
9	49300
10	52900
Promedio	66380

Tabla 5.3. Masa de cobre (ppm) en muestras de arenisca mineralizadas seleccionadas de los depósitos de cobre alojados en los sedimentos de San Marcos. Información tomada de (García-Alonso et al., 2011)

Con este promedio tenemos que por cada kilogramo de material rocoso en el yacimiento de cobre hay 66 380 ppm de cobre y procedemos a calcular la cantidad de cobre en el volumen que estamos considerando de este yacimiento:

$$\begin{aligned}
\text{Masa de cobre} &= \frac{\text{Masa del volumen considerado} \times 66\,380\,99 \text{ ppm de Cu}}{1\,000\,000 \text{ mg}} \\
&= \frac{(4.8 \times 10^{15} \text{ mg})(66\,380 \text{ ppm de Cu})}{1\,000\,000 \text{ mg}} \\
&= 3.19 \times 10^{14} \text{ ppm de Cu} = 319\,000 \text{ ton}
\end{aligned}$$

Por lo que concluimos que la cantidad de la masa del cobre en el volumen de yacimiento de  $2\,000\,000 \text{ m}^3$  es aproximadamente de 319 000 toneladas.

El proceso de la liberación de cobre resulta de la alteración diagenética progresiva de la pared de los acuíferos por el agua meteórica rica en oxígeno, impulsada por la recarga en tierras altas adyacentes a las cuencas que albergan estos depósitos. Debido a esto, la cantidad total de cobre liberado depende del volumen de la recarga de agua meteórica, de su contenido de oxígeno y de la duración de la lixiviación diagenética del cobre (Brown, 2009).

En todo caso, el oxígeno está relacionado con la oxidación de las areniscas y con el enrojecimiento de los lechos rojos y como nosotros ya tenemos identificados los lechos grises y rojizos podemos tener una estimación del volumen de esta zona.

Ahora calcularemos la masa de areniscas que sería necesaria para obtener la cantidad de cobre que hemos estimado en el yacimiento. Si consideramos la concentración de cobre en muestras no mineralizadas, tenemos un valor promedio de 734.3 ppm a partir de García-Alonso et al. (2011) (Ver tabla 5.4). Con esto podemos hacer el cálculo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\text{Masa de las areniscas} &= \frac{(\text{Masa de cobre})(1\,000\,000 \text{ mg})}{734.3 \text{ mg de Cu}} \\
&= \frac{(3.19 \times 10^{14} \text{ mg de Cu})(1\,000\,000 \text{ mg})}{734.3 \text{ mg de Cu}} \\
&= 4.34 \times 10^{17} \text{ mg} = 434\,000\,000 \text{ ton}
\end{aligned}$$

Número de muestra	Concentración de cobre (ppm)
1	161
2	1760
3	495
4	51
5	699
6	1532
7	225
8	2400
9	10
10	10
Promedio	734.3

Tabla 5.4. Cálculo de la concentración de la masa de cobre en cada muestra no mineralizada. Información recopilada de (García-Alonso et al., 2011)

Y de ahí, considerando la densidad de las areniscas, podemos obtener el volumen mínimo a partir de lo siguiente:

$$\begin{aligned} \text{Volumen mínimo} &= \frac{\text{Masa de las areniscas}}{\text{Densidad de las areniscas}} \\ &= \frac{434\,000\,000 \text{ ton}}{2.4 \frac{\text{ton}}{\text{m}^3}} = 180\,833\,333.3 \text{ m}^3 \end{aligned}$$



Fácilmente podemos observar que este volumen está contenido en la cuenca; haciendo un cálculo grosso modo, si suponemos que el volumen ocupado por las areniscas es de un 50% del total de la cuenca, en un espesor de 2 km tenemos que el volumen es de:

$$\frac{150km(2km)(2km)}{2} = 300 km^3 = 300\,000\,000\,000 m^3$$

Este volumen evidentemente es mayor que el volumen mínimo de areniscas que obtuvimos. Por otro lado, este volumen se puede observar que está contenido en la cuenca Sabinas, donde se localiza el caso de estudio. Dicha cuenca tiene una extensión superficial aproximada de 400 km<sup>2</sup> (García-Alonso, 2010) y si la profundidad fuera de tan sólo un metro, ésta sería suficiente para albergar las areniscas que generaron el yacimiento.

Unido a esto, García-Alonso (2011) obtuvo en el diagrama de estabilidad la actividad del cobre, de donde se puede obtener que la concentración de cobre en la solución mineralizante de aproximadamente 0.1007 g/L mediante el siguiente cálculo:

$$\begin{aligned} \text{Concentración de cobre } \left(\frac{g}{L}\right) &= (\log^{-1}(-2.8))(\text{peso molecular Cu}) \\ &= 0.0015848(63.5466) = 0.1007 \frac{g}{L} \end{aligned}$$

De ello podemos deducir que para obtener 319 000 ton de cobre serían necesarios aproximadamente  $3.17 \times 10^{12}$  L de fluido mineralizante para precipitar todo el cobre de nuestro cálculo a partir de lo siguiente:

$$\text{Volumen de fluido mineralizante} = \frac{3.19 \times 10^{11} g}{0.1007 \frac{g}{L}} = 3.17 \times 10^{12} L$$

A más de esto, Brown (2009) calcula que en un área de 10 × 10 km durante 1 millón de años (Ma) a una tasa de infiltración de 10 cm/año tiene 10<sup>16</sup> L/Ma (bajo la hipótesis de una precipitación de 20 cm/año asociada con un clima cálido y árido prevaeciente favorable para

la formación de evaporitas de cuenca). Si aplicamos este cálculo para el área de la falla de San Marcos de  $2000 \text{ m}^2$ , podemos calcular el flujo de la siguiente manera:

$$\text{Flujo} = 2000 \text{ m}^2 \times 0.1 \text{ m} \times 1000 \frac{\text{L}}{\text{m}^3} \times 1 \text{ a} = 2 \times 10^5 \frac{\text{L}}{\text{a}}$$

A partir de este flujo y considerando el volumen del fluido mineralizante que calculamos antes, podemos obtener el tiempo:

$$\begin{aligned} \text{Tiempo} &= \frac{\text{Volumen de fluido mineralizante}}{\text{Flujo}} = \frac{3.17 \times 10^{12} \text{ L}}{2 \times 10^5 \frac{\text{L}}{\text{a}}} = 1.59 \times 10^7 \text{ a} \\ &= 15.9 \text{ Ma} \end{aligned}$$

Bajo estas condiciones de precipitación, tardaría 15.9 millones de años en lixiviarse la masa de cobre calculada en el yacimiento bajo la hipótesis de la recarga meteórica. Este resultado es razonable considerando la literatura relacionada con la formación de esta cuenca (Eguiluz, 2011).

## 6. Conclusiones y trabajo futuro

En esta tesis se analizaron posibles causas de que una salmuera densa ascienda por la falla de San Marcos, que es un elemento muy importante del modelo conceptual propuesto por García-Alonso et al. (2010) para explicar la génesis del yacimiento de cobre de San Marcos, localizado en Cuatrociénegas, Coahuila. Se probaron, mediante modelación matemática, dos hipótesis. La primera, propuesta por García-Alonso et al. (2010), afirma que el flujo ascendente se debe a la convección producida por la variación de temperatura en la cuenca. La segunda, producto de esta tesis, propone que el flujo ascendente se debe a la presión producida por la recarga meteórica que resulta suficiente para contrarrestar el peso debido a la densidad de la salmuera y a cualquier otro efecto producto de la densidad que pudiera contrarrestar el flujo ascendente. Cabe mencionar que Brown (2009) ha utilizado la hipótesis de la recarga meteórica para explicar la formación de este tipo de mineralización en un yacimiento también ligado a una falla.

Para la primera hipótesis, el modelo reproduce una distribución de temperatura para todo el dominio consistente con el gradiente geotérmico, pero las direcciones de flujo no indican que haya un flujo ascendente a través de la falla, a diferencia de lo que se indicó en el modelo conceptual de García -Alonso et al. (2010). Por lo tanto, la influencia de la temperatura en el patrón de flujo es insignificante de acuerdo con el modelo de transporte de energía, es decir, el gradiente geotérmico por sí mismo no produce un flujo ascendente a través de la falla.

La simulación para la segunda hipótesis arroja un flujo que asciende por la falla con concentraciones de sales del 30%, lo que es indicador de que el flujo pasó por las fuentes de sales y ascendió con el cobre disuelto hasta donde se llevó a cabo la precipitación del mismo.

De acuerdo con nuestros resultados, la recarga de agua meteórica podría ser responsable del movimiento del agua en la cuenca.

Es importante mencionar que para evaluar los efectos combinados de la concentración salina y la distribución espacial de la temperatura en el patrón de flujo del agua subterránea, es necesario modelar conjuntamente el flujo, transporte de sales y transporte de energía, junto con una ecuación de estado para la densidad como función de la concentración de sales y la temperatura. También podría considerarse en trabajo a futuro incluir la influencia de la parte química para obtener un modelo que pueda probar una hipótesis con mayor complejidad y aproximarse a las implicaciones reales del sistema.

## 7. Bibliografía

Adams J. J. y Bachu S. (2002). Equations of state for basin geofluids: algorithm review and intercomparison for brines. *Geofluids*. Alberta Geological Survey, Edmonton, Canada. 257-271.

Anderson Mary P. Woessner William W. (1992). *Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport*, Academic Press, pp. 2-9

Batzle M. y Wang Z. (1992) Seismic properties of pore fluids. *Geophysics*, 57, 1396-1408.

Brown, A. (2009). A process-based approach to estimating the copper derived from red beds in the sediment-hosted stratiform copper deposit model. *Economic Geology*, 857–868.

Collings, M. D., Sherman, D. M., y Ragnarsdottir, K. V. (2000). Complexions of Cu<sub>2</sub> in oxidized NaCl brines 25°C to 175°C: Results from in-situ EXAFS spectroscopy [J]. *Chemical Geology*, 65–73.

Eguiluz de Antuñano, Samuel. (2011). Secuencias estratigráficas del Berriasiano–Aptiano en la Cuenca de Sabinas: su significado en el entendimiento de la evolución geológica del noreste mexicano. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*. Vol. 63, Núm. 2, 2011, P. 285-311. Disponible en <http://dx.doi.org/10.18268/BSGM2011v63n2a10>

García-Alonso, D. (2010). Tesis: Paragénesis y geoquímica de los depósitos de Cu de la Formación San Marcos (Cretácico inferior), Coahuila. Linares, Nuevo León: Instituto de Geofísica, UNAM.

García-Alonso, D., Canet, C., González-Partida, E., Villanueva-Estrada, R. E., María Prol-Ledesma, R., Alfonso, P., Lozano-Santa Cruz, R. (2011). The Cretaceous sediment-hosted

copper deposits of San Marcos (Coahuila, Northeastern Mexico): An approach to ore-forming processes. *Journal of South American Earth Sciences*, 432-443.

Gómez Font, A. (2006). Alimentario, alimenticio y otras palabras. *Mosaico 17*. Revista para la Promoción y Apoyo a la Enseñanza del Español, Fundación del Español urgente.

González Sánchez, Francisco. (2008) Tesis: Caracterización y diagénesis de los yacimientos minerales estratoligados de celestina, barita, fluorita y plomo-zinc del noreste de México. México, D.F.: Posgrado en Ciencias de la Tierra, Campus Juriquilla, UNAM.

Goodman, A. S., y Reilly, T. E. (1985). Quantitative analysis of saltwater-freshwater relationships in groundwater systems - a historical perspective. *Journal of Hydrology*, Vol. 80, 125-160.

Herrera, I., y Pinder, G. F. (2012). *Mathematical Modeling Science and Engineering: An axiomatic Approach*. Wiley.

Holzbecher, E. (1998). *Modeling Density-Driven Flow in Porous Media*. Berlin: Springer-Verlag.

Jones, F. (2007). *Geophysics foundations: Physical properties: Density*. University of British Columbia, Earth and Ocean Sciences. Disponible en [www.eoas.ubc.ca/ubcgif/iag/foundations/properties/density.htm](http://www.eoas.ubc.ca/ubcgif/iag/foundations/properties/density.htm)

Koziy Lyudmyla, S. B. (2009). Salt as a fluid driver, and basement a metal source, for stratiform sediment-hosted copper deposits. *Geological Society of America*, 1107-1110.

Koziy Lyudmyla, S. B. (2007). *Numerical Simulation of the Ore Forming Fluid Migration in the Sediment-hosted Stratiform Copper Deposit, Zambian Copperbelt*. Tesis para recibir el grado de doctor en Filosofía en la Universidad de Tasmania. Hobart, Australia, UTAS.

Langevin Christian D., Daniel T. Thorne, Jr., Alyssa M. Dausman, Michael C. Sukop y Weixing Guo. (2008). SEAWAT Version 4: A Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport, Techniques and methods book 6, Chapter A22, U.S. Department of the interior, U. S. Geological Survey, Reston, Virginia.

Langevin, C.D., Shoemaker, W.B., and Guo, Weixing, 2003, MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model—Documentation of the SEAWAT-2000 Version with the Variable-Density Flow Process (VDF) and the Integrated MT3DMS Transport Process (IMT): U.S. Geological Survey Open-File Report 03-426, 43 p.

Ohmoto H., 1986, Stable isotope geochemistry of ore deposits: J.W.Valley, H. P. Taylor, Jr. and J.R O'Neil. Eds. Reviews in Mineralogy. 16. 491-560.

Osif, T.L. 1988. The Effects of Salt, Gas, Temperature, and Pressure on the Compressibility of Water. SPE Res Eng 3 (1): 175-181. SPE-13174-PA.

Phillips S.L., Igbene A., Fair J.A., Ozbek H., Tavana M. (1981). A Technical Databook for Geothermal Energy Utilization. Lawrence Berkeley Laboratory Report, 12810.

Phillips O. M. (2009). Geological fluid dynamics. Sub-surface Flow and Reactions. Cambridge University Press. p. 23.

Sanders, Laura. (1998). A manual of field hydrogeology. Prentice-Hall, 381 pp.

Schwartz, F.W. y H. Zhang. 2003. Fundamentals of Ground Water. John Wiley and Sons, Inc. New York, 583 p.

Shao Haibing, Yonghui Huang and Olaf Kolditz. (2015) Modelling Coupled Component Based Multiphase and Reactive Transport Processes in Deep Geothermal Reservoirs using

OpenGeoSys. Proceedings World Geothermal Congress 2015. Melbourne, Australia, 19-25 April 2015

Tarback, E. J. y Lutgens, F. K., (2005), Ciencias de la Tierra, 8ª edición, Madrid, Pearson Educación, S. A.

Voss C.I. y A.M. Provost (2010). SUTRA, A Model for Saturated-Unsaturated, Variable-Density Ground-Water Flow with Solute or Energy Transport, Water-Resources Investigations Report 02-4231, U.S. Geological Survey, Reston.

Young Hugh D., Freedman Roger A.; contributing author, A. Lewis Ford. (2012). Sears and Zemansky's university physics: with modern physics, Ed. 13, Sección 11-6 p. 365.



## **I. Anexo: Formulación axiomática**

El modelo de un sistema continuo estará constituido por una colección de propiedades extensivas e intensivas que permiten representarlo. A su vez, las propiedades quedan representadas por un conjunto de ecuaciones de balance, las cuales pueden ser diferenciales y de salto, donde la velocidad en cada una de ellas corresponde a la fase de la cual se trate. Además, se debe contar con relaciones suficientes que permitan ligar todas las ecuaciones de balance y dónde todos sus parámetros queden definidos en términos de éstas. A estas relaciones se les conoce también como leyes constitutivas. Por último se debe contar con condiciones iniciales y de frontera que satisfagan las propiedades para que la solución del problema sea única.

La mecánica de los medios continuos, en cierto sentido, clásica puesto que fue la primera que se desarrolló. Ésta incluye los modelos del movimiento de los sólidos y los fluidos. La familia de propiedades extensivas en que se basa su modelo general del movimiento está constituida por las siguientes: masa, momento lineal, momento angular y energía. Si se toma en cuenta que tanto el momento lineal como el momento angular son vectores, y que cada propiedad cuya expresión es vectorial es equivalente a tres propiedades escalares, se ve que esta familia en realidad está constituida de ocho propiedades extensivas escalares. Así, asociada a ella hay una familia que consta de ocho propiedades intensivas escalares.

A continuación se presenta una tabla con un resumen de las ecuaciones básicas de la mecánica de sólidos y fluidos, la cual se obtiene a partir del método descrito en el libro (Herrera y Pinder, 2012).

No	Propiedad Extensiva	Propiedad Intensiva $\psi$	$\tau$	$g$	Ecuación de Balance
1	Masa $M(t)$	$\rho$	0	0	$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0$
2	Momento Lineal $\mathcal{M}(t)$	$\rho \underline{v}$	$\underline{\underline{\sigma}}$	$\rho \underline{b}$	$\rho \frac{D\underline{v}}{Dt} - \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \rho \underline{b} = 0$
3	Momento Angular $\mathcal{M}_a(t)$	$\rho(\underline{x} \times \underline{v})$	$\underline{x} \times \underline{\underline{\sigma}}$	$\rho(\underline{x} \times \underline{b})$	$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^T$
4	Energía $\mathcal{E}(t)$	$\rho \left( E + \frac{1}{2}  \underline{v} ^2 \right)$	$\underline{q} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{v}$	$\rho(h + \underline{b} \cdot \underline{v})$	$\rho \frac{DE}{Dt} = \nabla \cdot \underline{q} + \rho h + \underline{\underline{\sigma}} : \nabla$

Tabla I.1.. Ecuaciones básicas de la mecánica de sólidos y fluidos. Tomada de Herrera y Pinder (2012). Donde  $\rho$  representa a densidad,  $\underline{v}$  la velocidad del medio,  $\underline{b}$  la fuerza de cuerpo por unidad de masa,  $\underline{\underline{\sigma}}$  el tensor de esfuerzos,  $E$  la energía interna por unidad de masa,  $h$  las fuentes de calor por unidad de masa y  $\underline{q}$  el vector de flujo de calor.

## A. Modelo matemático sin considerar densidad variable para fluidos en medios porosos

La formulación del modelo matemático de ecuaciones considerando la densidad variable en el fluido mineralizante que se utiliza a continuación está basada en Mathematical Modeling in Science and Engineering: An Axiomatic Approach (Herrera & Pinder, 2012) en el que se presentan las ecuaciones de balance general que nos permiten plantear las ecuaciones diferenciales parciales que describen el transporte de masa y de calor, las cuales son deducidas mediante el método de la formulación axiomática.

Tomamos como punto de partida las propiedades extensivas del sistema que pretendemos modelar y le asociamos la propiedad intensiva correspondiente basándonos en las características físicas del sistema. Luego aplicamos la ecuación de balance global que al someterlas a los supuestos necesarios para mecánica de fluidos en medios porosos con densidad variable, se convierten en la ecuación de flujo, ley de Darcy y ecuación de transporte que se emplean para el modelo de densidad variable que aborda esta tesis.

El modelo de flujo que se presentará a continuación está basando en un conjunto de supuestos usados comúnmente en hidrología subterránea además de considerar la variabilidad en la densidad del fluido:

El medio poroso está saturado con el fluido. Esto significa que el fluido llena los espacios de los poros en la matriz sólida;

La matriz sólida permanece en reposo durante el proceso de flujo del fluido;

La matriz sólida es elástica. Más precisamente, la porosidad de la matriz es una función de la presión del fluido. Entonces, el nivel de porosidad de la matriz puede cambiar con el tiempo. Esto a pesar del hecho de que la velocidad macroscópica de la matriz sólida es cero a través del proceso completo;

El fluido es compresible. La velocidad de las partículas del fluido satisfacen la ley de Darcy; El fluido no está sujeto a procesos de difusión, así que  $\tau = 0$ .

Como la densidad del fluido, generalmente es una función no sólo dependiente de la presión, sino también de la temperatura, en sí misma puede ser una función de la presión. Dicha función está determinada por el tipo de los procesos termodinámicos que el fluido realiza durante su movimiento. Se asumen usualmente dos procesos alternativos: o bien tal proceso es isotérmico (la temperatura no cambia) o es adiabático (no hay intercambio de calor). Sin embargo, la suposición de aquí adoptada es que la densidad es sólo una función de su presión.

Además, la densidad del fluido puede ser una función de la concentración de las especies disueltas. Por lo tanto, en el supuesto de que la densidad sea sólo una función de la presión, se está aceptando implícitamente una dependencia insignificante de la densidad del fluido en la concentración de especies.

El sistema de flujo es un sistema de dos fases que consiste en la matriz sólida y el fluido contenido en sus poros. Sin embargo, el hecho de que el movimiento de la fase sólida es

conocido, ya que está en reposo, permite tratarlo como la fase fluida exclusivamente y tratar el sistema como uno de una sola fase. Esta única fase, a su vez, está hecho de un solo componente, el fluido. Entonces, la familia de propiedades extensivas consiste de sólo una propiedad extensiva: nombrada, *masa del fluido*. Recordando que la matriz sólida está saturada, vemos que la masa del fluido contenido en un volumen  $B(t)$  ocupado por el sistema fluido- poroso está dada por

$$M_w(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) \rho_w(\underline{x}, t) dx$$

donde  $\varepsilon$  es la porosidad y  $\rho_w$  es la densidad del agua que depende de la concentración de sales, la temperatura y la presión  $\rho_w(S, T, P)$  en nuestro modelo.

Estamos interesados en seguir el movimiento de los cuerpos fluidos, entonces  $B(t)$  se moverá con la velocidad del fluido. Cuando la matriz sólida está saturada por el fluido, la porosidad, es igual a la fracción del espacio físico ocupado por el fluido. Entonces  $\varepsilon \rho_w$  es la masa de fluido por unidad de volumen del espacio físico ocupado por el sistema fluido-medio poroso. Así tenemos que la propiedad intensiva asociada con la masa del fluido es  $\varepsilon(\underline{x}, t) \rho_w(\underline{x}, t)$ . Entonces, la ecuación diferencial de balance está dada por

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_w \underline{v}) = 0$$

donde  $\varepsilon \rho_w$  está en función de la presión exclusivamente. Para aplicar tales ecuaciones es necesario hacer más explícita la dependencia de  $\varepsilon \rho_w$  con la presión del fluido. En particular, el objetivo del siguiente desarrollo es expresar la derivada con respecto al tiempo de  $\varepsilon \rho_w$  en términos de la derivada de la presión.

Para ello, procedemos a descomponer la derivada del tiempo de  $\varepsilon \rho_w$  en dos contribuciones: una para la compresibilidad del fluido y otra para la elasticidad de la matriz sólida. Tal descomposición se sigue inmediatamente cuando se aplica la fórmula de la derivada para un producto:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial(\rho_w)}{\partial t} + \rho_w \frac{\partial(\varepsilon)}{\partial t}$$

Aquí el término  $\frac{\partial(\rho_w)}{\partial t}$  da la contribución de la compresibilidad del fluido, mientras que el término  $\frac{\partial(\varepsilon)}{\partial t}$  da la contribución de la elasticidad de la matriz sólida como un todo y no los granos individuales solos. En seguida abordaremos una breve explicación para cada uno de estos términos.

A continuación haremos uso de que el fluido satisface una ecuación de estado, la cual permite expresar la densidad como una función  $\rho_w(P)$  de la presión exclusivamente. Por otro lado, durante el proceso de flujo del fluido la presión es una función de la posición y el tiempo  $P(\underline{x}, t)$ . Sin embargo, el fluido en sí mismo se asume como homogéneo, esto es, satisface la misma ecuación de estado a cada lugar en el espacio y tiempo. Entonces, la densidad es una función de la posición y el tiempo dada por  $\rho_w(P(\underline{x}, t))$  lo que implica

$$\frac{\partial(\rho_w)}{\partial t} = \frac{d\rho_w}{dP} \frac{\partial(P)}{\partial t} \equiv \beta \rho_w \frac{\partial(P)}{\partial t}$$

Esta ecuación define el parámetro  $\beta$ , conocido como la compresibilidad del fluido, definido más explícitamente por

$$\beta \equiv \frac{1}{\rho_w} \frac{d\rho_w}{dP} = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP}$$

Aquí  $V$  es el volumen específico del fluido, definido por  $V \equiv \rho^{-1}$ . En otras palabras, es el volumen por unidad de masa.

Para entender los procesos que produce y determina la compresibilidad de la matriz sólida, presentamos un breve análisis del estrés. Sea  $P_{tot}$  la presión total (fuerza por unidad de área) atribuida a todo el sistema. Parte del sistema está soportado por la matriz sólida y otra parte por el fluido. A notación  $P_{ef}$  (de presión efectiva) se usa para la parte de la matriz sólida.

Entonces

$$P_{tot} = P_{ef} + P$$

Observemos que la magnitud de la presión total depende de las condiciones del ambiente alrededor del sistema medio poroso-fluido.

Cuando se considera el supuesto de que la presión total es independiente del tiempo, un cambio en la presión del fluido va acompañado por un cambio en la presión efectiva, lo cual implica que

$$\Delta P_{ef} + \Delta P = \Delta P_{tot} = 0.$$

Notemos que cuando incrementa la presión en los poros, la presión efectiva decrece y los poros se expanden.

Más aun, la compresibilidad de la matriz sólida  $\beta_{tot}$  y la compresibilidad de los granos sólidos  $\beta_s$  están dados, respectivamente, por

$$\beta_{tot} \equiv \frac{1}{V_{tot}} \frac{dV_{tot}}{dP_{ef}} \text{ y } \beta_s \equiv \frac{1}{V_s} \frac{dV_s}{dP_{ef}} = \rho_s \frac{d\rho_s}{dP_{ef}}$$

donde  $\rho_s$  es la densidad del material sólido y  $V_s$  es el volumen específico de la matriz sólida  $= \rho_{tot}^{-1}$ .

Observemos que  $\rho_{tot} = (1-\varepsilon)\rho_s$  y  $V_{tot} = \frac{1}{(1-\varepsilon)\rho_s}$ .

Empezamos nuestro análisis con la identidad  $\varepsilon = 1 - \frac{(1-\varepsilon)\rho_s}{\rho_s} = 1 - \frac{V_s}{V_{tot}}$ .

Tomando la derivada para esta relación y multiplicando y dividiendo el segundo término por  $V_s$ , obtenemos

$$\frac{d\varepsilon}{dP_{ef}} = \frac{V_s}{V_{tot}} \frac{1}{V_{tot}} \frac{dV_{tot}}{dP_{ef}} - \frac{V_s}{V_{tot}} \frac{1}{V_s} \frac{dV_s}{dP_{ef}}$$

lo cual puede escribirse como

$$\frac{d\varepsilon}{dP_{ef}} = (\beta_s - \beta_{tot}) \frac{V_s}{V_{tot}} = (\beta_s - \beta_{tot})(1-\varepsilon)$$

entonces

$$\frac{d\varepsilon}{dP} = - \frac{d\varepsilon}{dP_{ef}} = (\beta_{tot} - \beta_s)(1-\varepsilon)$$

de donde

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = - \frac{d\varepsilon}{dP} \frac{\partial P}{\partial t} = (\beta_{tot} - \beta_s)(1-\varepsilon) \frac{\partial P}{\partial t}.$$

Usualmente  $\beta_{tot} \gg \beta_s$  y  $\beta_s$  es despreciable. Entonces

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \beta_{tot} (1 - \varepsilon) \frac{\partial P}{\partial t}$$

La condición  $\beta_{tot} \gg \beta_s$  se satisface cuando el cambio en el volumen de los poros es mucho más grande que el cambio en el volumen del material sólido que forma la matriz sólida.

Con lo anterior ya podemos obtener

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_w}{\partial t} = \rho_w \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{tot} - \beta_s) \} \frac{\partial P}{\partial t}$$

El coeficiente de almacenamiento específico,  $S_s$ , se define como

$$S_s \equiv \rho_w \hat{g} \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{tot} - \beta_s) \}$$

donde  $\hat{g}$  es la aceleración de la gravedad. La ecuación diferencial de balance después de multiplicar por  $\hat{g}$ , puede escribirse ahora como

$$S_s \frac{\partial P}{\partial t} + \hat{g} \nabla \cdot (\varepsilon \rho_w \underline{v}) = 0$$

Resumiendo, tenemos que  $\rho_w(S, T, P)$  y la ecuación de balance  $\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_w \underline{v}) = 0$ , en

donde introduciremos a continuación la Ley de Darcy que se expresa como

$$\underline{v} = -\frac{k}{\mu} (\nabla P + \rho_w \underline{g}) = -\frac{k \rho_w \hat{g}}{\mu} \left( \frac{\nabla P}{\rho_w \hat{g}} + (0, 0, 1) \right) = -\frac{K}{\mu} \nabla h \text{-----} (*)$$

donde  $\frac{K}{\mu} = \frac{\rho_w \hat{g}}{\mu} k$ . Con lo anterior podemos escribir la ecuación de balance como

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \underline{v}) = 0$$

entonces

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_w \frac{K}{\mu} \nabla h) = 0$$

Si el fluido es incompresible el nivel piezométrico  $h(\underline{x}, t) \equiv H(P(\underline{x}, t), z(\underline{x}))$  o más explícitamente

$$h(\underline{x}, t) \equiv \frac{P(\underline{x}, t) - P_0}{\rho_w \bar{g}} + z(\underline{x})$$

El agua tiene muy poca compresibilidad bajo condiciones normales. Debido a este hecho, la ecuación anterior es usada extensamente en hidrogeología subterránea.

Para uso posterior, podemos reescribir la ecuación anterior como

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \rho_w \bar{g} \frac{\partial h}{\partial t}$$

Otra propiedad importante de la carga piezométrica, que a su vez motiva su uso extensivo, es

$$\nabla P + \rho_w \bar{g} \nabla z = \rho_w \bar{g} \nabla h.$$

Continuando con nuestro análisis tenemos que

$$h_0 = \frac{P}{\rho_0 \hat{g}} + z, K_0 = \frac{\rho_0 \hat{g}}{\mu} k$$

entonces

$$p = (h_0 - z) \rho_0 \hat{g}$$

Considerando que  $\bar{g} = (0, 0, -1)$  y sustituyendo en (\*) tenemos

$$\begin{aligned} \underline{u} &= -\frac{k}{\mu} \left( \nabla \left[ (h_0 - z) \rho_0 \hat{g} \right] + \rho_w \bar{g} \right) \\ &= -\frac{k}{\mu} \left( \rho_0 \hat{g} \nabla h_0 - \rho_0 \hat{g} (0, 0, 1) - \rho_w \bar{g} \right) \\ &= -\frac{k}{\mu} \left( \rho_0 \hat{g} \nabla h_0 - \hat{g} (\rho_0 - \rho_w) (0, 0, 1) \right) \\ &= -\frac{k}{\mu} \rho_0 \hat{g} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) (0, 0, 1) \right) \\ &= -\frac{K_0}{\rho_0} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right). \end{aligned}$$

Por lo anterior,

$$\nabla \cdot (\rho_w \underline{u}) = \nabla \cdot \left( \rho_w \left[ -\frac{K_0}{\rho_0} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right) \right] \right)$$

Finalmente, para escribir completa la ecuación de balance de la masa del fluido volvemos a

la ecuación

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho_w \bar{g} \frac{\partial h}{\partial t}$$



y como

$$p = (h_0 - z) \rho_0 \hat{g}$$

entonces

$$\frac{\partial h_0}{\partial t} = \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t}$$

por lo tanto

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_w}{\partial t} = \rho_w \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{\text{tot}} - \beta_s) \} \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t}.$$

Así tenemos la ecuación para la carga hidráulica de Koziy obtenida mediante la formulación axiomática

$$\rho_w \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon) (\beta_{\text{tot}} - \beta_s) \} \rho_0 \hat{g} \frac{\partial h_0}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_w \left[ -\frac{K_0}{\rho_0} \left( \nabla h_0 - \left( \frac{\rho_0 - \rho_w}{\rho_0} \right) \nabla z \right) \right] \right) = 0$$

## B. Balance de energía

El sistema en cuestión se considera que tiene dos fases la sólida, correspondiente a la matriz rocosa, y la líquida, el fluido con las sales disueltas.

Fases	Componentes
<b>Líquida</b>	<b>Sales disueltas</b>
<b>Sólida</b>	<b>Matriz sólida</b>

Tabla I.2. Fases y componentes

En cada punto del espacio físico hay una partícula por cada una de las fases y cada una de ellas se mueve con su propia velocidad, por lo mismo, cada dominio define dos cuerpos, que son los formados por los conjuntos de partículas correspondientes a cada una de las fases. Además, en cada punto tenemos definidas dos velocidades, que en general pueden ser diferentes por lo que dos cuerpos que en un tiempo ocupan el mismo dominio, en general en otros tiempos ocupan dominio que no coinciden. En el caso que nos ocupa es posible hacer el balance de energía utilizando la velocidad asociada con la fase correspondiente.

Supongamos que para nuestro sistema las propiedades extensivas serán:

$E^w(t)$  Energía total del agua (fase líquida)

$E^s(t)$  Energía total de la fase sólida

de tal manera que

$$E^w(t) \equiv \int_{B_w(t)} \varepsilon \rho_w S_w \left( \frac{1}{2} |\underline{v}^w|^2 + U_w \right) d\underline{x} \quad (1)$$

y

$$E^s(t) \equiv \int_{B_s(t)} (1-\varepsilon) \rho_s U_s d\underline{x} \quad (2)$$

donde

$U_\alpha$  es la energía interna específica por unidad de masa de la fase  $\alpha$

$S_w$  se refiere a la fracción del volumen de los poros en la matriz sólida ocupada por el agua.

$S_w = 1$  ya que en el agua tenemos una sola componente.

La energía cinética del agua es despreciable pues  $|\underline{v}^w|$  es muy pequeña, entonces nos queda la ecuación (1) como sigue

$$E^w(t) \equiv \int_{B_w(t)} \varepsilon \rho_w U_w d\underline{x} \quad \left( S_w = 1, |\underline{v}^w| \approx 0 \right)$$

Con lo anterior identificamos la propiedad intensiva para la fase agua  $\psi^w = \varepsilon \rho_w U_w$  y la propiedad intensiva para la fase sólida  $\psi^s = (1-\varepsilon) \rho_s U_s$ .

Ahora obtengamos las ecuaciones de balance, partiendo de la derivada total

$$\frac{dE^w}{dt} = \int_{B_w(t)} \left\{ \rho_w \left[ \varepsilon h_w - g(\underline{u}_w)_z \right] - q_L^w + g_I^{E^w} \right\} d\underline{x} + \int_{\partial B_w} \left( \varepsilon \underline{\sigma}^w \underline{v}^w + q^w \right) \cdot \underline{n} d\underline{x}$$

donde

$\rho_w \varepsilon h_w$  es la tasa por unidad de volumen del espacio físico en el que se suministra energía interna a la fase w por fuentes distribuidas en el interior del cuerpo (por ejemplo, reacciones químicas exotermas),

$q_L^w$  es la pérdida de calor de la fase w por la sobrecarga por unidad de volumen del espacio físico,

$g(\underline{u}_w)_z$  (g aceleración de la gravedad  $\underline{u}_w = \varepsilon \underline{v}^w$ ) Trabajo mecánico realizado por la fuerza gravitacional en la fase w,

$g_I^{E_w}$  energía total que entra en la fase agua proveniente de la fase sólida y los ( $\tau$ 's) flujos de energía que entran a la fase w por su frontera son:

$q^w$  flujo de calor

$\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \underline{v}^w$  trabajo mecánico realizado en la frontera de w y

$$g_I^{E_w} + g_I^{E_s} = 0.$$

Suponemos que  $g(\underline{u}_w)_z = 0$ , es decir, despreciamos el trabajo realizado por fuerzas viscosas

$$\underline{\underline{\sigma}}^w = -P_w \underline{I}$$

donde

$P_w$  es la presión de la fase agua

$\underline{I}$  es la identidad

$$\int_{\partial B_w} (\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \underline{v}^w) \cdot \underline{ndx} = \int_{\partial B_w} (\varepsilon P_w \underline{I} \underline{v}^w) \cdot \underline{ndx} = \int_{\partial B_w} P_w \underline{u}^w \cdot \underline{ndx}$$

Entonces

$$\frac{dE^w}{dt} = \int_{B_w} \left\{ \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^{E_w} \right\} dx + \int_{\partial B_w} (q^w - P_w \underline{u}^w) \cdot \underline{ndx}$$

donde

$$g^w = \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^{E_w}$$

$$\tau^w = q^w - P_w \underline{u}^w$$

Recordando la ecuación general de balance

$$\frac{\partial(\varphi^w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^w \varphi^w) = \nabla \cdot \tau^w + g^w$$

en ella ahora podemos sustituir los términos correspondientes

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_w U_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^w \varepsilon \rho_w U_w) = \nabla \cdot (q^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_L^w + g_I^{E_w}.$$

Para introducir la temperatura (temperatura libro Herrera y Pinder pág 34) tenemos

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} = U_w \frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} + \varepsilon\rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} \text{ y}$$

$$\nabla \cdot (\underline{u}^w \rho_w U_w) = U_w \nabla \cdot (\underline{u}^w \rho_w) + \rho_w \underline{u}^w \nabla \cdot U_w.$$

Por la ecuación de continuidad en medios porosos

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \underline{u}^w) = 0$$

Por consiguiente

$$\varepsilon\rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} + \rho_w \underline{u}^w \cdot \nabla U_w = \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_{Ll}^w + g_{I}^w.$$

Recordando que  $\frac{D(\bullet)}{Dt} = \frac{\partial(\bullet)}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla(\bullet)$  tenemos

$$\varepsilon\rho_w \frac{D(U_w)}{Dt} = \varepsilon\rho_w \frac{\partial(U_w)}{\partial t} + \rho_w \underline{u}^w \cdot \nabla U_w = \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + \rho_w \varepsilon h_w - q_{Ll}^w + g_{I}^w$$

entonces

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{1}{\varepsilon\rho_w} \nabla \cdot (\underline{q}^w - P_w \underline{u}^w) + h_w - \frac{q_{Ll}^w}{\varepsilon\rho_w} + \frac{g_{I}^w}{\varepsilon\rho_w}.$$

Consideremos

$$\nabla \cdot (P_w \underline{u}^w) = \nabla \cdot (\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + \varepsilon P_w \nabla \cdot \underline{v}^w$$

Y ahora sustituimos en la ecuación que teníamos de  $\frac{DU_w}{Dt}$  para obtener

$$\frac{DU_w}{Dt} = \nabla \cdot \frac{\underline{q}^w}{\varepsilon\rho_w} - \frac{1}{\varepsilon\rho_w} (\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + \varepsilon P_w \nabla \cdot \underline{v}^w) + h_w - \frac{q_{Ll}^w}{\varepsilon\rho_w} + \frac{g_{I}^w}{\varepsilon\rho_w} (**)$$

Volviendo a la ecuación de continuidad tenemos

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_w)}{\partial t} + \varepsilon\rho_w \nabla \cdot \underline{v}^w + \underline{v}^w \cdot \nabla(\varepsilon\rho_w) = 0$$

Entonces

$$\varepsilon\rho_w \nabla \cdot \underline{v}^w = -\frac{D(\varepsilon\rho_w)}{Dt} (*)$$

Entonces

$$\nabla \cdot \underline{V}^w = -\frac{1}{\varepsilon \rho_w} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt}$$

Sustituyendo en la ecuación (\*\*) tenemos

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{V}^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{P_w}{\varepsilon \rho_w} \left( \frac{1}{\varepsilon \rho_w} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} \right) + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

Entonces

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{V}^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{P_w}{\varepsilon \rho_w^2} \frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

Como  $V_w \equiv \frac{1}{\rho_w}$  entonces

$$\frac{DV_w}{Dt} = \frac{\partial V_w}{\partial t} + \underline{V}^w \cdot \nabla V_w = \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial t} + \underline{V}^w \cdot \nabla(\rho_w^{-1}) = -\rho_w^{-2} \frac{\partial \rho_w}{\partial t} - \rho_w^{-2} \underline{V}^w \cdot \nabla \rho_w = -\frac{1}{\rho_w^2} \frac{D\rho_w}{Dt}$$

Además

$$\frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} = \varepsilon \frac{D(\rho_w)}{Dt} + \rho_w \frac{D(\varepsilon)}{Dt}$$

Y por otro lado tenemos que por la incompresibilidad de un fluido en un medio poroso

$$\frac{D(\varepsilon)}{Dt} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \underline{V}^w) = 0$$

Por lo que  $\rho_w \frac{D(\varepsilon)}{Dt} = 0$ , entonces  $\frac{D(\varepsilon \rho_w)}{Dt} = \varepsilon \frac{D(\rho_w)}{Dt}$ .

Reescribiendo tenemos

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{V}^w}{\varepsilon \rho_w} + P_w \frac{D(V_w)}{Dt} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

Podemos suponer que  $U(T)$  y  $\rho_w(S, T, P)$  por lo que

$$\frac{DU_w}{Dt} = \frac{\partial U_w}{\partial t} + \underline{V}^w \cdot \nabla U_w = \frac{dU_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial t} + \underline{V}^w \cdot \left( \frac{dU_w}{dT_w} \nabla T_w \right)$$

Además recordemos que  $\nabla U_w = \left( \frac{\partial U_w}{\partial x_1}, \frac{\partial U_w}{\partial x_2}, \frac{\partial U_w}{\partial x_3} \right)$ ;  $\frac{\partial U_w}{\partial x_i} = \frac{dU_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial x_i}$  y como  $V_w = \rho_w^{-1}$  y

$\rho_w(S, T, P)$  entonces  $V_w(S, T, P)$  por lo que

$$\frac{DV_w}{Dt} = \frac{dV_w}{dT_w} \frac{\partial T_w}{\partial t} + \frac{\partial V_w}{\partial T_w} \underline{v}^w \cdot \nabla T_w = \frac{\partial V_w}{\partial T_w} \frac{DT_w}{Dt}$$

Sustituyendo

$$\frac{dU_w}{dT_w} \frac{DT_w}{Dt} + P_w \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial T_w} \frac{DT_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

donde el calor específico es  $c_w = \frac{dU_w}{dT_w} + P_w \frac{\partial \rho_w^{-1}}{\partial T_w}$

entonces nos queda la ecuación de balance para el líquido

$$c_w \frac{DT_w}{Dt} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

$$c_w \left\{ \frac{\partial T_w}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla T_w \right\} = \frac{\nabla \cdot \underline{q}^w}{\varepsilon \rho_w} - \frac{\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w}{\varepsilon \rho_w} + h_w - \frac{q_L^w}{\varepsilon \rho_w} + \frac{g_I^w}{\varepsilon \rho_w}$$

y ahora procedemos con el desarrollo de la ecuación de balance para el sólido, donde la propiedad extensiva es  $E^s$  y la propiedad intensiva asociada es  $(1-\varepsilon)\rho_s U_s$  con las que podemos escribir la ecuación

$$\frac{dE^s}{dt} = \int_{B(t)} \{g_I^s - q_L^s\} d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} q^s \cdot \underline{n} d\underline{x}$$

Consideramos que  $\underline{v}_s = 0$  y lo escribimos en la ecuación de balance en su forma de ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s$$

entonces

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} + U_s \frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s}{\partial t}$$

y por la ecuación de continuidad para el sólido  $\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s}{\partial t} = 0$  nos queda

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s U_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s$$

dividimos por  $(1-\varepsilon)\rho_s$  y obtenemos

$$\frac{\partial U_s}{\partial t} = \frac{1}{(1-\varepsilon)\rho_s} (\nabla \cdot \underline{q}^s + g_I^s - q_L^s) = \frac{dU_s}{dT_s} \frac{\partial T_s}{\partial t}$$

Con lo que tenemos la ecuación de balance para el sólido

$$(1-\varepsilon)\rho_s \frac{dU_s}{dT_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial U_s}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{q}^s + \underline{g}_T^{E_s} - \underline{q}_L^s$$

$$c_s = \frac{dU_s}{dT_s}$$

Sumando las ecuaciones de balance para el sólido y el líquido donde suponemos que  $T_s = T_w = T$ , ya que se igualan instantáneamente, y multiplicando por  $\varepsilon\rho_w$  la ecuación del agua tenemos

$$\varepsilon\rho_w c_w \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} + \underline{v}^w \cdot \nabla T \right\} = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + h_w \varepsilon \rho_w - \underline{q}_L^w + \underline{g}_T^{E_w}$$

$$\left[ (1-\varepsilon)\rho_s c_s + \varepsilon\rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon\rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w + h_w \varepsilon \rho_w - \underline{q}_L^w - \underline{q}_L^s + \nabla \cdot \underline{q}^s$$

Recordemos que  $\underline{g}_T^{E_w} + \underline{g}_T^{E_s} = 0$  es el intercambio de energía del sólido con el líquido y que no hay fuentes o sumideros de la fase sólida. Además, no hay fuentes internas de energía, las fuentes por reacciones químicas son despreciables. Por tanto, la ecuación queda:

$$\left[ (1-\varepsilon)\rho_s c_s + \varepsilon\rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon\rho_w c_w (\underline{v}^w \cdot \nabla T) = \nabla \cdot \underline{q}^w - \nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w - \underline{q}_L^w - \underline{q}_L^s + \nabla \cdot \underline{q}^s$$

Definimos la emisión de calor específico de fuentes de calor en el agua  $Q_T^w$  del término  $-\underline{q}_L^w = \varepsilon\rho_w Q_T^w$  y análogamente, la emisión de calor específico de fuentes en la fase sólida  $Q_T^s$  a partir de  $-\underline{q}_L^s = (1-\varepsilon)\rho_s Q_T^s$ .

Por otro lado, los términos difusivos son:

$$\underline{q}^w = \varepsilon(\underline{\lambda}_w \cdot \nabla T + \underline{\lambda}_D \cdot \nabla T)$$

$$\underline{q}^s = (1-\varepsilon)(\underline{\lambda}_s \cdot \nabla T)$$

donde  $\underline{\lambda}_w$  es el coeficiente de la conductividad térmica del agua (tensor diagonal),  $\underline{\lambda}_D$  es el tensor de dispersión térmica y  $\underline{\lambda}_s$  es el coeficiente de conductividad térmica de la matriz sólida.

El término  $-\nabla(\varepsilon P_w) \cdot \underline{v}^w$  proviene del trabajo mecánico en la frontera de w

$$\int_{\partial B_w} (\varepsilon \underline{\underline{\sigma}}^w \cdot \underline{v}^w) \cdot n d\underline{x}$$

En el libro de Herrera y Pinder dice que si despreciamos el calor que se deriva del trabajo producido por las fuerzas viscosas, el término derivado de eso es

$$\underline{\underline{\varepsilon}} \underline{\underline{\sigma}}^w \cdot \underline{\underline{v}}^w = -P_w \underline{u}_w$$

Todo el calor producido por el trabajo en la frontera se desprecia, por lo que  $P_w \underline{u}_w = 0$  (Lyudmyla Koziy, 2009) y finalmente queda la ecuación de la siguiente manera

$$\left[ (1-\varepsilon) \rho_s c_s + \varepsilon \rho_w c_w \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_w c_w \left( \underline{v}^w \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot \left( \varepsilon (\underline{\lambda}_w \cdot \nabla T + \underline{\lambda}_D \cdot \nabla T) \right) + \varepsilon \rho_w Q_T^w + (1-\varepsilon) \rho_s Q_T^s + \nabla \cdot \left( (1-\varepsilon) (\underline{\lambda}_s \cdot \nabla T) \right)$$

y simplificamos usando

$$c_e = \left[ (1-\varepsilon) \rho_s c_s + \varepsilon \rho_w c_w \right]$$

$$\underline{\lambda}_e = \varepsilon \underline{\lambda}_w + (1-\varepsilon) \underline{\lambda}_s$$

$$Q_T = \varepsilon \rho_w Q_T^w + (1-\varepsilon) \rho_s Q_T^s$$

Para tener

$$c_e \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_w c_w \left( \underline{v}^w \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot \left( (\underline{\lambda}_e + \varepsilon \underline{\lambda}_D) \cdot \nabla T \right) + Q_T$$

## C. Transporte en medios porosos

Los fluidos, cuando se encuentran en un medio poroso, no llenan completamente el espacio físico que contiene al sistema poroso. En efecto, aunque la matriz esté saturada, como se supone a continuación, el fluido sólo ocupa el volumen de los poros de la matriz sólida, el cual constituye una fracción del mismo. Así, la masa del soluto está dada por:

$$M_s(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

Aquí,  $c(\underline{x}, t)$  es la concentración del soluto en el fluido, lo cual se refiere a la proporción que hay entre la cantidad de éste (sales) y la cantidad de solvente (agua). La propiedad intensiva asociada a la masa del soluto es el integrando en el segundo miembro de la ecuación; es decir, el producto de la porosidad por la concentración del soluto:  $\varepsilon(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t)$ .

La ecuación global del balance para la masa de un soluto es:



$$\frac{dM_s}{dt}(t) = \int_{B(t)} g_s(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B} \tau_s(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x}$$

que es equivalente a:

$$\frac{\partial(\varepsilon c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) = g_s + \nabla \cdot \tau_s$$

El vector del flujo difusivo está dado por

$$\tau_s(\underline{x}, t) = \varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c$$

Donde  $\underline{D}$  es el tensor de dispersión hidrodinámica, cuya expresión es

$$D_{ij} = D_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|} + D_\alpha \theta \delta_{ij}.$$

A éste se le puede descomponer en dos partes: el tensor de dispersión molecular  $D_{ij}^m = D_\alpha \theta \delta_{ij}$

y el tensor de dispersión mecánica  $D_{ij}^M = D_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|}$ . Aquí,  $\theta$  es un número real,

menor que uno, y se refiere a la tortuosidad, lo cual depende de la estructura de la matriz sólida.  $D_T$  es el coeficiente de dispersividad mecánica transversal y  $D_L$  es el coeficiente de dispersividad mecánica longitudinal.

La ecuación nos queda entonces:

$$\frac{\partial(\varepsilon c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) - \nabla \cdot (\varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c) = g_s$$

En resumen, los modelos de los sistemas continuos están constituidos por:

- Una colección de propiedades intensivas o, lo que es lo mismo, extensivas;
- El conjunto de ecuaciones de balance local correspondientes (diferenciales y de salto), en cada una de las cuales la velocidad de las partículas es la de la fase correspondiente;
- Suficientes relaciones que ligen a las propiedades intensivas entre sí y que definan a  $\underline{a}$ , y en términos de éstas, las cuales se conocen como leyes constitutivas; y  $\underline{g} \square \underline{v}$
- Condiciones iniciales y de frontera que deben satisfacer las propiedades intensivas.

## D. Condiciones iniciales y de frontera

Cuando hablamos de la modelación de un problema, necesitamos que el modelo de un sistema continuo sea completo y bien planteado, para ello requiere que existe una y sólo una solución y que esta dependa de manera continua de las condiciones iniciales y de frontera del problema.

Para obtener modelos completos, además de las ecuaciones básicas es necesario evaluar la generación interna y el campo de flujo en términos de funciones conocidas de las propiedades intensivas asociadas. A través de las ecuaciones constitutivas se integra el conocimiento científico y tecnológico en los modelos matemáticos.

Las condiciones iniciales y condiciones de frontera que son adecuadas para cada problema cambian con el tipo de ecuación diferencial que se considere. Las ecuaciones diferenciales asociadas a los modelos que se utilizan para simular el transporte de solutos por fluidos libres incluyen a los tres tipos principales: hiperbólicas, elípticas y parabólicas. Cuando se incorporan los procesos difusivos, la ecuación diferencial que gobierna la evolución del transporte es parabólica, en problemas dependientes del tiempo, mientras que los estados estacionarios difusivos están gobernados por ecuaciones elípticas. Cuando los procesos difusivos no se incorporan en el modelo, la ecuación diferencial es hiperbólica, tanto para modelos que dependen del tiempo, como para los estados estacionarios.

Un problema bien planteado para el estado estacionario es uno que se formula en un dominio  $\Omega$  y se imponen condiciones de frontera del tipo de Robin:

$$\alpha \frac{\partial c}{\partial n} + \beta c = g_b, \text{ en } \partial\Omega, \alpha^2 + \beta^2 = 1.$$

El problema de Dirichlet ( $\alpha = 0, \beta = 1$ ), en el cual

$$c = g_b, \text{ en } \partial\Omega$$

se plantea cuando se conoce la concentración en la frontera del dominio de definición del problema,  $\partial\Omega$ , y se le utilice como dato.

En el problema de Neuman,  $(\alpha = 1, \beta = 0)$ , en el cual

$$\frac{\partial c}{\partial n} = g_0, \text{ en } \partial\Omega,$$

lo que se da como dato es la derivada normal de la concentración,  $\frac{\partial c}{\partial n}$ . Esto es equivalente

a dar como dato el flujo difusivo  $-D \frac{\partial c}{\partial n}$  a través de la frontera del dominio que se modela.

Por lo que respecta a los modelos de problemas evolutivos, ellos se pueden plantear en el dominio  $\Omega$ , para cada valor de  $t$  de un intervalo de tiempo  $[0, T]$ ; es decir,  $0 \leq t \leq T$ . En este caso las condiciones de frontera deben complementarse con las condiciones iniciales

$$c(\underline{x}, 0) = c_0(\underline{x}), \underline{x} \in \Omega$$

Para el caso del transporte no difusivo, las ecuaciones son hiperbólicas de primer orden y éstas se pueden reducir a ecuaciones diferenciales ordinarias que se satisfacen a lo largo de ciertas curvas características. Estos problemas bien planteados son del tipo de los problemas de condiciones iniciales de Cauchy.

## II. Anexo: Lista de símbolos

Símbolo	Unidades	Nombre
$\varepsilon$	Adimensional	Porosidad
$k$	$m^2$	Permeabilidad
$\alpha_L$	$m$	Dispersividad longitudinal
$\alpha_T$	$m$	Dispersividad transversal
$g$	$\frac{m}{s^2}$	Aceleración de la gravedad en la dirección $y$
$\beta$	$\frac{m \cdot s^2}{kg}$	Compresibilidad del fluido
$\sigma_w$	$\frac{m^2}{s} \text{ o } \frac{J}{m^3 \cdot s}$	Difusividad del fluido o Difusividad molecular del soluto en el fluido
$c_w$	$\frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$	Capacidad calorífica específica del fluido
$c_s$	$\frac{J}{kg \cdot ^\circ C}$	Capacidad calorífica específica del grano sólido
$\rho_o$	$\frac{kg}{m^3}$	Densidad inicial del fluido
$\rho_s$	$\frac{kg}{m^3}$	Densidad del grano sólido
$T_o$	$^\circ C$	Temperatura inicial del fluido
$C_o$	$\frac{kg}{kg}$	Valor base de la concentración del soluto
$\frac{\partial \rho}{\partial C}$	$\frac{kg^2}{kg \cdot m^3}$	Cambio de la densidad con respecto a la concentración de solutos
$\frac{\partial \rho}{\partial T}$	$\frac{kg}{m^3 \cdot ^\circ C}$	Cambio de la densidad con respecto a la temperatura
$B$	$m$	Espesor del acuífero en malla 2D
$\mu$	$Pa \cdot s$	Viscosidad dinámica del agua
$\alpha$	$\frac{m \cdot s^2}{kg}$	Compresibilidad de la matriz sólida

### III. Anexo: Principales características y limitaciones de SUTRA

SUTRA del USGS es un simulador del movimiento del flujo de agua subterránea de densidad variable con transporte de energía o solutos. Es capaz de simular sustancias disueltas en un ambiente subsuperficial y tanto medios saturados como no saturados.

- Física
  - Flujo de agua subterránea
    - Saturado/No saturado
    - Densidad constante o dependiente de la salinidad
    - Funciones de flujo no saturado programables por el usuario
  - Transporte
    - Solute solo o energía térmica
    - Solute con producción cero y de primer orden/decaimiento; producción de energía de orden cero/decaimiento lineal, Freundlich o adsorción de Langmuir
  - Dependencia del tiempo
    - Solución en estado estacionario o transiente
    - Condiciones de frontera con variación en el tiempo a través de archivos de entrada programables en subrutinas.
- Geometría
  - Modelos en 2D
    - Coordenadas cartesianas
    - Coordenadas cilíndricas
  - Modelos en 3D
    - Coordenadas cartesianas
    - Totalmente en 3D
- Métodos numéricos
  - Discretización
    - Método híbrido Galerkin-elemento finito y método de diferencias finitas integradas
    - Elementos finitos cuadrilaterales (2D) o hexahedros (3D)
    - Discretización por diferencias finitas totalmente implícita en el tiempo

- Problemas no lineales
  - Densidad variable y/o problemas de flujo no saturado son no lineales
  - Iteración de Picard para resolver no linealidades
- Métodos de solución del sistema de ecuaciones
  - Eliminación Gaussiana
  - Gradiente conjugado preconditionado
  - GMRES preconditionado
  - ORTHOMIN preconditionado
- Entrada y salida de datos
  - Todos los datos de entrada están contenidos en archivos de texto y agrupados en *datasets*
  - Los archivos de salida están escritos en archivos de texto a la pantalla, tiene un listado flexible por columnas de la presión, la concentración o la temperatura, la saturación y la velocidad, además de la salida de pozos de observación (presión, concentración y saturación contra tiempo), así como cálculos de masa fluida, masa sólida o energía.
  - Este software es de pre y post procesamiento, lo que quiere decir que facilita la formulación de conjuntos de datos de entrada y ayuda con la interpretación de resultados.

SUTRA requiere que el usuario especifique cada tipo de simulación, estructura de la malla, propiedades físicas, controles de simulación y de salida de datos, condiciones de frontera y condiciones iniciales. Todo ello se resume a continuación:

- Tipo de transporte
  - Transporte de solutos  $\phi$
  - Transporte de energía
- Estructura de la malla
  - Esquema numerado por nodo y elemento
  - Coordenadas en el espacio para cada nodo
    - $(x,y)$  en 2D
    - $(x,y,z)$  en 3D
  - Espesor de la malla en cada nodo (sólo 2D)

- Para cada elemento, una lista de nodos que forman sus esquinas
- Propiedades físicas
  - Propiedades asignadas a cada nodo
    - Porosidad
    - Propiedades de flujo no saturado (son un conjunto de propiedades que especifican un número de región para cada nodo y elemento)
  - Propiedades asignadas a cada elemento
    - Permeabilidades
    - Dispersividades longitudinales y transversales
    - Propiedades de flujo no saturado
  - Propiedades que varían de acuerdo a una función singular de concentración o temperatura que aplica a lo largo del modelo
    - Densidad del fluido como una función de concentración del soluto o la temperatura
    - Viscosidad del fluido como una función de la temperatura (sólo para el transporte de energía)
  - Propiedades a las que se les asigna un solo valor, constante en todo el modelo
    - Compresibilidad de la matriz sólida
    - Calor específico de los granos sólidos (sólo para transporte de energía)
    - Difusividad de los granos sólidos (sólo para transporte de energía)
    - Densidad de los granos sólidos (sólo para transporte de energía o transporte de soluto con adsorción)
    - Compresibilidad del fluido
    - Calor específico del fluido (sólo para transporte de energía)
    - Difusividad del fluido
    - Viscosidad del fluido (sólo para transporte de soluto)
    - Parámetros de equilibrio de la isoterma de adsorción
    - Constantes de grado 0 o 1 para el adsorbato de la producción de masa en el sólido (sólo para transporte de soluto)
    - Constantes de grado 0 o 1 para la tasa de producción de masa en el fluido(sólo para transporte de soluto)

- Tasa de producción de energía en el sólido (sólo para transporte de energía)
    - Tasa de producción de energía en el fluido (sólo para transporte de energía)
    - Componentes de la gravedad
- Simulación y controles de salida
  - Título de la simulación
  - Dimensiones de la simulación
    - Número de nodos
    - Número de elementos
    - Número de condiciones de frontera
    - Número de nodos de observación
  - Modos de simulación
    - Saturado/No saturado
    - Estacionario/Transitorio
    - Inicialización de corrida
    - Información de almacenamiento o reinicio
  - Controles numéricos
    - Ponderación aguas arriba
    - Cumplimiento de las condiciones de frontera
    - Tiempo para cada paso
    - Solución de ciclismo
    - Iteraciones de Picard
    - Parámetros para resolver la matriz
  - Controles de salida
    - resultados por nodo (presión, concentración, saturación)
    - resultados por elemento (velocidad)
    - masa fluida y masa de soluto o de energía
    - resultados en los nodos de observación
    - salida de pantalla
- Condiciones de frontera



- Hay cuatro tipos de condiciones de frontera
  - Fuentes o sumideros de fluidos
  - Fuentes o sumideros de masa del soluto o energía
  - Presiones específicas
  - Concentraciones o temperaturas de soluto específicas
- Especificación de condiciones de frontera
  - Todas las condiciones de frontera deben especificarse en los nodos
  - Las condiciones de frontera no están restringidas a los nodos como la frontera física del modelo; éstas deben especificarse en cada nodo.
  - Por default, no hay flujo de masa o energía dentro o fuera del dominio del modelo en cada nodo para el cual la condición de frontera no esté explícitamente especificado.
  - Las condiciones de frontera dependientes de la variación del tiempo pueden especificarse utilizando el archivo de entrada opcional “.bcs” o puede programarse por el usuario la subrutina BCTIME.
- Condiciones iniciales
  - Condiciones iniciales
    - Tiempo de inicio
    - Presión inicial en cada nodo
    - Concentración inicial del soluto o temperatura en cada nodo.