

autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.
NOMBRE: HERNÁNDEZ RENDÓN
MARÍA DEL CARMEN
FECHA: 15/01/2009
FIRMA: M. del Carmen R.R.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

INSTITUTO DE GEOFÍSICA

**Simulación del Desplazamiento
Vertical de Hidrocarburos en el
Subsuelo**

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTORA EN CIENCIAS
(MODELACIÓN DE SISTEMAS TERRESTRES)

Presenta:

M. en C. María del Carmen Hernández Rendón

Director de Tesis
Dr. Ismael Herrera Revilla

Ciudad Universitaria, México, D.F.

2009



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.

Agradecimientos

Aprovecho esta oportunidad para expresar mi aprecio y gratitud al Dr. Ismael Herrera Revilla, director de esta tesis. Es un privilegio haberme formado bajo su tutela. Me llevo mucho aprendizaje y grandes lecciones. Le agradezco: su respaldo, paciencia y tolerancia.

Mi reconocimiento para los académicos que en distintos momentos dedicaron su tiempo a la revisión de este trabajo. Los comentarios y observaciones de los miembros del jurado resultaron muy valiosos en la etapa final. Es notable la participación del Dr. Fernando Brambila Paz, quien se ocupó de este proyecto en casi todas sus etapas. Aquilato su interés, su buena disposición y el apoyo que me brindó. Valoro los consejos que el Dr. Alfredo Nicolas Carrizosa me dio en los momentos difíciles, así como su ayuda con el método de elemento finito y el esquema de descomposición de operadores.

Aprecio el apoyo que en su momento me brindaron autoridades y personal administrativo del Instituto de Geofísica y del Posgrado en Ciencias de la Tierra. Sin duda, contribuyeron para que este trabajo fuera posible.

La amistad, la solidaridad y la sana discusión académica fueron benéficas. Me siento afortunada porque son much@s l@s compañer@s y amig@s con quienes he podido compartir esta experiencia. Si los mencionara por su nombre, correría el riesgo de incurrir en omisiones. Mi agradecimiento para: l@s algebristas l@s analistas, l@s numéric@s, l@s optimizadores, l@s de gráficas, l@s topólog@s, l@s de la Facultad de Ciencias, l@s del IIMAS, l@s de la UAM-I, l@s que sólo veo en los congresos y también para l@s del INEGI.

Mención aparte merece la familia 'ENOAN'. Con este clan he compartido intereses, inquietudes, proyectos y algunos altibajos. Gracias Humberto Madrid, por tu gran amistad y por haberme invitado a formar parte de este grupo.

Un lugar especial lo ocupan l@s del Instituto de Geofísica; gracias a toditos@, a los que siempre preguntaron: ¿cómo vas? o, ¿para cuándo? Y también a los que dijeron: “no dejes de avisarme” o, “invítame a la fiesta”.

Además, fue importante contar con el afecto y la solidaridad de la familia extensa: tíos, tías, primas, primos sobrinas, sobrinos. Les doy las gracias a todos: a los que ya se despidieron, a los que están lejos, a los que veo cada año y a aquellos con quienes convivo más de cerca.

Con cariño para:

Mi madre, mi hermano, la memoria de mi padre, el
recuerdo de mi hermana, Héctor Iván, Roberto
Jesús, y Emiliano.

No pretendas apagar con fuego un incendio, ni remediar con agua una inundación.

Confucio

Cuando trates con el agua consulta primero la práctica, y luego la teoría.

Leonardo da Vinci

Lo que sabemos es una gota de agua; lo que ignoramos es el océano.

Isaac Newton

La paciencia es la fortaleza del débil y la impaciencia, la debilidad del fuerte.

Immanuel Kant

ÍNDICE

RESUMEN	viii
1. ANTECEDENTES	1
1.1. Importancia del agua subterránea	2
1.2. Contaminación del agua subterránea por hidrocarburos	6
1.3. Restauración de sitios contaminados	10
1.4. Simulación de fenómenos de transporte	15
1.5. Objetivos	23
1.6. Contenido	25
2. MODELO MATEMÁTICO	27
2.1. Ecuaciones de balance	28
2.2. Advección	43
2.3. Comportamiento de la fase NAPL	49
2.4. Comportamiento de la fase gas	55
2.5. Saturación y presión capilar	59
2.6. Escalamiento de la presión capilar	72
2.7. Propiedades físicas: viscosidad y densidad	74
2.8. Difusión	77
2.9. Transferencia de masa	81
2.10. Degradación biológica	87
2.11. Condiciones iniciales y de frontera	92
3. FORMULACIÓN SECUENCIAL	95
3.1. Flujo fraccional	96
3.2. Algoritmo secuencial	104
3.3. Condiciones de frontera	106

4. APROXIMACIÓN NUMÉRICA	110
4.1. Introducción	111
4.2. Evolución en el tiempo: Esquema θ de separación de operadores	115
4.3. Tratamiento de términos no lineales: Linealización de Picard	120
4.4. Discretización en el espacio: Colocación Trefftz-Herrera	121
4.5. Construcción de las funciones de peso	129
4.6. Solución del sistema de ecuaciones algebraicas	137
5. EJEMPLOS NUMÉRICOS	142
5.1. Transporte en el estado estacionario	143
5.2. Tratamiento de términos fuente	152
5.3. Tratamiento de coeficientes discontinuos	155
5.4. Transporte de una especie en una fase	157
5.5. Algoritmo tipo Runge-Kutta	166
5.6. Transporte de dos especies en una fase	170
5.7. Sistema de ecuaciones de flujo	177
5.8. Sistema completo	184
CONCLUSIONES	189
BIBLIOGRAFÍA	193

RESUMEN

En este trabajo se presenta un modelo matemático y numérico para simular el desplazamiento vertical de hidrocarburos biodegradables en el subsuelo. En la formulación del modelo matemático se tomaron en cuenta procesos físicos, químicos y biológicos que afectan de manera significativa el transporte de contaminantes. El modelo que así se obtuvo está formado por un sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineales acopladas y una serie de ecuaciones constitutivas.

Las variables independientes o primarias se definieron mediante un algoritmo secuencial que da la posibilidad de actualizar sólo una de las variables en cada iteración. Para la solución del sistema de ecuaciones resultantes, se desarrolló una aproximación numérica que consiste en la aplicación del método de colocación Trefftz-Herrera para discretizar las derivadas en el espacio. Los términos dependientes del tiempo se aproximaron con el método de diferencias hacia atrás, completamente implícito. Además, se aplicó el esquema Θ de descomposición de operadores con el fin de desacoplar los términos de reacción en las ecuaciones de transporte, así como para evitar matrices rígidas. Para el tratamiento de términos no lineales se utilizó iteración de Picard.

Con el propósito de evaluar el procedimiento, se resolvieron problemas simplificados; se compararon los resultados obtenidos tanto con soluciones analíticas conocidas como con los métodos de diferencias finitas y elemento finito. Se pudo observar que éste presenta ventajas en comparación con metodologías convencionales. Finalmente, se desarrolló el algoritmo para ver el desempeño del método propuesto en la aproximación del modelo completo. Las simulaciones numéricas son consistentes con el comportamiento que puede esperarse experimentalmente.

CAPÍTULO 1

ANTECEDENTES

1.1 IMPORTANCIA DEL AGUA SUBTERRÁNEA

El agua subterránea es un recurso primordial para satisfacer las necesidades generadas en la producción y el consumo. De acuerdo con las Estadísticas del Agua 2007 elaboradas por la Comisión Nacional del Agua (Comisión Nacional del Agua, 2007), en México se utilizan anualmente 28.3 miles de millones de m³ cúbicos de aguas subterráneas con fines agrícolas, industriales y domésticos; la disponibilidad de agua per capita es de 4416 m³ al año. De acuerdo con este indicador, México se ubica en el lugar 90 a nivel mundial. Según esta misma fuente, de los 635 acuíferos del país, 104 se encuentran sobreexplotados y de éstos se extrae el 60% del agua que se consume a nivel nacional.

Para la explotación sustentable del agua subterránea, se requiere el conocimiento de aspectos relacionados con la cantidad, tales como: los efectos de la extracción de agua en el ciclo hidrológico y en el sistema hidrológico regional, los efectos producidos por el bombeo, como la ocurrencia de hundimientos diferenciales y el abatimiento de niveles freáticos (Freeze y Cherry, 1979). Esto permite estimar la cantidad de agua disponible en el corto y mediano plazos. Sin embargo, para que este recurso sea aprovechable, se requiere además que cumpla con las normas de calidad asociadas a su uso (agrícola, pecuario, industrial, municipal, etc.).

Si bien, la calidad del agua subterránea puede ser no apta para determinados usos como resultado de procesos naturales, tales como la intrusión salina, la disolución de compuestos tóxicos presentes en el medio natural y la desintegración radioactiva de isótopos inestables, cada vez, con mayor frecuencia, está sujeta a procesos de contaminación de origen antropogénico debido a diversas causas entre las que destacan: el patrón de crecimiento de las grandes concentraciones urbanas, las tecnologías empleadas en la producción primaria y las formas de disposición de residuos derivados de las actividades productivas.

En décadas recientes, la calidad del agua ha sido uno de los temas centrales de investigación en aguas subterráneas. Ésta se ha orientado tanto a la caracterización hidrogeológica de sitios contaminados, así como a la definición y predicción de la forma en que se distribuyen los contaminantes una vez que han ingresado al subsuelo, ya sea disueltos en el agua o en algún otro fluido.

De los problemas de contaminación del agua subterránea que preocupan en la actualidad están los relacionados con el ingreso de fases no miscibles en el subsuelo. El término que se utiliza para distinguir una fase líquida distinta del agua es 'NAPL' (acrónimo que deriva de las iniciales empleadas en el idioma inglés: 'Non-Aqueous Phase Liquid'). Si bien, esta clase de fluidos están formados por fases que no se mezclan, uno o más de sus componentes si pueden disolverse y contaminar el agua. Si los compuestos son orgánicos su solubilidad es muy baja; sin embargo, aun en pequeñas concentraciones generalmente, son tóxicos. Una

de sus características más importantes es que debido a la baja solubilidad de sus componentes, pequeñas cantidades pueden contaminar grandes volúmenes de agua del subsuelo por periodos de tiempo largos.

En el caso de los hidrocarburos, se citan suelos y acuíferos contaminados con productos derivados del petróleo cuyas fuentes se localizan en fugas de tanques de almacenamiento y en derrames accidentales. También hay derrames crónicos en refinerías, en el transporte interno y en aguas de proceso. En producción primaria de petróleo, los problemas de contaminación se generan por actividades en baterías de separación, plantas de deshidratación, presas de pozos y fugas accidentales por rotura de líneas.

En México, aun cuando no existe una cuantificación exacta del problema y no se conoce con detalle la distribución de los contaminantes principales, se tienen algunos datos relevantes. Según estadísticas elaboradas por la Procuraduría Federal de Protección al Ambiente (Profepa), el mayor número de emergencias ambientales con afectación a suelos son las ocasionadas por derrames de hidrocarburos (Profepa, 1999). Durante 1994, esta dependencia recibió el reporte de 88 fugas de hidrocarburos en el Estado de Tabasco. Por éstas se afectaron 52,187 m² de pastizales, 30,626 m² de zonas pantanosas y 200 m² de superficies acuáticas. De las fugas reportadas sólo se atendieron 35. En 1995, se estimó que Petróleos Mexicanos (PEMEX) debería invertir alrededor de 40,000 millones de dólares para limpiar suelos, lagunas y litorales (González y

Quintero, 1995). En 1998, se registraron un total de 538 emergencias ambientales con afectación a suelos, de las cuales 492 ocurrieron en la transportación de productos; 96 se suscitaron en la industria y el resto en otro tipo de sitios; 423 de los eventos fueron derrames; 280 de éstos fueron responsabilidad de PEMEX y 243 de empresas privadas (Profepa, 1999). De acuerdo con datos de la Profepa, de las emergencias ambientales reportadas en el periodo 1993-2002, el 85% fueron derrames. Del total de emergencias, el 94% ocurrieron en medio terrestre. En ese mismo periodo, el 53% de las emergencias se presentaron en Tabasco, Veracruz, Campeche, Guanajuato y Chiapas.

En la actualidad, buena parte de los estudios relacionados con la calidad del agua subterránea se ha orientado hacia el desarrollo, investigación y análisis de técnicas de 'remediación'. Es decir, a los procedimientos para limpiar y restaurar sitios ya contaminados. En este contexto, la modelación matemática y computacional es una herramienta valiosa no sólo para diagnosticar y predecir la evolución de plumas contaminantes, sino también para el diseño y evaluación de estrategias de remediación.

1.2 CONTAMINACIÓN DEL AGUA SUBTERRÁNEA POR HIDROCARBUROS.

La migración en el subsuelo de fases no miscibles y sus componentes está determinada por procesos hidrodinámicos, de transferencia de masa y en su caso de biodegradación. El flujo está controlado por la existencia de gradientes de densidad y presión que hacen que el flujo se dirija de las zonas de mayor a las de menor potencial. Durante el desplazamiento del fluido, se establecen relaciones complejas entre las fases que lo componen y entre éstas y el medio poroso, que es la fase sólida. El patrón de migración depende de diversos factores entre los que cabe mencionar: las propiedades físicas del fluido, la interacción físico-química con otras fases, el grado de saturación del medio por cada una de las fases y las propiedades del medio. Así por ejemplo, la geometría de la pluma contaminante es más complicada en medios heterogéneos, en donde los contrastes en permeabilidad dan lugar a la formación de patrones irregulares en el desplazamiento vertical y horizontal de hidrocarburos.

Como las fases coexisten en el medio poroso, se produce una tensión interfacial en la superficie de contacto, mediante ésta se define la tensión de adhesión, que es una medida de la afinidad de cada fase por el medio sólido. De esto resulta que una de las fases fluidas tiene mayor afinidad por la fase sólida y se conoce como la fase más 'humedeciente'. También, debido a esta tensión de adhesión, cierta cantidad de fluido prácticamente inmóvil, queda retenida en el medio poroso, es la saturación residual. En el caso de fases no miscibles, ésta constituye una fuente permanente de contaminación del agua subterránea.

Como el ángulo de contacto entre el fluido y el medio sólido depende de la dirección del desplazamiento, el valor de propiedades como la presión capilar y la permeabilidad relativa dependen de la dirección del desplazamiento; es decir, no se definen de manera única y se presenta histéresis en las curvas que describen la relación presión capilar-saturación (modelos S-P) y permeabilidad relativa-saturación (modelos K-S). Estas relaciones se han determinado de manera experimental y la mayor parte del trabajo se ha realizado para sistemas de dos fases (Aziz y Settari, 1979, Guarnaccia et al., 1995). Existen diferentes formas para cuantificarlas, pero no siempre se ha tomado en cuenta el fenómeno de histéresis; en algunos casos se ha tomado en cuenta -generalmente en sistemas de dos fases- para las curvas K-S y en otros para las S-P. En Guarnaccia et al., 1995, se considera histéresis en un sistema de tres fases.

Cuando las fases están en contacto, se producen una serie de reacciones químicas heterogéneas, las de interés en la simulación del transporte de contaminantes en el agua subterránea son la disolución de componentes de fluidos no miscibles en el agua y la adsorción de especies disueltas en la matriz sólida. En el caso de estas últimas, si la reacción procede en condiciones de equilibrio, su efecto consiste en retrasar la velocidad de migración del compuesto, por lo que es un factor adverso en condiciones de remediación por bombeo y tratamiento. Además, las componentes de la fase NAPL que tienen presiones de vapor mayores que los de la fase se volatilizan e ingresan en la fase gaseosa que

inicialmente está formada por aire a presión atmosférica. Éstos pueden ingresar a la atmósfera, ser adsorbidos en la matriz rocosa o bien disolverse en agua (Hughes et al., 1992). En este tipo de escenarios, para cuantificar apropiadamente la distribución de contaminantes en el subsuelo, es necesario definir al sistema formado por tres fases fluidas: agua, gas y 'NAPL'. En la fase gaseosa, el principal mecanismo de transporte hidrodinámico de los compuestos orgánicos volátiles – 'VOCs'- (por sus iniciales en el idioma inglés: 'Volatile Organic Compounds') es la difusión. Una vez que se han disuelto en el agua los mecanismos de transporte hidrodinámico son la advección y la difusión.

Diversos estudios experimentales que se han llevado a cabo en sitios contaminados por hidrocarburos, muestran que pueden ocurrir procesos de degradación biológica de manera natural (Chapelle, 1998; Testa y Winegardner, 1992). Mediante éstos, algunos compuestos tóxicos, en especial, cierta clase de hidrocarburos, pueden ser transformados en productos inocuos, de aquí su importancia en el diseño de procedimientos de remediación. Aunque no se puede definir a priori cuales compuestos son biodegradables y su tasa de biodegradación, se tiene evidencia experimental de que la susceptibilidad de los hidrocarburos para ser biodegradados depende de su estructura (Testa y Winegardner, 1992) y se cuenta con valores de tasas de degradación que han sido obtenidos en experimentos controlados para una gama relativamente amplia de compuestos (ver apéndices en Knox et al., 1993). Sin embargo, no siempre son representativos de lo que sucede en condiciones de campo pues estos procesos

pueden verse limitados porque las condiciones en que ocurren son muy variables y dependen de diversos factores ambientales, entre los que cabe mencionar: el pH del agua, la presencia de compuestos tóxicos para los microorganismos, la ausencia de otros microorganismos asociados al proceso, la salinidad del sistema, etc. Se ha mostrado que la degradación biológica de compuestos puede ocurrir en cualquiera de las fases involucradas (Chapelle, 1993), sin embargo, en investigaciones relacionadas con la contaminación del agua subterránea, interesan principalmente las que se presentan en agua. En esta última, los microorganismos están asociados a reacciones de óxido-reducción y de hidrólisis-sustitución. Las reacciones son catalizadas debido a que los microorganismos permiten que la reacción proceda con mayor rapidez aunque no influyen en el sentido termodinámico, es decir, sobre la ocurrencia o la dirección en que proceden.

1.3 RESTAURACIÓN DE SITIOS CONTAMINADOS

El propósito de una estrategia de 'remediación' es modificar la calidad del agua subterránea que ha sido contaminada, para que cumpla con las características definidas por el uso a que se destine (municipal, agrícola, pecuario, industrial, etc.). De aquí se desprenden las metas de un esquema de restauración. Generalmente, en la estrategia global se incluyen procedimientos de control y limpieza o tratamiento. Los primeros se establecen con el propósito de detener el avance de la pluma contaminante, mientras que los segundos están orientados a remover los contaminantes para mejorar la calidad del agua. Existen diversos procedimientos de estabilización y remediación. Dentro del primer grupo se pueden mencionar los siguientes: barreras de aislamiento, control hidráulico, excavación, estabilización de suelos, etc. Ejemplos del segundo son: extracción de vapor de suelo, lixiviación, vitrificación, bombeo y tratamiento, y biorremediación. Cabe señalar que en la restauración de sitios contaminados por hidrocarburos y en general por fases no miscibles, uno de los factores clave es la remoción de la saturación residual.

Cuando iniciaron los programas de restauración de acuíferos, la técnica de bombeo y tratamiento fue la más utilizada y está bien documentada. De acuerdo con estudios llevados a cabo para evaluar su eficiencia (Lucia, 1996; Ostrom et al., 2005, Schmelling, 1992) se ha observado que:

- Ha sido poco efectiva para restaurar sitios contaminados en términos de los objetivos planteados inicialmente.

- Es apropiada para el control hidráulico de la pluma contaminante, es decir para evitar que se extienda el área contaminada.
- Es eficiente para remover grandes volúmenes de contaminantes al inicio de la operación. Sin embargo, esta eficiencia decrece con el tiempo.
- Es ineficiente para restaurar la calidad del agua en suelos y acuíferos contaminados por hidrocarburos debido a la persistencia de hidrocarburos inmóviles y a que los compuestos orgánicos pueden estar fuertemente adsorbidos.

Como alternativa, se desarrolló la técnica de 'bombeo y tratamiento mejorado' que consiste en la adición de surfactantes o cosolventes para aumentar la movilidad de contaminantes. En el primer caso se reduce la tensión interfacial de la fase orgánica; y en el segundo, se incrementa la solubilidad y se reduce con ello la tasa de adsorción. Sin embargo, se tiene el inconveniente de que los compuestos que actúan como cosolventes o surfactantes pueden ser tóxicos, por lo que se requiere del diseño de sistemas adecuados para la disposición adecuada de estos productos.

La evidencia de que cierto tipo de microorganismos pueden intervenir en la degradación de compuestos tóxicos, ha motivado la investigación de bioprocesos. La estimulación de la actividad biológica por medio de inyección de agua enriquecida con compuestos que la favorecen -bioestimulantes-, se ha ido constituyendo en una estrategia de remediación potencialmente más atractiva que

la de bombeo y tratamiento (Knox et al., 1993; Testa y Winegardner, 1992; National Research Council, 1990). De hecho, en algunos sitios contaminados por derivados del petróleo, el proceso de biodegradación ha ocurrido en forma natural, lográndose la restauración permanente del acuífero (Cherry, 1995). Siendo el petróleo y sus componentes principales susceptibles de ser biodegradados, existe interés industrial y de investigación por generar tecnologías capaces de restaurar sitios afectados por derrames de crudo o de otros petroquímicos contaminantes. No obstante, se ha llamado la atención sobre la necesidad de analizar y cuantificar factores de riesgo asociados a éstas. Por ejemplo, las bacterias en el agua incrementan el transporte de contaminantes hidrófobos; además, existe la posibilidad de que migren virus o bacterias patógenas y lleguen a la zona de descarga, con riesgo de contaminar el agua potable (Lindqvist et al., 1994).

Existen numerosas formas en las que se pueden aplicar técnicas de biorremediación, éstas varían desde procedimientos in situ hasta transportar el suelo contaminado a un reactor y ahí proceder a la biodegradación. El método más simple es la técnica de cultivar el suelo (biolabranza). La experiencia ha mostrado que esta técnica es eficiente para remover hidrocarburos aromáticos (González y Quintero, 1995, Oostrom et al., 2005). Otra de las técnicas in situ utiliza las aguas subterráneas como un medio para la adición de oxígeno, nutrientes y organismos para estimular la biodegradación de los contaminantes. Este método puede ser usado para suelos arenosos contaminados con compuestos oleosos y aromáticos. En general, los procedimientos de

biorremediación tienen diversas ventajas. Por ejemplo: son relativamente rápidos una vez que se ha superado la etapa de aclimatación, su costo es bajo en comparación con otros procedimientos y no tienen el problema de disposición final de productos.

En un escenario de contaminación donde exista la presencia de compuestos orgánicos volátiles –VOCs-, como ocurre en derrames de gasolinas, las técnicas antes mencionadas no son suficientes para la restauración apropiada del sitio puesto que no actúan sobre los componentes volátiles presentes en la fase gaseosa. Para esta clase de compuestos se han desarrollado técnicas específicas, como la extracción de vapor o ventilación de suelo. Estos procedimientos están indicados para remover compuestos volátiles de la zona no saturada. La extracción de vapor se lleva a cabo pasando volúmenes de aire con el fin de que los compuestos sean transportados a la superficie. Mediante estas técnicas es posible tratar los derrames accidentales antes que los compuestos tóxicos alcancen el nivel freático. Cuando estos sistemas operan en forma adecuada puede ser una técnica efectiva y de bajo costo para suelos contaminados por gasolinas.

Otro procedimiento atractivo es la combinación de técnicas. Se ha observado que esta forma de proceder tiene ventajas. Por ejemplo, se ha mostrado que la ventilación de suelos favorece procesos de biodegradación porque se induce la circulación de aire (Testa y Winegardner, 1992, Oostrom et

al., 2005). El "American Petroleum Institute" (API) recomienda la aplicación de la técnica de bombeo y tratamiento combinada con biodegradación ya que el primer procedimiento favorece la eficiencia del segundo (Lucia, 1996). Una descripción más detallada sobre técnicas de remediación puede verse en Oostrom et al. (2005).

1.4 SIMULACIÓN DE FENÓMENOS DE TRANSPORTE.

Cuando ingresan hidrocarburos al subsuelo ocurren fenómenos de transporte de masa en fluidos multifásicos en medios porosos que se simulan por sistemas de ecuaciones diferenciales parciales acopladas y no lineales. El tamaño del sistema depende del número de fases y compuestos que intervienen en el proceso global, así como del tipo de ecuaciones constitutivas que se utilicen para representar procesos de transferencia de masa y/o de biodegradación.

Las hipótesis que contienen las ecuaciones constitutivas que se emplean con mayor frecuencia, aún están sujetas a investigación y validación experimental. Como ejemplos se pueden citar:

- Las relaciones que entre tres fases tienen, la permeabilidad relativa, la saturación y la presión capilar. Incluyendo funciones dependientes de la trayectoria del flujo (histéresis), entrapamiento de fluidos y su dependencia con respecto a las propiedades del fluido y el medio poroso.
- Las ecuaciones usadas para cuantificar la transferencia de masa entre fases (adsorción, disolución y volatilización). La hipótesis de equilibrio químico, no es apropiada para ciertos escenarios, por ejemplo, éste difícilmente se alcanza, en medios heterogéneos y/o en condiciones de remediación por bombeo y tratamiento (Rusell, 1995).
- Las relaciones utilizadas para cuantificar procesos bióticos. La forma más sencilla de representación es introducir un coeficiente de decaimiento de primer orden. Sin embargo, esta forma de hacerlo tiene el inconveniente de que este

término puede jugar el papel de parámetro de ajuste en el modelo. Además, no toma en cuenta la dinámica de la biomasa, así como la cinética de las reacciones químicas involucradas (Kinzelbach et al., 1991).

Los modelos de flujo y transporte describen la distribución de fases y contaminantes en el subsuelo. Están formados por una o más ecuaciones diferenciales parciales, de tipo parabólico, que se obtienen al derivar el balance de masa de cada una de las componentes y de las fases que intervienen en el proceso. Sólo para los problemas más sencillos existen soluciones analíticas. Por ejemplo, para el transporte unidimensional conservativo de una sola especie, en una sola fase y en un medio homogéneo e isotrópico. Para resolver problemas complejos, que son los de mayor interés práctico, es necesario utilizar procedimientos numéricos. Diversos aspectos han motivado la investigación y el desarrollo de métodos para obtener la aproximación numérica de este tipo de problemas, entre los que cabe mencionar:

El comportamiento de la ecuación. En el caso del transporte, la ecuación es parabólica, pero si domina el término advectivo, se producen frentes y cambia la naturaleza de la ecuación. Ésta se vuelve cuasi-hiperbólica o parabólica degenerada. Debido a esto, cuando se discretizan las ecuaciones diferenciales por procedimientos convencionales tales como diferencias finitas y elemento finito, aun con esquemas en el tiempo completamente implícitos, la solución numérica produce una combinación de oscilaciones espurias y suavizamiento en la vecindad

del frente (Gray y Pinder, 1976). Un comportamiento similar se observa en la ecuación de flujo, cuando éste último ocurre en sistemas de varias fases.

Solución de sistemas acoplados. Con excepción de los esquemas explícitos en el tiempo, en donde las ecuaciones se resuelven en forma directa con severas restricciones de estabilidad, el hecho de que las ecuaciones diferenciales estén acopladas en los términos de reacción (sistemas multicomponentes) y/o en los de saturación (sistemas multifásicos), conduce a sistemas grandes de ecuaciones algebraicas. El tamaño y el ancho de banda de la matriz dependen del número de nodos y del número de fases y componentes considerados. El número de veces que se resuelve el sistema depende del tamaño del paso en el tiempo. Por esto se requiere de métodos de solución -directos o iterativos- eficientes.

Solución de sistemas no lineales. Las ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte de masa en sistemas de varias fases son altamente no lineales en los términos de saturación. Adicionalmente pueden encontrarse no linealidades en los términos de reacción y en las condiciones de frontera (Huyakorn y Pinder, 1983; Aziz y Settari, 1979). Por esto, es necesario emplear algún método de linealización como el de Newton-Raphson o Picard (Huyakorn y Pinder; 1983), lo que intensifica la cantidad de cómputo requerida.

Para el tratamiento numérico de esta clase de problemas, antes de discretizar las ecuaciones diferenciales, es necesario definir las variables – primarias- para las que se resolverá el sistema de ecuaciones diferenciales

parciales. Esto implica una reformulación del sistema de ecuaciones original mediante el uso de ecuaciones constitutivas y restricciones internas.

En ingeniería petrolera, donde se inició el tratamiento de esta clase de problemas, se desarrollaron las formulaciones IMPES ('Implicit Pressure, Explicit Saturation') y SS ('Simultaneous Solution'). Uno de los inconvenientes del primer enfoque es que, como la saturación se aproxima mediante un esquema explícito, la estabilidad de la aproximación numérica está condicionada por el tamaño de paso en el tiempo (Huyakorn y Pinder; 1983). Mientras que en el segundo, como la aproximación de las ecuaciones es simultánea, al aumentar el número de ecuaciones -que es el caso de los modelos de transporte en sistemas de varias fases y componentes- aumentan el tamaño y el ancho de banda de las matrices resultantes, con esto se incrementa el número de operaciones necesarias para resolver los sistemas. Otra opción es utilizar un procedimiento secuencial, éste consiste en desarrollar una formulación en términos del flujo fraccional para desacoplar las ecuaciones de flujo, resolverlas en forma iterativa con esquemas en el tiempo completamente implícitos y después resolver las ecuaciones de transporte (ver Guarnaccia et al., 1995 y Reeves y Abriola, 1994). Este procedimiento es atractivo ya que facilita la programación, tiene el potencial de procesarse en paralelo (Guarnaccia et al., 1995), y es más flexible en cuanto a la definición del número de fases y componentes que intervienen en el proceso.

Los modelos matemáticos y numéricos de flujo y transporte de masa son una herramienta que en el diseño de estrategias de remediación coadyuva a:

Estimar la distribución de contaminantes. Tanto en el espacio como su evolución en el tiempo, dadas la caracterización hidrogeológica del sitio, las propiedades físico-químicas de los compuestos, así como la ubicación y aportación de las fuentes.

Estimar el efecto de acciones de remediación. Cuando ya se ha optado por alguna estrategia de remediación, de acuerdo con sus características y condiciones de operación se puede evaluar la efectividad de la técnica o técnicas que se utilicen (Ellerd et al., 1999; Fischer et al., 1996; Johnson et al., 1990; Oya y Valocchi, 1997; van der Ham y Bowers, 1998; Berglund, 1997; Rauber et al., 1998). Esta clase de estudios puede llevarse a cabo con datos de campo y/o de laboratorio. Inclusive, con propósitos de análisis, en algunos pueden plantearse escenarios hipotéticos. También es posible llevar a cabo análisis de sensibilidad en los que, mediante la variación de parámetros se puede observar la influencia de diversos factores, como las heterogeneidades del medio (Wadell y Parker, 1997), la conductividad hidráulica (Berglund, 1997), etc.

Estimar el tiempo de restauración y/o la cantidad de contaminantes removida. Para este fin, además de las ecuaciones de flujo y transporte, se han utilizado modelos que no requieren el uso intensivo de cómputo con el fin de hacer estimaciones gruesas de los resultados finales (Christ et al., 2006, Johnson et al., 1990; Herrling et al., 1992; Schmelling, 1992; Oostrom et al., 2005, Oya y

Valocchi, 1997). Con este propósito se han utilizado datos de laboratorio, de campo o escenarios hipotéticos.

Diseñar la operación del sistema. Se definen las condiciones de operación una vez que se ha seleccionado el, o los procedimientos de remediación. Por ejemplo, en el caso del bombeo y tratamiento esto incluye, la ubicación de pozos de extracción e inyección así como la definición de las tasas de operación. Al respecto existen dos formas de proceder. La primera es por ensayo y error. Es decir, se plantean opciones, se introducen los datos asociados a cada una de éstos, se simulan por separado y se selecciona la que ofrezca mejores resultados (Gorelick, 1993). Sin embargo, no se evalúan todas las opciones o combinaciones posibles, por lo tanto, no se sabe si se ha seleccionado la óptima. Esta forma de hacerlo tiene la ventaja de que no tiene muchos requerimientos de cómputo. La segunda estrategia consiste en plantear un problema de optimización combinatoria. En este caso, se define una función objetivo que maximiza o minimiza a una de las variables, que por lo general está asociada al costo económico (por ejemplo: número de pozos, tasas de bombeo, etc.) y se establecen un conjunto de restricciones en donde se incluyen las ecuaciones de flujo y transporte. Otro tipo de restricciones son las asociadas al riesgo de cada técnica o bien a la normatividad legal (Gorelick et al., 1993). Esta forma de proceder tiene la ventaja de que se puede encontrar la configuración 'óptima'. Sin embargo es muy intensiva en cómputo (ver por ejemplo: Minsker y Shoemaker, 1998; Rizzo y Dougherty, 1996; Sawyer et al., 1995; Sun et al., 1996; Ahlfeld et al., 1988). En parte, esto se debe a que los modelos de flujo y transporte se tienen

que procesar muchas veces hasta encontrar los parámetros que optimicen el sistema. De aquí la importancia de contar con procedimientos numéricos cuando menos, eficientes.

Seleccionar técnicas de remediación. Al igual que en el caso anterior puede hacerse por tanteos o bien, en combinación con modelos de optimización.

Naturalmente, este tipo de análisis debe realizarse a priori con el fin de tomar toda la ventaja posible de la información que proporciona la simulación. La confiabilidad de los resultados depende de varios factores, entre los que destacan: el grado de precisión del modelo y la calidad de los datos relacionados con la caracterización hidrogeológica del sitio contaminado. Se han desarrollado procedimientos para calcular la incertidumbre de los resultados asociada a los datos disponibles (McNab y Dooker, 1998; Minsker y Shoemaker, 1998; Rauber et al., 1998).

Pese a que se cuestione el valor de los modelos matemáticos, éstos constituyen la mejor herramienta para integrar y procesar la información cuantitativa disponible. En muchos casos, los resultados de la simulación han sido satisfactorios en cuanto al ajuste con datos experimentales. Por esto, en algunos trabajos se sugiere el uso y/o desarrollo de modelos para la evaluación tanto de nuevas tecnologías como de las ya conocidas (Knox, et al., 1997; Sabatini, et al., 1997; Oya y Valocchi, 1998; Francois et al., 1992; Herrera, 1994, entre otros). Por ejemplo, Sabatini et al. (1997) experimentalmente encontraron que debe haber un

óptimo en la relación extracción-inyección en procedimientos de remediación con uso de surfactantes. Plantean que éste debe de determinarse en cada sitio y haciendo uso de algún modelo matemático.

De lo hasta aquí expuesto puede concluirse que el potencial de un modelo para utilizarse como herramienta en el diseño de estrategias de remediación depende de:

1. El grado de precisión, asociado al tipo de ecuaciones constitutivas usadas, al orden del error del procedimiento numérico y a los errores de redondeo,
2. El tipo de ecuaciones constitutivas usadas para cuantificar fenómenos de interés en condiciones de 'remediación'.
3. La eficiencia de su procesamiento.

Adicionalmente, es deseable que sea robusto. Es decir, que pueda aplicarse a una gama -lo más amplia posible- de escenarios. En especial, para el problema que nos ocupa, interesa que la solución sea adecuada para el transporte en el que la advección es significativa y/o que admita diversos escenarios de biodegradación.

1.5 OBJETIVOS

El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo matemático y numérico para simular el transporte de hidrocarburos y sus componentes en el agua subterránea y el subsuelo. Se pretende que éste sea una herramienta tanto para definir y predecir la evolución de plumas contaminantes, así como para diseñar estrategias de biorrestauración de acuíferos contaminados por esta clase compuestos. De este objetivo general se desprenden los siguientes objetivos particulares:

1. Formular un modelo matemático que tome en cuenta procesos que son de especial importancia en el transporte de contaminantes y en el diseño de estrategias de biorrestauración. En especial se considerará el balance de masa de compuestos que intervienen en la secuencia de transformaciones.
2. Desarrollar un procedimiento numérico eficiente para resolver el sistema de ecuaciones de balance.

Para alcanzar los objetivos planteados en la formulación y desarrollo del modelo:

1. Se incluyen ecuaciones constitutivas para cuantificar la transferencia de masa en condiciones de cinética y/o equilibrio químico.
2. Se representan procesos de degradación biológica con una cinética no lineal.
3. Para definir las variables primarias en las ecuaciones de flujo se utiliza el enfoque de flujo fraccional.

4. Se desarrolla la solución secuencial del sistema de ecuaciones diferenciales parciales.
5. Se discretizan las derivadas espaciales del sistema de ecuaciones diferenciales parciales utilizando el método de colocación Trefftz-Herrera.
6. Se utiliza el esquema Θ de descomposición de operadores.
7. Se desarrollan los algoritmos necesarios para resolver el sistema de ecuaciones resultante.

En cuanto al desarrollo de la aproximación numérica del modelo propuesto:

1. Los algoritmos correspondientes se formularon en una dimensión espacial.
2. En los experimentos numéricos se privilegia el uso de datos y parámetros reportados en la literatura especializada y obtenidos en la escala local, es decir, en laboratorio.
3. Se evalúa el potencial del modelo como herramienta en el diseño de estrategias de remediación en términos de su eficiencia y grado de precisión. No se desarrolla el problema de optimización.
4. Los algoritmos se realizarán en un ambiente de programación Matlab, aprovechando los recursos disponibles en este paquete para inversión de matrices, cálculo de normas, etc.

1.6 CONTENIDO

En el capítulo dos se presenta la derivación del modelo matemático, en donde se emplea un enfoque composicional, es decir, formulando el balance de masa de cada componente en cada una de las fases consideradas. En particular, se obtuvieron definiendo las propiedades intensivas, los flujos a través de la frontera y las fuentes y sumideros asociadas a cada fase y componente. En seguida, se describen las ecuaciones constitutivas que habrán de utilizarse. Al final se presenta la tipología de condiciones iniciales y de frontera posibles, identificando el escenario físico a que corresponden.

En el capítulo tres, se expone la reformulación del sistema de ecuaciones diferenciales parciales en términos del flujo fraccional, se definen las variables primarias y se presenta el algoritmo secuencial que permite desacoplar el sistema de ecuaciones en cada paso en el tiempo. Una vez que se han definido las variables primarias, se describen las formas posibles que pueden tomar las condiciones de frontera y en su caso, el tratamiento que se les aplicará.

En el capítulo cuatro se presenta el desarrollo de la formulación numérica. Se describen el método de colocación Trefftz-Herrera, se presenta la discretización de las variables en el tiempo, así como la forma en que se realiza la descomposición de operadores usando el esquema θ .

En el capítulo cinco se describen los experimentos numéricos y se muestran los resultados obtenidos. Para analizar las propiedades de la solución numérica propuesta, ésta primero se aplicó a problemas sencillos cuya solución analítica se conoce. Posteriormente se presenta el desarrollo del esquema numérico para problemas más complicados.

Finalmente, en el último capítulo, se presentan las conclusiones del trabajo. Se pone especial énfasis en las implicaciones y la viabilidad que tiene la extensión de este algoritmo a problemas de dos o tres dimensiones.

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO

2.1 ECUACIONES DE BALANCE

Uno de los planteamientos centrales de la mecánica de medios continuos es que: si se analiza el valor de alguna propiedad en un volumen de referencia y se observa que existe un volumen mínimo para el que tienen sentido los promedios estadísticos, es razonable suponer que su comportamiento es el de un continuo (Bear, 1979; Herrera y Allen, 1986; Allen et al., 1987). Este hecho es de importancia ya que permite el tratamiento a nivel macroscópico de procesos que ocurren en la escala microscópica, lo que es conveniente desde el punto de vista matemático. En la modelación de procesos de flujo y transporte de masa en acuíferos se ha justificado la derivación de las ecuaciones partiendo de los postulados de la mecánica de medios continuos toda vez que, la escala significativa para el análisis es de tipo macroscópico y en este sentido: *para cualquier propiedad analizada, el volumen es de magnitud tal, que tienen sentido los promedios estadísticos* (Bear, 1979).

En la teoría del continuo, para la descripción del movimiento se hace uso de dos tipos de propiedades: las intensivas y las extensivas (Herrera y Allen, 1986; Allen et al., 1987). Una propiedad intensiva definida para cada tiempo y cada partícula se caracteriza porque no depende de la masa o volumen del cuerpo en que está contenida. En cambio, las propiedades extensivas si dependen del tamaño o masa del sistema. Como ejemplos de las primeras se citan la temperatura, la densidad y el potencial químico; y entre las segundas se pueden citar el volumen y la cantidad de calor.

Para definir la representación matemática de alguna propiedad, considérese cualquier partícula X perteneciente al cuerpo B (Herrera y Allen, 1986; Allen et al., 1987), es decir

$$\underline{X} \in B$$

en cualquier tiempo t , ésta ocupa una posición en \mathbb{R}^3 , con lo que se define para cada t una función $\underline{p}(t)$

$$\underline{p}(t): B \rightarrow \mathbb{R}^3,$$

mientras que las coordenadas \underline{x} de la partícula en el tiempo t están dadas por

$$\underline{x} = \underline{p}(\underline{X}, t). \quad (2.1)$$

El valor de cualquier propiedad Π de una partícula en el tiempo t que se representa mediante $\varphi(\underline{X}, t)$, constituye la descripción Lagrangiana de la propiedad (Herrera y Allen, 1986; Allen et al., 1987). El valor de esa propiedad también puede definirse para cualquier punto \underline{x} en el tiempo t a través de $\psi(\underline{x}, t)$ y ésta es la descripción Euleriana de la propiedad Π . Así, cualquier propiedad intensiva puede ser representada en términos Eulerianos o Lagrangianos. De acuerdo con la ecuación (2.1) resulta claro que ambas están relacionadas por

$$\varphi(\underline{X}, t) = \psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t). \quad (2.2)$$

Uno de los conceptos centrales para la descripción del movimiento es la velocidad, cuya representación Lagrangiana es

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \underline{p}_t(\underline{X}, t) \quad (2.3)$$

Si $\underline{v}(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de la velocidad, haciendo uso de la ecuación (2.2) se tiene que

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \underline{v}(\underline{p}(\underline{X}, t), t). \quad (2.4)$$

Las derivadas de las representaciones Lagrangiana y Euleriana de cualquier propiedad con respecto al tiempo se denotan por $\varphi_t(\underline{X}, t)$ y $\psi_t(\underline{x}, t)$ respectivamente. Como en el caso de la velocidad, la relación entre ambas está dada por la ecuación (2.2). Si a esta relación se le aplica la regla de la cadena, el resultado es (Herrera y Allen, 1986)

$$\varphi_t(\underline{X}, t) = \psi_t(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \underline{p}_t(\underline{X}, t) \cdot \nabla \psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t). \quad (2.5)$$

A la derivada de la representación Lagrangiana también se le conoce como la derivada material; si se denota por $\frac{D\psi}{Dt}$ a su descripción Euleriana, de acuerdo con la ecuación (2.5) es evidente que

$$\frac{D\psi}{Dt}(\underline{x}, t) = \frac{\partial \psi}{\partial t}(\underline{x}, t) + \underline{v} \cdot \nabla \psi(\underline{x}, t). \quad (2.6)$$

En virtud de que una propiedad extensiva \hat{E} depende del volumen, se puede expresar como una integral sobre la propiedad intensiva $\psi(\underline{x}, t)$ que le corresponde, es decir:

$$\hat{E}(t) = \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (2.7)$$

en donde, $B(t)$ es la región de integración que depende del tiempo. Para conocer la evolución de esa propiedad en el tiempo se deriva (2.7) y el resultado es:

$$\hat{E}'(t) = \int_{B(t)} \psi_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.8)$$

en donde $\partial B(t)$ es la frontera de la región $B(t)$ y \underline{n} un vector normal. Aplicando el teorema de la divergencia al segundo miembro del lado derecho de la ecuación (2.8) se obtiene:

$$\hat{E}'(t) = \int_{B(t)} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \right\} d\underline{x}. \quad (2.9)$$

En mecánica de medios continuos, las leyes generales que gobiernan los procesos locales se expresan a través de balances. Desde el punto de vista físico, resulta claro que: *cualquier propiedad intensiva cambia en el tiempo ya sea porque se genere hacia el interior del cuerpo (fuentes o sumideros) o porque se importe por la frontera* (Herrera y Allen, 1986). Formalmente esto se expresa como

$$\hat{E}'(t) = \int_{B(t)} \hat{g}(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.10)$$

aplicando el teorema de la divergencia al segundo miembro del lado derecho de la ecuación (2.10), se obtiene

$$\hat{E}'(t) = \int_{B(t)} \{ \hat{g} + \nabla \cdot \underline{\tau} \} d\underline{x}. \quad (2.11)$$

En las ecuaciones (2.10) y (2.11), \hat{g} representa el suministro desde el exterior y $\underline{\tau}$ el flujo de ψ a través de la frontera. De igualar las integrales (2.9) y (2.11) y aplicando el lema de Dubois-Reymond, se obtiene

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) = \nabla \cdot \underline{\tau} + \hat{g} \quad (2.12)$$

que es la *ley general de balance local* (Herrera y Allen, 1986).

Para simular fenómenos de flujo y transporte de masa en el agua subterránea en sistemas de varias fases se utilizan modelos composicionales, formulados originalmente para resolver problemas en ingeniería petrolera. En éstos, es necesario definir el balance de masa de cada componente i , perteneciente a la fase α , por lo que conviene expresar la ecuación (2.12) de la siguiente manera

$$\frac{\partial \psi_i^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi_i^\alpha \underline{v}^\alpha) = \nabla \cdot \underline{\tau}_i^\alpha + \hat{g}_i^\alpha. \quad (2.13)$$

donde ψ_i^α es la propiedad intensiva asociada a la i ésima componente disuelta en la fase α ; \underline{v}^α la velocidad promedio de la fase α ; $\underline{\tau}_i^\alpha$ el flujo a través de la frontera de la componente i perteneciente a la fase α , y \hat{g}_i^α representa las fuentes y/o sumideros de la i ésima componente disuelta en la fase α .

Ahora bien, lo que distingue a una fase de una componente es que la primera tiene una velocidad característica, mientras que la segunda se mueve con la velocidad de la fase en la que está disuelta. En este trabajo, para representar el sistema físico que nos ocupa se toman en cuenta cuatro fases: Agua, Napl, Gas y Sólido. En lo sucesivo se utilizarán mayúsculas cuando se trate de la fase y minúsculas en el caso de las componentes. Así mismo, se usarán indistintamente

los términos Aceite, Napl y Orgánica, para la fase líquida no miscible. Para derivar las ecuaciones de balance, se considera que el flujo y transporte de masa tienen las siguientes características:

1. El proceso ocurre en condiciones isotérmicas.

2. La fase Napl

- es incompresible;
- está formada por una sola componente;
- hay disolución de especies en el agua; y
- hay volatilización de especies.

3. La fase Agua

- está formada por tres componentes: agua, especies disueltas de la fase Napl y un compuesto asociado a procesos de biodegradación (bioestimulante);
- hay volatilización de especies disueltas de la fase Napl; y
- hay biodegradación de especies disueltas de la fase no miscible;
- hay transferencia de masa de especies disueltas con la fase sólida (adsorción-desadsorción), y
- las propiedades físicas de la fase dependen de la concentración de especies disueltas de la fase Napl.

4. La fase Gas

- está formada por dos componentes: gas y especies de la fase Napl volatilizadas, y
- las propiedades físicas dependen de la concentración de especies disueltas de la fase Napl en esta fase.

5. La fase Sólida

- es inmóvil,

- es insoluble,
- es incompresible, y
- sus componentes son: napl y bioestimulante adsorbidos.

El transporte de vapor de agua puede afectar el transporte de contaminantes en la zona no saturada (Weisbrod et al., 2003). Sin embargo, en este trabajo no se toma en cuenta debido a que el proceso ocurre en condiciones isotérmicas, además de que no se está considerando que haya gradientes significativos debidos a la densidad de vapor. Cabe señalar que éste es significativo y necesariamente debe tomarse en cuenta en condiciones de restauración por el método de inyección de vapor. Por otra parte, el agua no se considera como componente de la fase sólida porque aun cuando esta sea retenida, puede ser reconectada y fluir, como se explica más adelante.

Tomando en cuenta lo anterior se identifican las siguientes componentes en cada una de las fases:

1. agua en Agua (w, W);
2. napl en Agua (n, W);
3. bioestimulante en Agua (b, W);
4. napl en la fase Napl (n, N);
5. napl en Gas (n, G);
6. gas en Gas (g, G);
7. napl en Sólido (n, S); y
8. bioestimulante en Sólido (b, S).

$(i, \alpha) = (w, W), (n, W), (b, W), (n, N), (n, G), (g, G), (n, S) \text{ y } (b, S).$

En la Tabla 2.1 se muestra en forma esquemática la composición de cada una de las fases que se están considerando. De manera consistente, en la derivación de las ecuaciones, se emplea la convención de utilizar minúsculas para los índices de las componentes y mayúsculas para los de las fases.

TABLA 2.1

COMPOSICIÓN DE FASE

COMPONENTE	agua	Napl	gas	bioestimulante
FASE				
Agua	X	X		X
Napl		X		
Gas		X	X	
Sólido		X		X

Para obtener las ecuaciones de balance de masa es necesario definir E_i^α , ψ_i^α , τ_i^α , \hat{g}_i^α para cada una de las componentes en las distintas fases y sustituir en la ecuación (2.13). El resumen de estas definiciones se encuentra en la Tabla 2.2

TABLA 2.2
DEFINICIONES

COMPONENTE	\hat{E}_i^α	ψ_i^α	τ_i^α	\hat{g}_i^α
agua en AGUA (w, W)	$\int_{B(t)} \phi S_w C_w^w d\underline{x}$	$\phi S_w C_w^w$	$\phi S_w \underline{J}^w$	$C_w^w Q^w + q_w^w$
napl en AGUA (n, W)	$\int_{B(t)} \phi S_w C_n^w d\underline{x}$	$\phi S_w C_n^w$	$\phi S_w \underline{J}^w$	$C_n^w Q^w + q_n^w$ $-\phi K_r^n$
bioestimulante en AGUA	$\int_{B(t)} \phi S_w C_b^w d\underline{x}$	$\phi S_w C_b^w$	$\phi S_w \underline{J}^w$	$C_b^w Q^w + q_b^w$ $-\phi K_r^b$
napl en NAPL (n, N)	$\int_{B(t)} \phi S_n C_n^N d\underline{x}$	$\phi S_n C_n^N$	$\phi S_n \underline{J}^N$	$C_n^N Q^N + q_n^N$
napl en GAS (n, G)	$\int_{B(t)} \phi S_g C_n^G d\underline{x}$	$\phi S_g C_n^G$	$\phi S_g \underline{J}^G$	$C_n^G Q^G + q_n^G$
gas en GAS (g, G)	$\int_{B(t)} \phi S_g C_g^G d\underline{x}$	$\phi S_g C_g^G$	$\phi S_g \underline{J}^G$	$C_g^G Q^G + q_g^G$
napl en SÓLIDO (n, S)	$\int_{B(t)} (1-\phi) \rho^s \omega_n^s d\underline{x}$	$(1-\phi) \rho^s \omega_n^s$	0	q_n^s
bioestimulante en SÓLIDO (n, S)	$\int_{B(t)} (1-\phi) \rho^s \omega_b^s d\underline{x}$	$(1-\phi) \rho^s \omega_b^s$	0	q_b^s

En las expresiones de la tabla 2.2:

ϕ = porosidad, [adimensional];

S^α = saturación de la fase α , [adimensional];

C_i^α = concentración de la i ésima componente en la fase α , $[M/L^3]$;

J^α = flujo difusivo de la fase α $[L^2/T]$;

Q^α = fuentes (+) o sumideros (-) de la fase α debidos a la existencia de pozos distribuidos, $[1/T]$;

q_i^α = fuentes o sumideros de la especie i en la fase α por transferencia de masa, $[M/L^3T]$;

ρ^s = densidad de la fase sólida, $[M/L^3]$;

ω_n^s = fracción de masa de las especies de napl adsorbidas en el suelo, [adimensional];

ω_b^s = fracción de masa del bioestimulante adsorbido en el suelo, [adimensional], y

K_r^i = coeficiente de biodegradación de la i ésima componente, $[M/L^3 T]$.

Nótese que las definiciones de la Tabla 2.2 son consistentes con el hecho de que la velocidad de una componente es la de la fase en la que está contenida. Sustituyendo apropiadamente estas definiciones en la ecuación (2.13), se obtiene el balance de masa de cada una de las componentes en las distintas fases y el sistema de ecuaciones resultante es:

agua en AGUA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_w^w) + \nabla \cdot (\phi S_w C_w^w \underline{v}^w) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^w) = C_w^w Q^w + q_w^w \quad (2.14)$$

napl en AGUA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_n^w) + \nabla \cdot (\phi S_w C_n^w \underline{v}^w) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^w) = C_n^w Q^w + q_n^w - \phi K_r^n \quad (2.15)$$

bioestimulante en AGUA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_b^w) + \nabla \cdot (\phi S_w C_b^w \underline{v}^w) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^w) = C_b^w Q^w + q_b^w - \phi K_r^b \quad (2.16)$$

napl en NAPL

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_n C_n^N) + \nabla \cdot (\phi S_n C_n^N \underline{v}^N) - \nabla \cdot (\phi S_n \underline{J}^N) = C_n^N Q^N + q_n^N \quad (2.17)$$

napl en GAS

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g C_n^G) + \nabla \cdot (\phi S_g C_n^G \underline{v}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = C_n^G Q^G + q_n^G \quad (2.18)$$

gas en GAS

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g C_g^G) + \nabla \cdot (\phi S_g C_g^G \underline{v}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = C_g^G Q^G + q_g^G \quad (2.19)$$

napl en SÓLIDO

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ (1 - \phi) \rho^s \omega_n^s \} = q_n^s \quad (2.20)$$

bioestimulante en SÓLIDO

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ (1 - \phi) \rho^s \omega_b^s \} = q_b^s \quad (2.21)$$

Cabe señalar que en las ecuaciones (2.14) a (2.19), el signo de $C_i^\alpha Q^\alpha$ es positivo si hay inyección de fluido y negativo si se trata de extracción. De forma análoga, el

signo de q_i^α en las ecuaciones (2.14) a (2.21) depende de si se está ganando o perdiendo masa.

Para continuar con la derivación del modelo, el siguiente paso consiste en identificar las reacciones que ocurren entre fases durante el flujo y transporte. La identificación de las mismas se describe en la Tabla 2.3.

TABLA 2.3
TRANSFERENCIA DE MASA

	w, W	n, W	b, W	n, N	g, G	n, G	n, S	b, S
w, W	0	0	0	0	0	0	0	0
n, W	0	0	0	E_n^W	0	$-E_{n/w}^G$	$-E_{n/w}^S$	0
b, W	0	0	0	0	0	0	0	$-E_{b/w}^S$
n, N	0	$-E_n^W$	0	0	0	$-E_n^G$	0	0
g, G	0	0	0	0	0	0	0	0
n, G	0	$E_{n/w}^G$	0	E_n^G	0	0	0	0
n, S	0	$E_{n/w}^S$	0	0	0	0	0	0
b, S	0	0	$E_{b/w}^S$	0	0	0	0	0

Tomando en cuenta estas reacciones, para cada componente el intercambio de masa q_i^α , se define de manera general por

$$q_w^W = q_g^G = 0 \quad (2.22)$$

$$q_n^W = E_n^W - E_{n/w}^G - E_{n/w}^S \quad (2.23)$$

$$q_b^W = -E_{b/w}^S \quad (2.24)$$

$$q_n^N = -(E_n^W + E_n^G) \quad (2.25)$$

$$q_n^G = E_n^G + E_{n/w}^G \quad (2.26)$$

$$q_n^S = E_{n/w}^S \quad (2.27)$$

$$q_b^S = E_{b/w}^S \quad (2.28)$$

En las ecuaciones (2.22) a (2.28) se utilizaron las siguientes definiciones

- a) E_n^W , $[M/L^3T]$, es la disolución de C_n^N en Agua;
- b) $E_{n/w}^G$, $[M/L^3T]$, representa la volatilización de C_n^W en Gas;
- c) E_n^G , $[M/L^3T]$, cuantifica la volatilización de C_n^N en Gas;
- d) $E_{n/w}^S$, $[M/L^3T]$, es la adsorción de C_n^W en Sólido, y
- e) $E_{b/w}^S$, $[M/L^3T]$, cuantifica la adsorción de C_b^W en Sólido.

Sustituyendo las definiciones (2.22)-(2.28) en las ecuaciones (2.14)-(2.21), el sistema de ecuaciones ahora es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_w^W) + \nabla \cdot (\phi S_w C_w^W \underline{v}^W) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^W) = C_w^W Q^W \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_n^W) + \nabla \cdot (\phi S_w C_n^W \underline{v}^W) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^W) = C_n^W Q^W + E_n^W - E_{n/w}^G - E_{n/w}^S - \phi K_r^n \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_b^w) + \nabla \cdot (\phi S_w C_b^w \underline{v}^w) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^w) = C_b^w Q^w - E_{b/w}^s - \phi K_r^b \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_n C_n^N) + \nabla \cdot (\phi S_n C_n^N \underline{v}^N) - \nabla \cdot (\phi S_n \underline{J}^N) = C_n^N Q^N - (E_n^w + E_n^G) \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g C_n^G) + \nabla \cdot (\phi S_g C_n^G \underline{v}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = C_n^G Q^G + E_{n/w}^G + E_n^G \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g C_g^G) + \nabla \cdot (\phi S_g C_g^G \underline{v}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = C_g^G Q^G \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ (1 - \phi) \rho^s \omega_n^s \} = E_{n/w}^s \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ (1 - \phi) \rho^s \omega_b^s \} = E_{b/w}^s \quad (2.36)$$

Para derivar las ecuaciones de balance de masa de cada una de las fases se suman las ecuaciones de balance de las componentes que la forman. Para poder llevar a cabo esta operación, es necesario tomar en cuenta que la densidad de fase se define mediante:

$$\rho^\alpha = \sum_{i=w,n,g} C_i^\alpha, \quad \alpha = W, N, G \quad (2.37)$$

Por otra parte, la transferencia total de masa se cuantifica mediante:

$$q^\alpha = \sum_{i=w,n,b,g} q_i^\alpha, \quad \alpha = W, N, G \quad (2.38)$$

Como no ocurren procesos de desintegración radioactiva, por conservación de masa, se tiene que satisfacer la siguiente restricción

$$\sum_{i=w,n,b,g} q_i^\alpha = 0 \quad (2.39)$$

Tomando en cuenta las ecuaciones (2.37) a (2.39), sumando las ecuaciones (2.29) a (2.31); (2.33) y (2.34); (2.35) y (2.36), el sistema de ecuaciones que representa el balance de masa de cada fase es

Fase Agua

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi S_w \rho^w) + \nabla \cdot (\phi S_w \rho^w \underline{v}^w) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^w) = \rho^w Q^w \\ + E_n^w - E_{n/w}^G - E_{n/w}^S - E_{b/w}^S - \phi (K_r^n + K_r^b) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Fase Napi

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S_n \rho^N) + \nabla \cdot (\phi S_n \rho^N \underline{v}^N) - \nabla \cdot (\phi S_n \underline{J}^N) = \rho^N Q^N - E_n^w - E_n^G \quad (2.41)$$

Fase Gas

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S_g \rho^G) + \nabla \cdot (\phi S_g \rho^G \underline{v}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = \rho^G Q^G + E_n^G + E_{n/w}^G \quad (2.42)$$

Fase Sólida

$$\frac{\partial}{\partial t} (1 - \phi) \rho^s (\omega_n^s + \omega_b^s) = E_{n/w}^S + E_{b/w}^S \quad (2.43)$$

El transporte de especies de hidrocarburos disueltas en el agua subterránea se simula con el sistema formado por las ecuaciones de balance de masa de cada una de las fases (ecuaciones 2.40-2.43) y por las de transporte de especies - ecuaciones (2.30), (2.31) y (2.33)-. Las ecuaciones (2.40), (2.41) y (2.42) representan el flujo del sistema. Para obtener un modelo completo es necesario definir ecuaciones constitutivas, identificar los parámetros que se mantienen constantes durante todo el proceso de acuerdo con las hipótesis del modelo, y definir las condiciones iniciales y de frontera. Esto se describe en las siguientes secciones.

Los procesos que controlan el transporte de especies en medios porosos son: advección, difusión, transferencia de masa; y degradación biológica. A continuación se describe cada uno de éstos y se presentan las ecuaciones constitutivas utilizadas para su representación matemática.

2.2 ADVECCIÓN

Es el movimiento de una especie química debido al flujo de la fase en que está disuelta. Como ya se ha señalado, ésta se mueve en la misma dirección y con la misma velocidad promedio de la fase. El flujo de fase está determinado por la presencia de gradientes que hacen que cada una de éstas se desplace de las zonas de mayor a las de menor potencial. La magnitud y la dirección del mismo dependen de las propiedades físicas de las fases, las propiedades del medio y su variación espacial, el volumen de fase disponible, el grado de saturación del medio, y la interacción con otras fases.

El flujo de fluidos en medios porosos está controlado por la presión, así como por la existencia de fuerzas viscosas, inerciales y gravitacionales. Para determinar la velocidad de fase, \underline{v}^α [L/T], se utiliza la extensión de la Ley de Darcy para fluidos multifásicos (Bear, 1972; Aziz y Settari, 1979). Ésta es

$$\underline{v}^{\alpha} = -\frac{\underline{k} k_{r\alpha}}{\phi S_{\alpha} \mu_{\alpha}} (\nabla P^{\alpha} - \gamma^{\alpha} \nabla Z), \quad \alpha = W, N, G. \quad (2.44)$$

en la ecuación (2.44), P^{α} $[F/L^2]$ es la presión de la fase α ; \underline{k} $[L]$, la permeabilidad intrínseca; $k_{r\alpha}$ [adimensional], la permeabilidad relativa de la fase α , y μ_{α} $[FT/L^2]$, la viscosidad de la fase α . γ^{α} , es el peso específico de la fase α y se define mediante:

$$\gamma^{\alpha} = \rho^{\alpha} \underline{g} \quad (2.45)$$

donde \underline{g} $[L/T^2]$ es la aceleración de la gravedad.

La viscosidad es propiedad del fluido, es una medida de su resistencia al movimiento por lo que es inversamente proporcional a la razón de flujo: mientras mayor sea ésta, más lento será el flujo y viceversa. En cambio, la permeabilidad relativa y la permeabilidad intrínseca, son directamente proporcionales a la tasa de flujo, éste se incrementa en la medida que lo hacen las anteriores. La permeabilidad intrínseca es una propiedad del medio y es un dato del problema. Es un tensor, si el medio es homogéneo, ésta no varía con la posición. Si el medio es anisotrópico y los ejes de anisotropía coinciden con el sistema coordinado, entonces

$$\underline{k} = k_{ij} \delta_{ij}$$

δ_{ij} es la delta de Kroenecker. Si el medio es isotrópico y homogéneo, la permeabilidad intrínseca no varía con la dirección y se cumple que

$$k_x = k_y = k_z$$

La permeabilidad intrínseca está asociada al tamaño de grano y tiene un papel muy importante en la migración de hidrocarburos. En la Figura 2.1 se muestra esquemáticamente el comportamiento de acuerdo con esta propiedad. En la Figura 2.1(a) se representa un medio de alta permeabilidad, donde la componente vertical del flujo tiende a ser mayor. En cambio, en zonas de baja permeabilidad como la que se muestra en la Figura 2.1(b) tiende a ser dominante la componente horizontal. Cuando existen contrastes en la permeabilidad intrínseca, como sucede en medios estratificados, el patrón de flujo es irregular (Testa y Winegardner, 1992), esto se ilustra en la Figura 2.1(c).

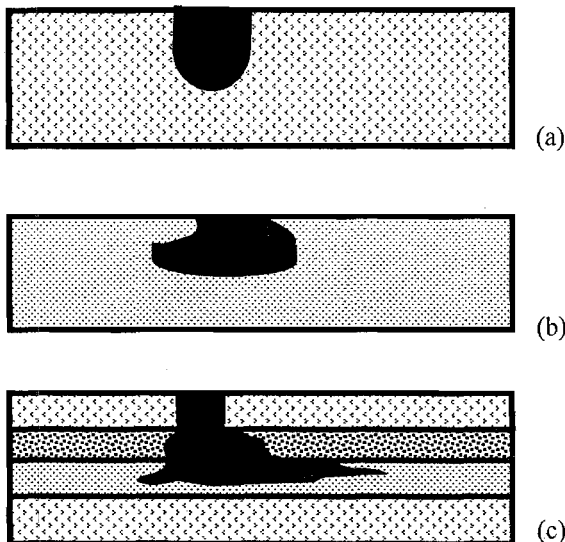


Figura 2.1. Efecto del medio en el flujo de fases líquidas inmiscibles: (a), distribución en un medio homogéneo de alta permeabilidad, (b) distribución en un medio homogéneo de baja permeabilidad, (c), distribución en un medio estratificado, con contrastes en permeabilidad.

Para incorporar la ley de Darcy en las ecuaciones de balance, primero se sustituye la ecuación (2.44) en las ecuaciones (2.40) a (2.42), y posteriormente en las ecuaciones (2.30), (2.31) y (2.33). Como resultado de estas operaciones se obtiene el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w \rho^W) + \nabla \cdot (\rho^W \underline{u}^W) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^W) = \rho^W Q^W \\ + E_n^W - E_{n/w}^G - E_{n/w}^S - E_{b/w}^S - \phi (K_r^n + K_r^b) \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_n \rho^N) + \nabla \cdot (\rho^N \underline{u}^N) - \nabla \cdot (\phi S_n \underline{J}^N) = \rho^N Q^N - E_n^W - E_n^G \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g \rho^G) + \nabla \cdot (\rho^G \underline{u}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = \rho^G Q^G + E_n^G + E_{n/w}^G \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_n^W) + \nabla \cdot (C_n^W \underline{u}^W) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^W) = \\ C_n^W Q^W + E_n^W - E_{n/w}^G - E_{n/w}^S - \phi K_r^n \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi S_w C_b^W) + \nabla \cdot (C_b^W \underline{u}^W) - \nabla \cdot (\phi S_w \underline{J}^W) = \\ C_b^W Q^W - E_{b/w}^S - \phi K_r^b \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_g C_n^G) + \nabla \cdot (C_n^G \underline{u}^G) - \nabla \cdot (\phi S_g \underline{J}^G) = C_n^G Q^G + E_{n/w}^G + E_n^G \quad (2.51)$$

Nótese que al hacer uso de la ecuación (2.44), en las ecuaciones (2.48) a (2.51) se obtiene la velocidad de Darcy, u^α [L/T], definida por

$$\underline{u}^\alpha = -\frac{k k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} (\nabla P^\alpha - \gamma^\alpha \nabla z), \quad \alpha = W, N, G. \quad (2.52)$$

Durante el flujo en medios porosos en sistemas de varias fases, cada una de éstas ocupa una fracción del espacio de poro, por esto es necesario especificar la saturación de fase S_α [adimensional]. Ésta se define mediante

$$S_{\alpha} = \frac{V_{\alpha}}{\phi}, \quad \alpha = W, N, G. \quad (2.53)$$

V_{α} es el volumen ocupado por la fase α y ϕ la porosidad del medio. Se debe satisfacer la siguiente restricción interna

$$\sum_{\alpha} S_{\alpha} = 1 \quad (2.54)$$

El grado de saturación es fundamental para determinar el comportamiento de cada una de las fases. Para definir los efectos relacionados con el grado de saturación del agua cuando coexiste con alguna otra fase en el medio poroso, se distinguen las siguientes zonas:

- a) Zona pendular: en ésta el agua no forma una fase continua por lo que no puede desplazarse.
- b) Zona funicular: el flujo de agua es posible y el medio está parcialmente saturado. El volumen de flujo aumenta en forma directamente proporcional al grado de saturación
- c) Franja capilar: el aire está en estado de saturación residual por lo que la mayor parte del espacio poroso está ocupado por agua, ésta es retenida por fuerzas capilares
- d) Zona saturada: en esta zona el espacio de poro está totalmente ocupado por agua.

Las primeras tres forman parte de la zona vadosa o no saturada y se muestran en la Figura 2.2. En ésta, el agua puede ser retenida por fuerzas adhesivas y/o capilares. Debido a estas últimas, el agua se eleva hasta que éstas son contrarrestadas por el empuje gravitacional y se alcanza un estado de equilibrio. De esta forma, el agua puede descender o elevarse y el ángulo de contacto entre el líquido y la superficie sólida depende de la dirección del

desplazamiento. Debido a esto, las relaciones entre la saturación, la presión capilar y la permeabilidad relativa no se definen de manera única, sino que dependen de la dirección del desplazamiento; es decir, presentan histéresis (Knox et al., 1993; Testa y Winegardner, 1992; Bear, 1972). En la Figura 2.3 se muestran curvas típicas de presión capilar durante la imbibición y el drenaje.

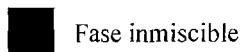
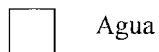
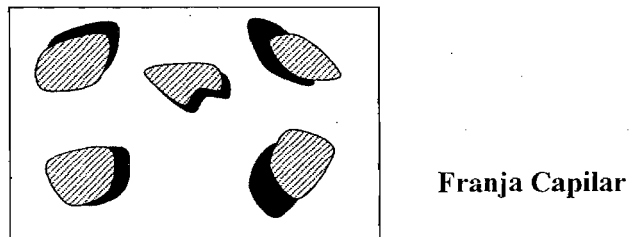
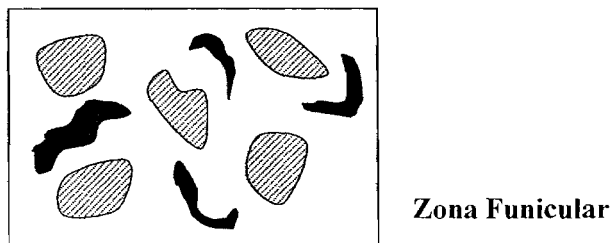
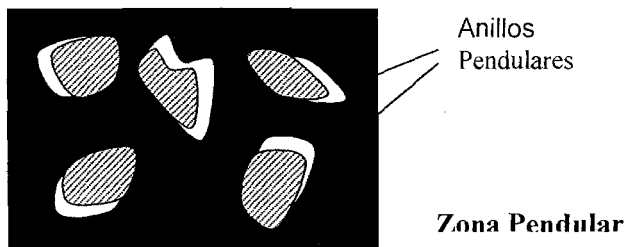


Figura 2.2. Clasificación de zonas de acuerdo con el grado de saturación del agua.

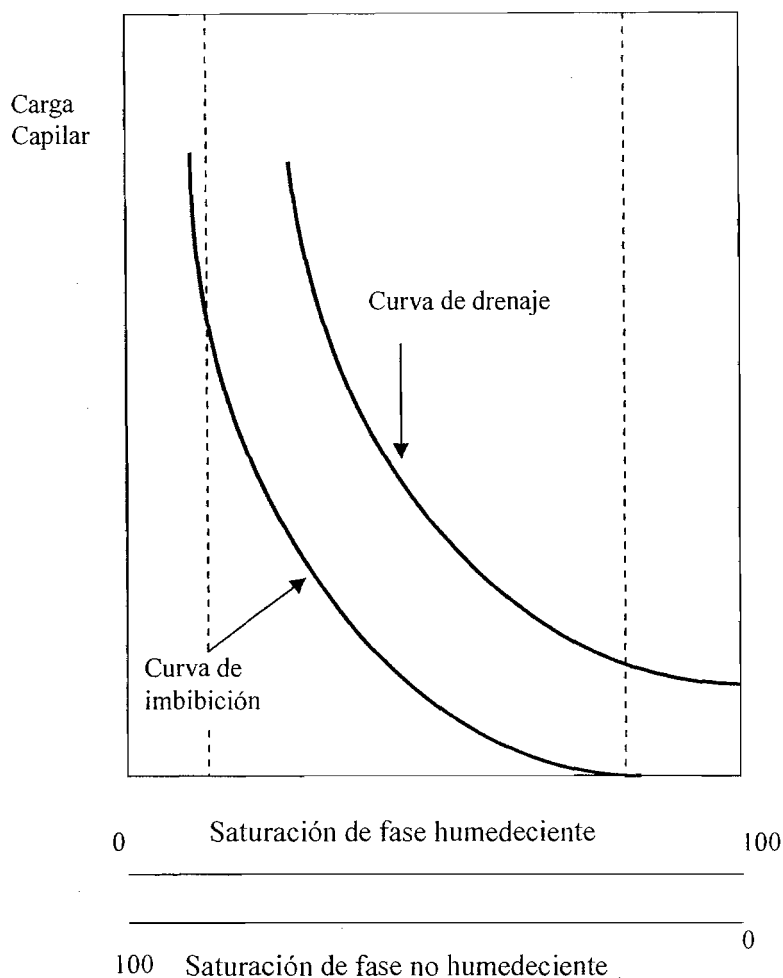


Figura 2.3. Representación esquemática de las curvas de carga capilar durante la imbibición y el drenaje. El grado de saturación está expresado en %.

2.3 COMPORTAMIENTO DE LA FASE NAPL

Para que el flujo sea posible es necesario que el volumen de fase sea tal, que de lugar a la formación de una fase continua. Suponiendo que el medio es homogéneo e isotrópico, si se trata de un gran derrame, el patrón de flujo es uniforme. En cambio, si la fuente aporta pequeñas cantidades en periodos de tiempo largos como sucede cuando hay fugas en tanques de almacenamiento, se forman patrones interdigitados.

Si el volumen de fase es suficiente, el flujo continúa en la dirección vertical hasta alcanzar la franja capilar. Si la aportación es limitada, el flujo cesa y se alcanza una condición estable o de saturación residual, caracterizada por el hecho de que cierta cantidad de fluido queda inmobilizada. En su trayectoria, cierta cantidad de fluido es retenida por el medio poroso (Powers et al., 1991, Illangasekare et al., 2005). Ambos fenómenos son el resultado de la existencia de fuerzas capilares. En la zona no saturada el líquido es retenido en películas o en forma de anillos pendulares, estos últimos se ilustran en la Figura 2.4. En la zona saturada se forman glóbulos de diversas formas y tamaños, como se representa en la Figura 2.5. Debido a que son inmóviles, constituyen una fuente permanente de contaminación del agua subterránea. Éstos forman parte de la saturación residual y su magnitud depende principalmente de las propiedades del medio poroso y del grado de saturación del mismo. De acuerdo con valores representativos de la saturación residual, para matrices sólidas similares, ésta tiende a ser mayor en la zona saturada (Illangasekare et al., 2005).

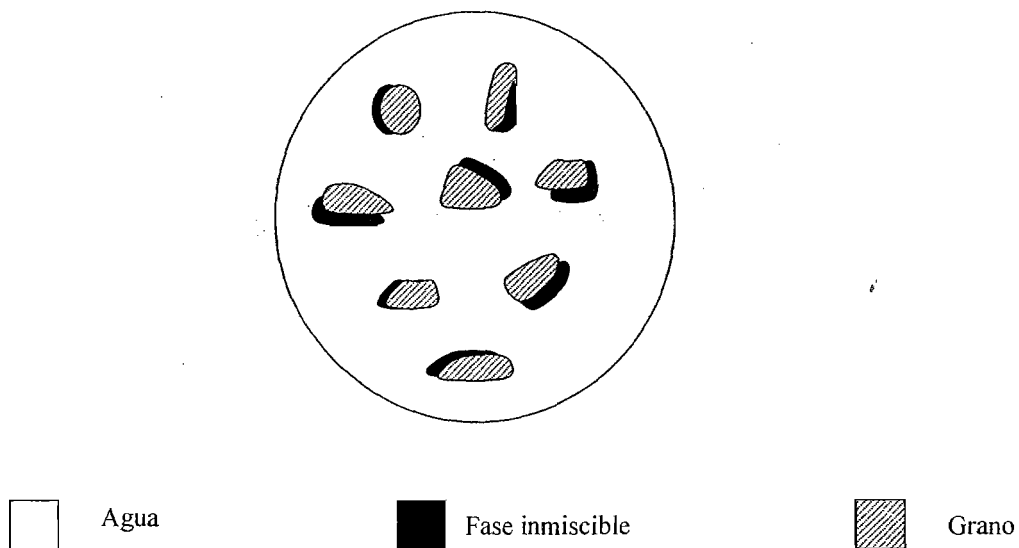


Figura 2.4. Representación esquemática de la distribución de fase orgánica residual en la zona no saturada.

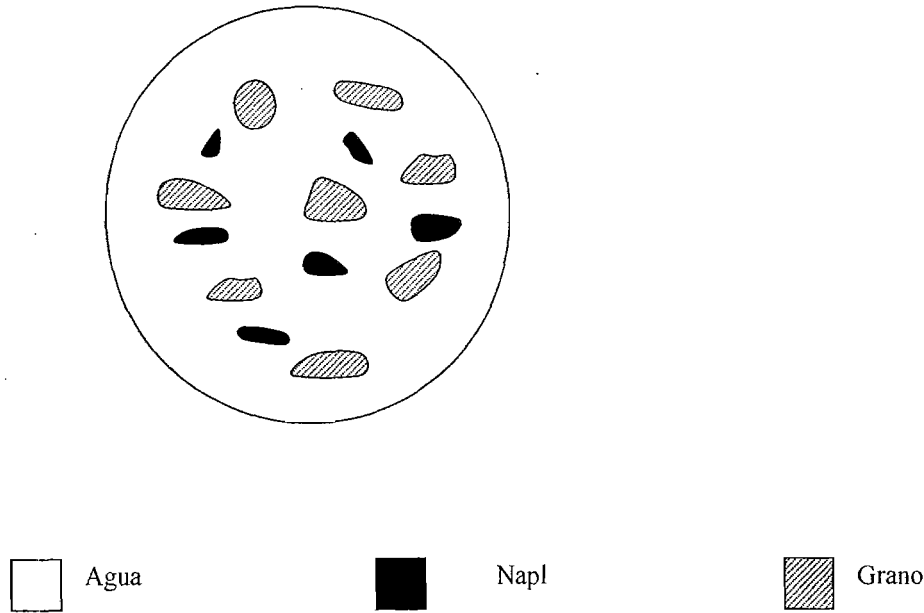
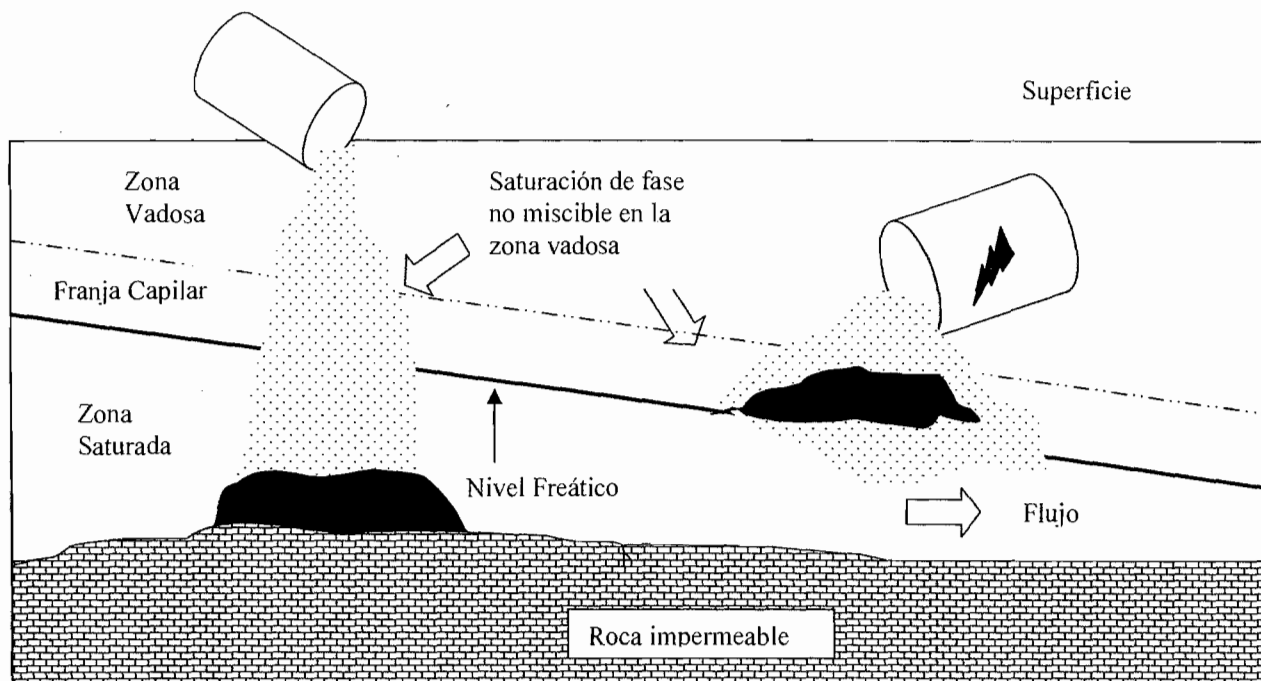


Figura 2.5. Representación esquemática de la distribución de fase orgánica residual en la zona saturada.

Las fases no miscibles se han clasificado tomando en cuenta las diferencias en densidad. De esta forma, se encuentran las fases más ligeras que el agua, 'LNAPLs' ('Lighter Non-Aqueous Phase Liquids') y las más densas 'DNAPLs' ('Denser Non-Aqueous Phase Liquids'). Al primer grupo pertenecen la mayoría de los hidrocarburos naturales y refinados; y al segundo, los compuestos orgánicos clorados. De estos últimos, los que con mayor frecuencia se encuentran en el agua subterránea son: el tricloroetileno (TCE), el tricloroetano (TCA) el tetracloroetileno (PCE) y el dicloroetano (DCA) (Cherry y Feenstra, 1990). Existen diferencias en el patrón de migración dependiendo si la fase orgánica es más ligera o más pesada que el agua. Como se muestra esquemáticamente en la Figura 2.6, si ocurre un derrame y la fase no miscible es más ligera que el agua, el desplazamiento vertical cesa en la franja capilar; es decir, el fluido tiende a flotar sobre el nivel freático. En cambio, si la fase es más pesada que el agua, el desplazamiento vertical continúa por toda la zona saturada y se detiene cuando se encuentra con un estrato de roca impermeable.



En las Figuras 2.7 y 2.8 se muestran diversos escenarios que resultan tanto de las diferencias en densidad como del volumen del derrame. Cuando el volumen del derrame no es muy grande, si la fase es más pesada, se forman patrones interdigitados, tal como se muestra en la Figura 2.8(a). De hecho, estos patrones se forman cuando el ingreso de esta fase al subsuelo ha terminado, tal y como se observa esquemáticamente en la Figura 2.8(b). Si es más ligera que el agua, una vez que la fase llega a la franja capilar, se detiene la migración vertical de ésta y el desplazamiento tiende a ser horizontal (Knox et al., 1993; Testa y Winegardner, 1992; Abriola y Pinder, 1985). Sin embargo, cuando el volumen es considerable, además de iniciarse el desplazamiento horizontal, puede inducirse una disminución en el nivel freático como se observa en la Figura 2.7(b). En cambio si la fase es más pesada que el agua (DNAPL), continúa desplazándose en la dirección vertical hasta que alcanza un estrato de menor permeabilidad. En este nivel, el desplazamiento es horizontal (Testa y Winegardner, 1992; Kueper y Frind, 1992).

Simulación del desplazamiento vertical de hidrocarburos en el subsuelo
Modelo matemático

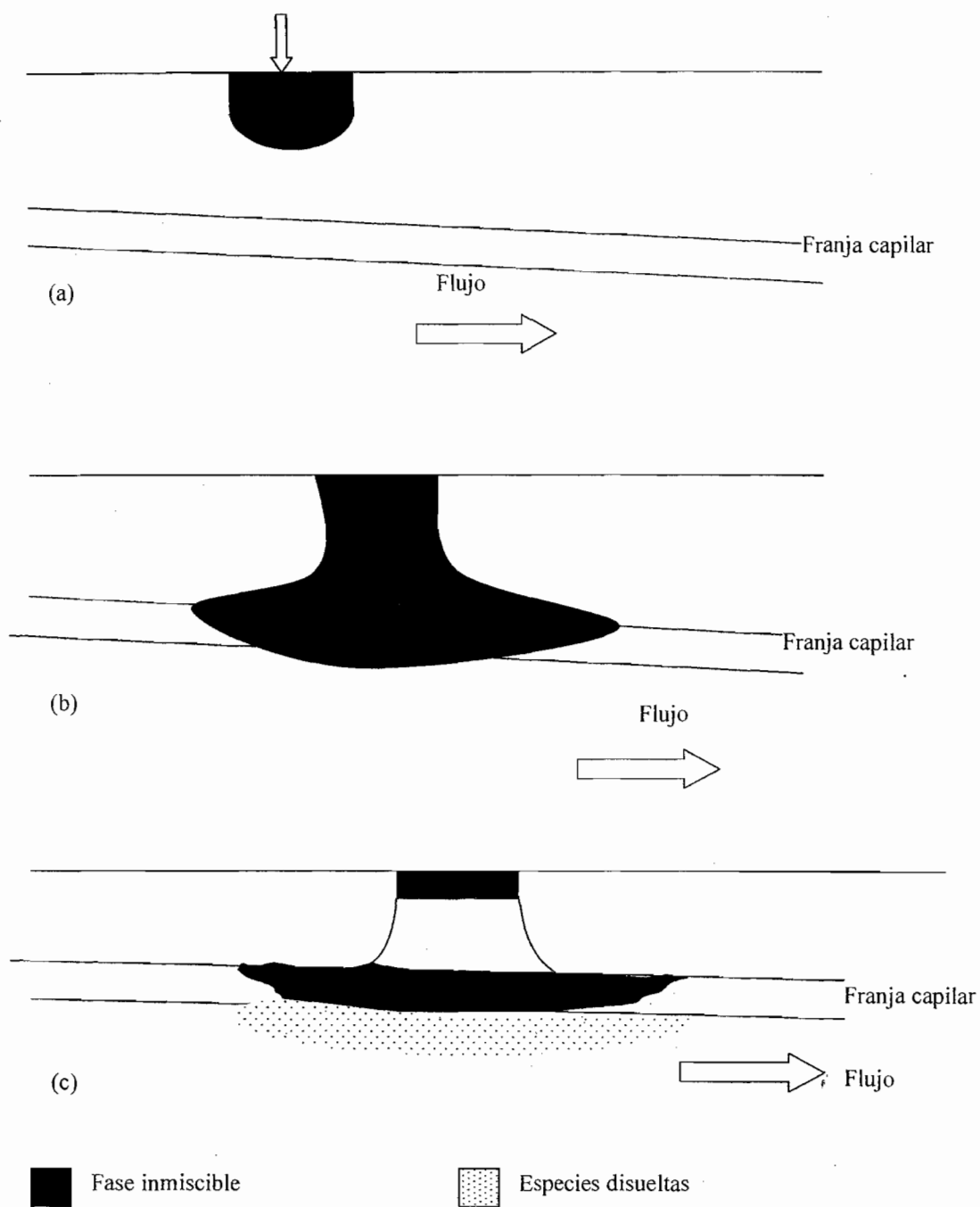


Figura 2.7. Desplazamiento típico de fases más ligeras que el agua el subsuelo.

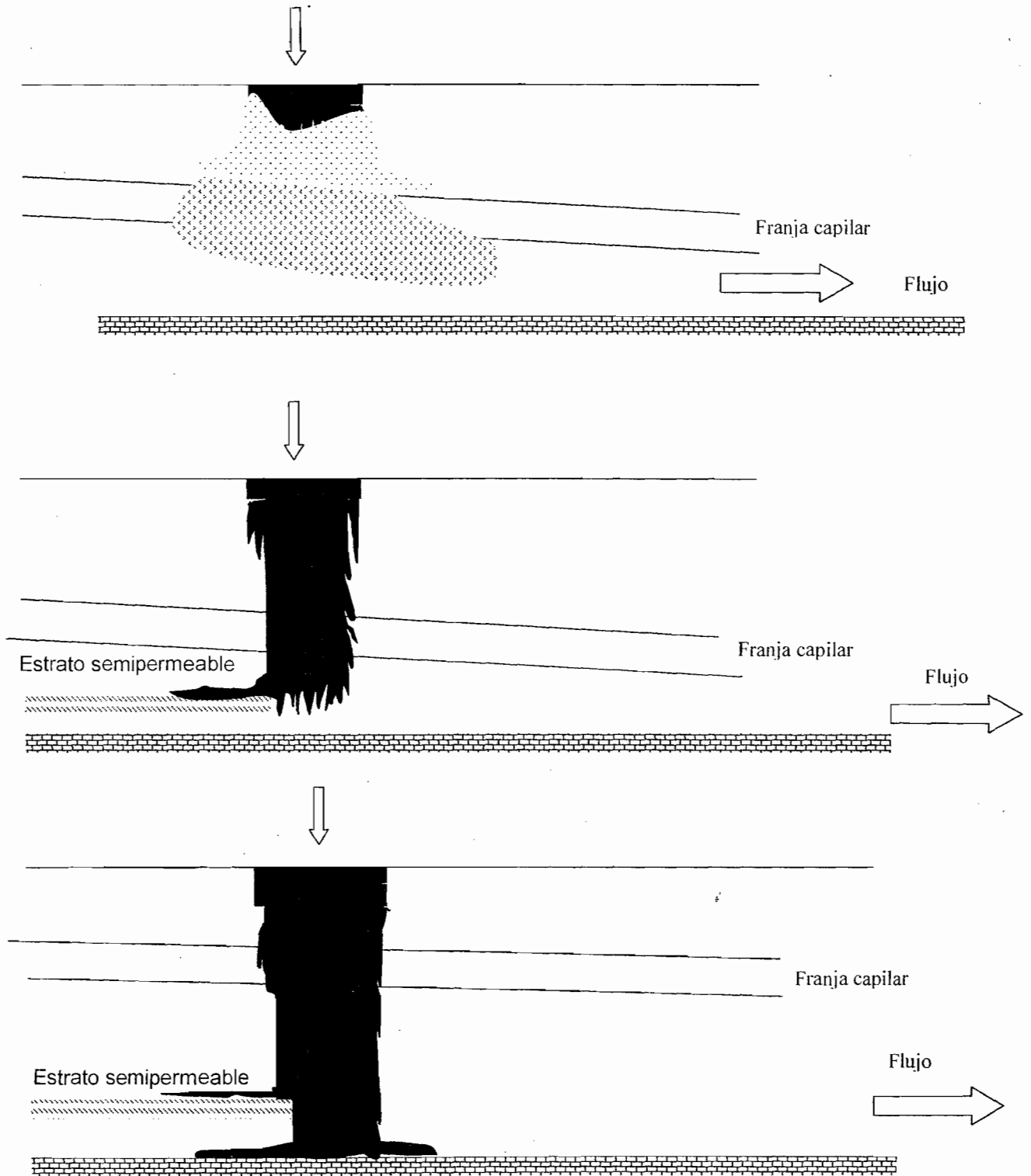


Figura 2.8. Desplazamiento típico de fases más pesadas que el agua el subsuelo.

2.4 COMPORTAMIENTO DE LA FASE GAS

En la etapa inicial de un derrame, la fase gaseosa está formada por aire y su presión es la atmosférica. Debido a esto último, el mecanismo principal de transporte hidrodinámico es la difusión. Sin embargo, hay flujo advectivo en los siguientes casos (Hughes et al., 1992; Johnson et al., 1992):

1. Si la densidad de vapores es mayor que la del aire, esto ocasiona que en la zona no saturada se formen gradientes de densidad, y se produzca flujo advectivo controlado por este mecanismo. Como la densidad depende de la concentración de compuestos orgánicos volatilizables, ésta tiene que ser alta para que los gradientes sean significativos.
2. Si hay gradientes de presión debidos a fluctuaciones en la presión barométrica, fenómenos de despresurización ocasionados por excavaciones y/o la infiltración de frentes húmedos.

Si el flujo advectivo está controlado por gradientes de densidad, tiene lugar un descenso de la pluma contaminante. Si en cambio, está controlado por gradientes de presión, se presentan fenómenos similares a los de la fase NAPL en relación con el flujo del agua. Además, puede haber adsorción de compuestos en la fase sólida. En la franja capilar la saturación de gas es la residual, por lo que no puede haber transporte en esta fase. En la Figura 2.9 se muestra un escenario típico en el que hay transporte de compuestos volátiles en fase gas controlado por gradientes de densidad.

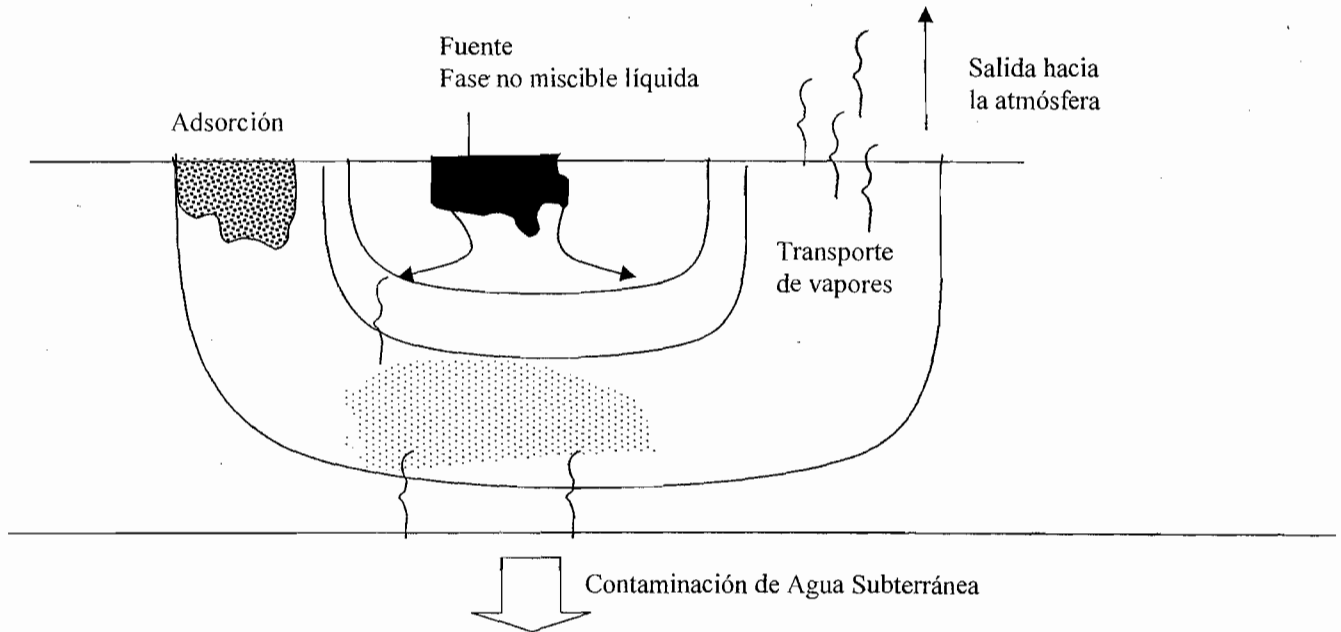
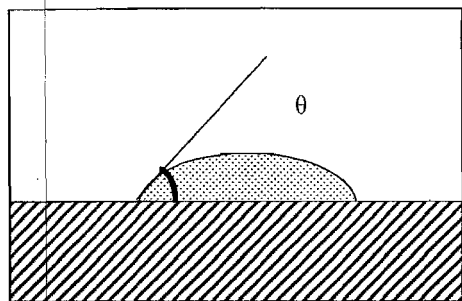


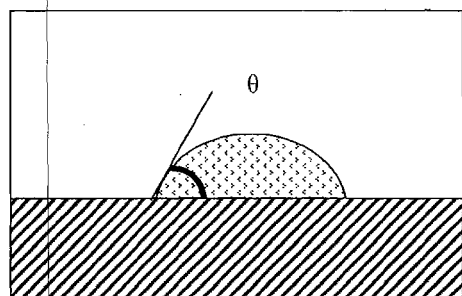
Figura 2.9. Transporte de vapores en la zona no saturada.

Tensión interfacial

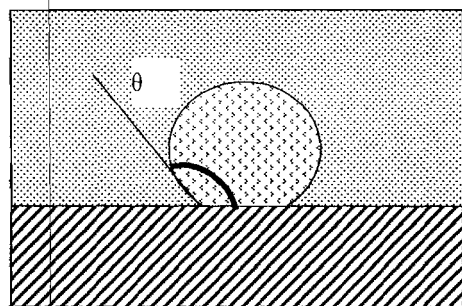
Cuando una fase está en contacto con otras, hay una energía interfacial libre entre ellas. Ésta es el resultado de la diferencia entre la atracción molecular hacia el interior de la fase (fuerzas cohesivas) y aquella que se produce hacia la superficie de contacto (fuerzas adhesivas). Esta energía es la tensión interfacial, $\sigma_{\alpha\beta}$, que se produce entre las fases α y β . Conceptualmente se define como la cantidad de trabajo que se requiere para separar una unidad de área de la sustancia β de la fase α (Bear J., 1972). Esta propiedad se utiliza para determinar la tensión de adhesión entre cada una de las fases y el medio sólido. Mediante la tensión de adhesión se determina cual de las fases 'humedece' preferentemente al medio sólido. La 'humedecibilidad' de una fase, es una medida de su afinidad por la superficie sólida. Idealmente puede medirse mediante el ángulo de contacto θ que se forma entre una gota de fluido y la superficie sólida. Para pares de fluidos, si $\theta < 90^\circ$, se considera que el fluido es la fase 'humedeciente' y si $\theta > 90^\circ$, entonces es la fase no 'humedeciente'. En la Figura 2.10 se muestra las afinidades características para pares de fluidos.



(a) Agua-Gas



(b) NAPL-Gas



(c) Agua-NAPL



FIGURA 2.10 Afinidades hacia el medio sólido características para las combinaciones posibles de pares de fluidos: (a) Agua-Gas, (b) NAPL-Gas, (c) Agua NAPL.

En un fluido formado por tres fases (Agua, Gas y NAPL), generalmente se asume que el agua es la fase más 'humedeciente'; el gas la menos 'humedeciente'; mientras que el NAPL tiene 'humedecibilidad' intermedia (Aziz y Settari, 1979; Guarnaccia et al., 1995, Jensen y Falta, 2005). En la Figura 2.11 se representa esquemáticamente la tensión interfacial que se produce en un sistema de tres fases fluidas. Esta definición es importante ya que la presión capilar y la permeabilidad relativa dependen tanto de las propiedades del medio, como de la saturación de la fase 'humedeciente', en el caso que nos ocupa: del agua (Bear, 1972). Este hecho será tomado en cuenta para definir las relaciones entre la saturación, la presión capilar y la permeabilidad relativa.

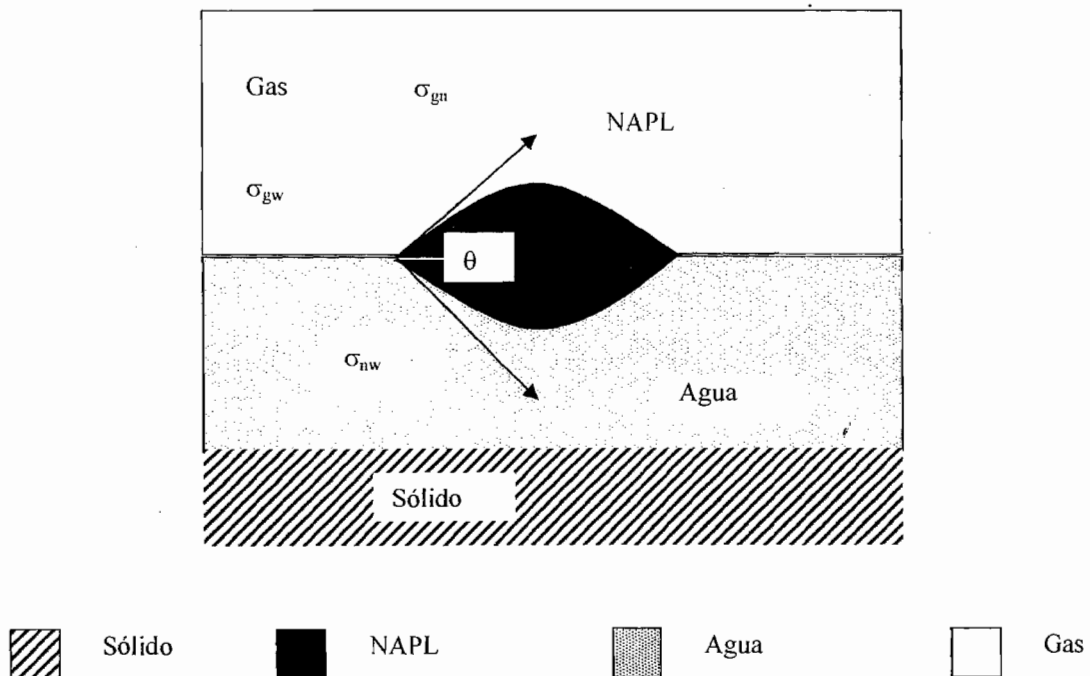


FIGURA 2.11 Tensión interfacial en un sistema de tres fases.

2.5 SATURACIÓN Y PRESIÓN CAPILAR

Debido a la combinación de fuerzas adhesivas y cohesivas, cuando dos o más fases están en contacto, hay una discontinuidad de presión en la interfase que los separa. Su magnitud depende de la curvatura de la interfase en ese punto que es menor en la fase 'humedeciente'. Esa diferencia de presión, es la presión capilar entre las fases α y β , $P_{c\alpha-\beta}$. En un sistema de dos fases se expresa mediante

$$P_{cN-W} = P^N - P^W \quad (2.55)$$

P^W y P^N son respectivamente, la presión de la fase 'humedeciente' y la presión de la fase no 'humedeciente'. Como la curvatura es mayor para la fase no 'humedeciente', la presión capilar es una cantidad positiva y tiene dependencia local: tensión interfacial, geometría y radio del poro, la naturaleza del sólido y los fluidos. Como en mayor medida, depende de la saturación de la fase 'humedeciente', se puede definir mediante

$$P_{cN-W} = P_{cN-W}(S_W). \quad (2.56a)$$

Por el teorema de la función inversa se tiene que

$$S_W = S_W(P_{cN-W}) \quad (2.56b)$$

Como el ángulo de contacto θ es función de la dirección del desplazamiento, la relación $P_{cN-W}(S_W)$ depende de la trayectoria del flujo, como se muestra en las Figuras 2.3 y 2.12. Es decir, esta relación no es única y es conveniente estimar P_{cN-W} y S_W de acuerdo con la historia del flujo, ya que las curvas que describen $P_{cN-W}(S_W)$ dependen de si inicialmente el medio estaba saturado con un fluido 'humedeciente' o no 'humedeciente'. En cada caso existen

curvas de imbibición y drenaje. El régimen de flujo indica las curvas que deben utilizarse.

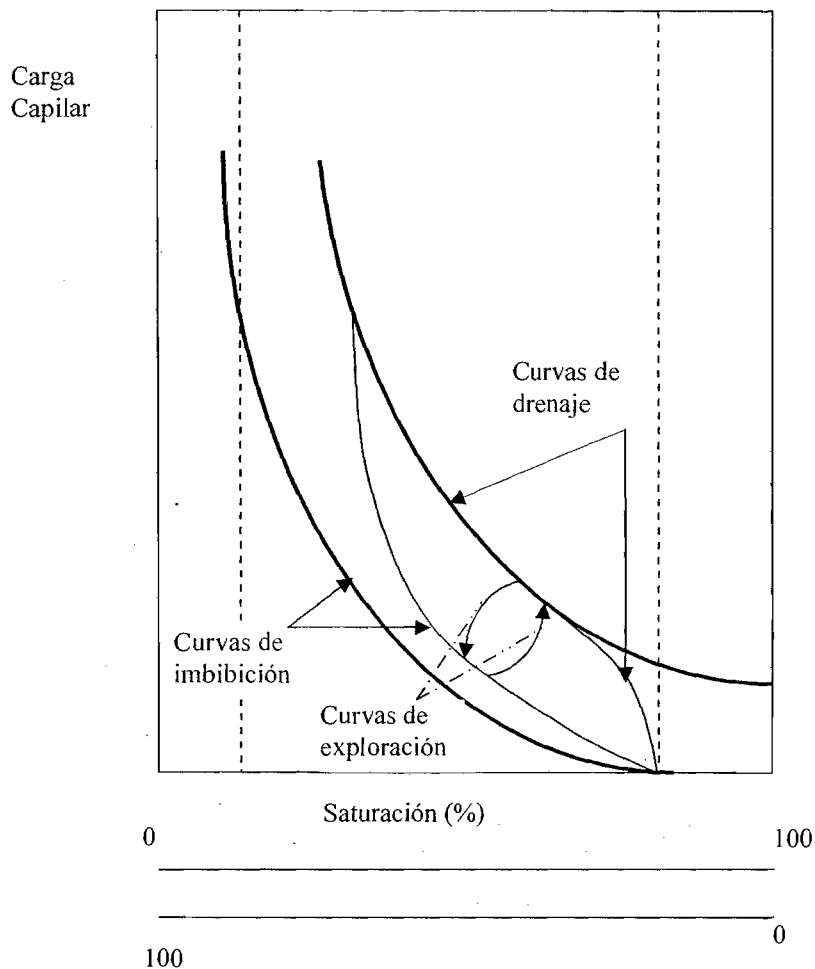


Figura 2.12. Curvas que muestran la relación entre la presión capilar y la saturación

En la simulación de procesos de flujo y transporte en fluidos de varias fases, se utilizan modelos S-P, éstos describen la relación entre la saturación y la presión capilar, y los K-S, que describen la relación entre la permeabilidad relativa y la saturación. En las primeras formulaciones para sistemas de tres fases se definieron las relaciones S-P y las K-S de forma única, es decir, sin tomar en cuenta el fenómeno de histéresis. Se ha tomado en cuenta histéresis en fluidos

formados por dos fases. En Guarnaccia, et al. (1995), se presenta el desarrollo de un modelo K-S-P, en el que las relaciones saturación-presión y permeabilidad relativa-saturación, dependen de la trayectoria del flujo, y se definen para un sistema de tres fases. Éste consiste en dos modelos de dos fases interdependientes y se formuló con base en consideraciones de humedecimiento del medio. Este modelo se presenta a continuación.

Para derivar el modelo, considérense sistemas de dos fases descrito por las siguientes relaciones Saturación-Presión Capilar, la forma que toma la restricción (2.54) en cada caso y las combinaciones posibles de pares de fluidos en sistemas de tres fases

$$\text{NAPL-Agua} \quad S_w = S_w(P_{cNW}) \quad (2.57a)$$

$$P_{cNW} = P^N - P^W \quad (2.57b)$$

$$S_N = 1 - S_w \quad (2.57c)$$

$$\text{Gas-Agua} \quad S_w = S_w(P_{cGW}) \quad (2.58a)$$

$$P_{cGW} = P^G - P^W \quad (2.58b)$$

$$S_G = 1 - S_w \quad (2.58c)$$

$$\text{Gas-NAPL} \quad S_N = S_N(P_{cGN}) \quad (2.59a)$$

$$P_{cGN} = P^G - P^N \quad (2.59b)$$

$$S_G = 1 - S_N \quad (2.59c)$$

Las funciones para un sistema de tres fases pueden obtenerse relacionando dos modelos de dos fases, como sigue

$$\text{Gas-NAPL-Agua} \quad S_w = S_w(P_{cNW}) \quad (2.60a)$$

$$S_G = S_G(P_{cGN}) \quad (2.60b)$$

$$S_N = 1 - S_w - S_G \quad (2.60c)$$

Para relacionar las ecuaciones (2.57) a (2.59) es necesario hacer consideraciones sobre la 'humedecibilidad' de cada una de las fases. Como el humedecimiento del fluido va de más a menos, siendo el agua la fase más 'humedeciente' y el gas la menos 'humedeciente' (Bear, 1972; Guarnaccia et al., 1995); se define entonces la saturación total de fase 'humedeciente' S_{Tw} , con respecto a la fase gaseosa como:

$$S_{Tw} = S_w + S_N \quad (2.61)$$

Mientras que la saturación total de fase no 'humedeciente' S_{Tn} , con respecto al agua es

$$S_{Tn} = S_N + S_G \quad (2.62)$$

Como en un sistema de tres fases la restricción (2.54) toma la forma

$$S_w + S_N + S_G = 1 \quad (2.63)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (2.61) y (2.62), se tiene que

$$S_{Tw} = 1 - S_G = S_{Tw}(P_{cGN}) \quad (2.64)$$

y

$$S_w = 1 - S_{Tn} \quad (2.65)$$

Tomando en cuenta que cierto volumen de fase queda inmovilizado en el medio poroso, la saturación de fase, puede representarse mediante la suma de dos componentes

$$S_{\alpha} = S_{\alpha f} + S_{\alpha r}, \quad \alpha = W, N, G. \quad (2.66)$$

en donde las cantidades libre (subíndice f) y residual (subíndice r) son variables y dependen de la trayectoria del flujo. La saturación residual también puede definirse en términos de aquellos componentes que identifican la cantidad retenida, según la fase que la ha desplazado. Es decir:

$$S_{W r} = S_{W r N} + S_{W r G} \quad (2.67)$$

$$S_{N r} = S_{N r W} + S_{N r G} \quad (2.68)$$

$$S_{G r} = S_{G r W} + S_{G r N} \quad (2.69)$$

los subíndices del lado derecho de las ecuaciones (2.67) a (2.69), α r β , indican la fase α retenida debido al flujo de la fase β . Con estas definiciones se puede identificar el total de fase residual 'humedeciente' y no 'humedeciente' partiendo de consideraciones de 'humedecimiento' de fluidos, mediante las siguientes relaciones

$$S_{T w r} = S_{W r} + S_{N r} \quad (2.70)$$

$$S_{T n r} = S_{N r} + S_{G r} \quad (2.71)$$

Las ecuaciones (2.70) y (2.71) tienen seis incógnitas que deben cuantificarse. Para reducir el número de éstas, se hace una simplificación de la anterior definición de atrapamiento de fase basado en las características de 'humedecimiento' del medio. Como el agua es la fase más 'humedeciente', el mecanismo de retención se reduce a una sola fase 'humedeciente', S_w , que es desplazada por una fase no 'humedeciente', S_{Tn} . Entonces se supondrá que la magnitud de S_{wt} será la misma sin importar que fase la desplaza, sus componentes no necesitan ser calculados y debe determinarse por alguna función dependiente de la historia del flujo, tal como

$$S_{wr} = S_{wr} \left(S_w(P_{cNW}) \right) \quad (2.72)$$

El mismo razonamiento se aplica a la fase gaseosa. Puesto que es la menos 'humedeciente', el mecanismo de retención se reduce a una sola fase no 'humedeciente', S_g , que es desplazado por una fase 'humedeciente', S_{Tw} . Tampoco es necesario calcular sus componentes, y se utiliza una función dependiente de la historia del flujo; en este caso

$$S_{gr} = S_{gr} \left(S_{Tw}(P_{cGN}) \right) \quad (2.73)$$

Puesto que la fase NAPL tiene 'humedecimiento' intermedio, es importante identificar que fase la desplaza. Como los mecanismos de retención dependen del comportamiento entre pares de fluidos y se tiene que

$$S_{nrw} = S_{nrw} \left(S_w(P_{cNW}) \right) \quad (2.74)$$

$$S_{nrg} = S_{nrg} \left(S_{Tw}(P_{cGN}) \right) \quad (2.75)$$

Un hecho importante que deriva de la inmovilización de fluidos es que no todo el volumen de fase contribuye al flujo, por lo que es necesario cuantificar el volumen que si lo hace. En este sentido, la saturación efectiva de la fase α , $S_{e\alpha}$, indica la cantidad de fluido que efectivamente contribuye al flujo. Ésta es equivalente a la saturación de la fase α , normalizada por los límites de las saturaciones máxima y residual, es decir

$$S_{e\alpha} = \frac{(S_{\alpha} - S_{\alpha r})}{(S_{\alpha s} - S_{\alpha r})} \quad (2.76)$$

$$0 \leq S_{e\alpha} \leq 1, \quad S_{\alpha r} \leq S_{\alpha} \leq S_{\alpha s}$$

Dada una función S-P, $S_{\alpha r}$ es la saturación residual de la fase α y $S_{\alpha s}$ es la máxima saturación de fase que puede alcanzarse. Tomando en cuenta cuestiones de 'humedecimiento' en un sistema de tres fases, otra manera de calcular la saturación efectiva del agua es

$$S_{eW} = \frac{S_W - S_{Wr}}{1 - S_{Tnr} - S_{Wr}} \quad (2.77)$$

donde S_{Tnr} es la saturación residual de la fase no 'humedeciente', en el contexto de un modelo de tres fases está dada por:

$$S_{Tnr} = S_{NrW} + S_{NrG} + S_{Gr}$$

La saturación efectiva de la fase 'humedeciente', S_{eTw} , se calcula mediante

$$S_{eTw} = \frac{S_{Tw} - S_{Twr}}{1 - S_{GT} - S_{Twr}} \quad (2.78)$$

donde S_{Twr} es la saturación residual de la fase 'humedeciente', está dada por:

$$S_{Twr} = S_{Wr} + S_{NrW} + S_{NrG}$$

Debe notarse que los denominadores de (2.77) y (2.78) son equivalentes, ambos representan la fracción total del espacio de poro que está disponible para flujo. Planteado de otra forma, puede verse como la suma de todas las saturaciones residuales. Las ecuaciones son interdependientes dadas las relaciones de retención de fase.

FUNCIONES S-P

Una vez que el sistema de tres fases se ha expresado como dos sistemas de dos fases, las relaciones entre la saturación y la presión capilar -relaciones S-P- se formulan como dos modelos de dos fases interdependientes. Las curvas que definen $S_{eW}(P_{cNW})$ y $S_{eTw}(P_{cGN})$ se obtienen del siguiente conjunto de ecuaciones

$$S_{eW(f)}(S_W) = \frac{S_W - S_{r(f)}^W}{S_{s(f)}^W - S_{r(f)}^W} \quad (2.79)$$

$$S_{eW(f)}(h_{NW}) = \left[1 + (a_f h_{NW})^\eta \right]^{-m} \quad (2.80)$$

$$0 \leq S_{eW(f)} \leq 1$$

$$S_{eTw(f)}(S_{Tw}) = \frac{S_{Tw} - S_{r(f)}^T}{S_{s(f)}^T - S_{r(f)}^T} \quad (2.81)$$

$$S_{eW(f)}(h_{GN}) = \left[1 + (a_f h_{GN})^\eta \right]^{-m} \quad (2.82)$$

$$0 \leq S_{eTW(f)} \leq 1$$

En las ecuaciones (2.79) a (2.82), el subíndice f se usa para especificar que se trata de la trayectoria de flujo f, esta notación es pertinente si se toma en cuenta que las trayectorias son diferentes durante la imbibición y el drenaje; a_f , es un parámetro de ajuste de curvas, tiene dos valores, uno para el drenaje del agua (a_d) y otro para la imbibición (a_i), h_{NW} y h_{GN} son las cargas capilares y se calculan mediante

$$h_{NW} = \frac{P_{cNW}}{\rho^w g}$$

$$h_{GN} = \frac{P_{cGN}}{\rho^w g}$$

η es un parámetro de ajuste de curva, independiente de la trayectoria del flujo, cuando éste se conoce, m se calcula mediante

$$m = 1 - \frac{1}{\eta}$$

Como a_d, a_i y η se determinan experimentalmente, las ecuaciones anteriores pueden usarse para determinar $S_{eW}(P_{cNW})$ y $S_{eTW}(P_{cGN})$ si los parámetros dependientes de la trayectoria del flujo $S_{r(f)}^W, S_{s(f)}^W, S_{r(f)}^T$ y $S_{s(f)}^T$ son conocidos, es decir, si son datos del problema.

FUNCIONES K-S

Cuando dos o más fases coexisten en un medio poroso se produce un cambio en la permeabilidad relativa. Dada la permeabilidad de un medio poroso para un fluido, ésta se reduce cuando otro fluido está presente (Knox et al., 1993). En la Figura 2.13 se muestran las curvas típicas de permeabilidad relativa para un sistema de dos fases formado por gas y agua. El valor de la permeabilidad relativa depende del grado de saturación de la fase más 'humedeciente'; es decir

$$k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_w)$$

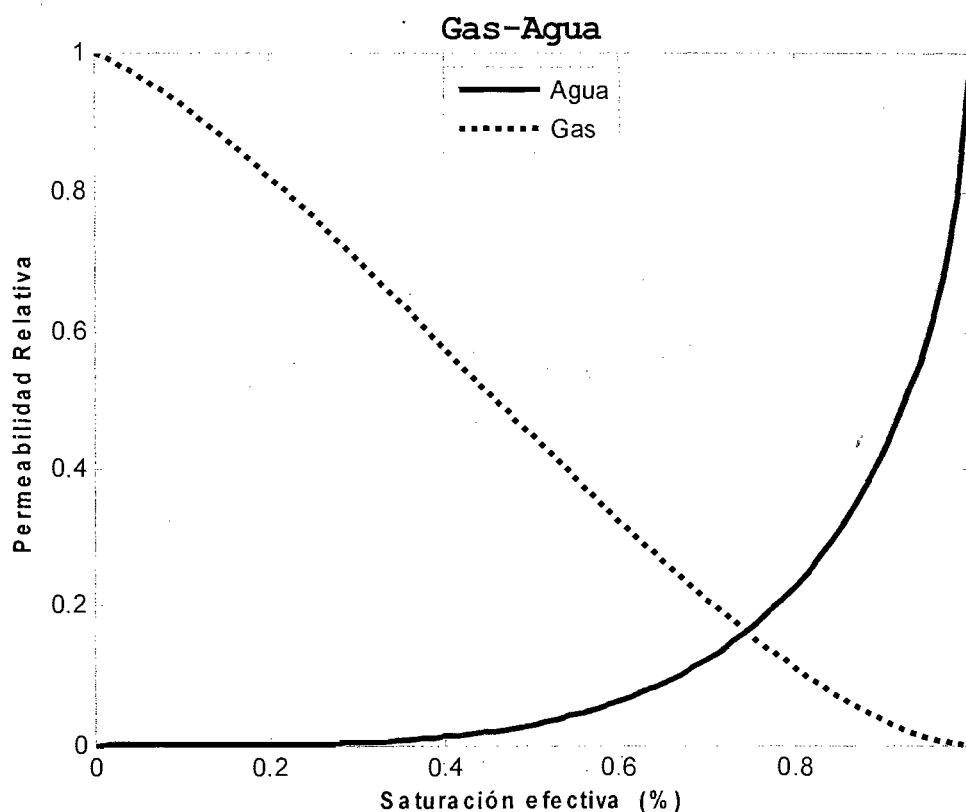


Figura 2.13. Curvas permeabilidad relativa-saturación para un sistema gas-agua.

CAPÍTULO 3

FORMULACIÓN SECUENCIAL

3.1 FLUJO FRACCIONAL

El sistema por resolver, está formado por seis ecuaciones diferenciales parciales no lineales y una serie de ecuaciones constitutivas. Para resolver el sistema de ecuaciones de flujo, es necesario definir las variables 'primarias' o independientes. El valor del resto de las variables se calcula haciendo uso de las ecuaciones constitutivas. Para definir estas variables es necesario reformular el sistema de ecuaciones de flujo. Como se mencionó en la introducción, existen diversas formas de definir las variables primarias, en este trabajo se presenta una reformulación en términos del flujo fraccional, que se combina con un algoritmo de solución secuencial para desacoplar el sistema de ecuaciones.

Cuando se emplea el enfoque de flujo fraccional, el primer paso consiste en definir el flujo de fase como una fracción del flujo total. Para obtener este último, considérese el sistema de ecuaciones (2.146) a (2.151) en una dimensión

$$\begin{aligned} \phi \left\{ \frac{\partial S^W}{\partial t} + \frac{S^W}{\rho^W} \frac{\partial \rho^W}{\partial t} \right\} + \frac{\partial u^W}{\partial x} + \frac{u^W}{\rho^W} \frac{\partial \rho^W}{\partial x} = Q^W + \frac{\bar{K}_n^W}{\rho^W} (\bar{C}_n^W - C_n^W) \\ - \frac{\bar{K}_{n/W}^G}{\rho^W} (HC_n^W - C_n^G) - \left\{ \frac{(1-\phi)\rho^S}{\rho^W} \right\} \left\{ K_d^n \frac{\partial C_n^W}{\partial t} + K_d^b \frac{\partial C_b^W}{\partial t} \right\} \\ - \frac{\phi S^W}{\rho^W} \left\{ \left(1 + \frac{Y_b}{Y_n} \right) \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i - \left(1 + \frac{Y_n}{Y_b} \right) \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_n^W \delta_i \right\} \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\phi \frac{\partial S^N}{\partial t} + \frac{\partial u^N}{\partial x} = Q^N - \frac{\bar{K}_n^W}{\rho^N} (\bar{C}_n^W - C_n^W) - \frac{\bar{K}_n^G}{\rho^N} (\bar{C}_n^G - C_n^G) \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \phi \left\{ \frac{\partial S^G}{\partial t} + \frac{S^G}{\rho^G} \frac{\partial \rho^G}{\partial t} \right\} + \frac{\partial u^G}{\partial x} + \frac{u^G}{\rho^G} \frac{\partial \rho^G}{\partial x} = Q^G \\ + \frac{\bar{K}_n^G}{\rho^G} (\bar{C}_n^G - C_n^G) + \frac{\bar{K}_{n/W}^G}{\rho^G} (HC_n^W - C_n^G) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi S^G C_n^G)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(C_n^G u^G) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\phi S^G D^G \frac{\partial C_n^G}{\partial x}\right) &= C_n^G Q^G \\ + \bar{K}_{n/w}^G (HC_n^W - C_n^G) + \bar{K}_n^G (\bar{C}_n^G - C_n^G) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi S^W C_n^W)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(C_n^W u^W) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\phi S^W D^W \frac{\partial C_n^W}{\partial x}\right) &= C_n^W Q^W \\ + \bar{K}_n^W (\bar{C}_n^W - C_n^W) - \bar{K}_{n/w}^G (HC_n^W - C_n^G) - \{(1-\phi)\rho^S K_d^n\} \frac{\partial C_n^W}{\partial t} \\ - \phi S^W \left\{ \frac{Y_b}{Y_n} \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i - \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_n^W} \right) C_n^W \delta_i \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi S^W C_b^W)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(C_b^W u^W) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\phi S^W D^W \frac{\partial C_b^W}{\partial x}\right) &= C_b^W Q^W \\ - \{(1-\phi)\rho^S K_d^b\} \frac{\partial C_b^W}{\partial t} - \phi S^W \left\{ \frac{Y_n}{Y_b} \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_n^W} \right) C_n^W \delta_i - \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i \right\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Nótese que las ecuaciones (3.1), (3.2) y (3.3) se han dividido por ρ^W , ρ^N y ρ^G respectivamente.

Para obtener el flujo total, se suman las ecuaciones de flujo -(3.1) a (3.3)-. De esta forma, se eliminan los términos que incluyen derivadas de las saturaciones con respecto al tiempo. Realizando esta operación, y después de algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\rho^W} \left\{ \phi S^W \frac{\partial \rho^W}{\partial t} + (1-\phi) \rho^S K_d^n \frac{\partial C_n^W}{\partial t} \right\} + \frac{1}{\rho^G} \left\{ \phi S^G \frac{\partial \rho^G}{\partial t} \right\} + \frac{u^W}{\rho^W} \frac{\partial \rho^W}{\partial x} + \frac{u^G}{\rho^G} \frac{\partial \rho^G}{\partial x} \\
 & + \frac{\partial u^W}{\partial x} + \frac{\partial u^N}{\partial x} + \frac{\partial u^G}{\partial x} = Q^W + Q^N + Q^G \\
 & + \left(\frac{1}{\rho^W} - \frac{1}{\rho^N} \right) \left\{ \bar{K}_n^W (\bar{C}_n^W - C_n^W) \right\} + \left(\frac{1}{\rho^G} - \frac{1}{\rho^W} \right) \left\{ \bar{K}_{n/w}^G (HC_n^W - C_n^G) \right\} \\
 & + \left(\frac{1}{\rho^G} - \frac{1}{\rho^N} \right) \left\{ \bar{K}_n^G (\bar{C}_n^G - C_n^G) \right\} - \frac{(1-\phi) \rho^S K_d^b}{\rho^W} \frac{\partial C_b^W}{\partial t} \\
 & - \frac{\phi S^W}{\rho^W} \left\{ \left(1 + \frac{Y_b}{Y_n} \right) \left(\frac{XV_m / I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i - \left(1 + \frac{Y_n}{Y_b} \right) \left(\frac{XV_m / I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_n^W \delta_i \right\}
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Para expresar de manera compacta la ecuación (3.7) se hace uso de las siguientes definiciones

Velocidad total, u^T :

$$u^T = u^W + u^N + u^G \tag{3.8}$$

Gasto total por pozos distribuidos, Q^T :

$$Q^T = Q^W + Q^N + Q^G \tag{3.9}$$

Transferencia de masa entre fases, E^T :

$$\begin{aligned}
 E^T = & \left(\frac{1}{\rho^W} - \frac{1}{\rho^N} \right) \left\{ \bar{K}_n^W (\bar{C}_n^W - C_n^W) \right\} + \left(\frac{1}{\rho^G} - \frac{1}{\rho^W} \right) \left\{ \bar{K}_{n/w}^G (HC_n^W - C_n^G) \right\} \\
 & + \left(\frac{1}{\rho^G} - \frac{1}{\rho^N} \right) \left\{ \bar{K}_n^G (\bar{C}_n^G - C_n^G) \right\} - \frac{(1-\phi) \rho^S}{\rho^W} \left(K_d^n \frac{\partial C_n^W}{\partial t} + K_d^b \frac{\partial C_b^W}{\partial t} \right)
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Cambio en la densidad del agua, Γ_n^W :

$$\Gamma_n^W = \frac{1}{\rho^W} \left\{ \phi S^W \frac{\partial \rho^W}{\partial t} + u^W \frac{\partial \rho^W}{\partial x} \right\} \quad (3.11)$$

Cambio en la densidad del gas, Γ_n^G :

$$\Gamma_n^G = \frac{1}{\rho^G} \left\{ \phi S^G \frac{\partial \rho^G}{\partial t} + u^G \frac{\partial \rho^G}{\partial x} \right\} \quad (3.12)$$

Procesos de biodegradación, B^T

$$B^T = \frac{\phi S^W}{\rho^W} \left\{ \left(1 + \frac{Y_b}{Y_n} \right) \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i + \left(1 + \frac{Y_n}{Y_b} \right) \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_n^W \delta_i \right\} \quad (3.13)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (3.8) a (3.13), la ecuación (3.7) se puede expresar mediante

$$\frac{\partial u^T}{\partial x} = Q^T + E^T - \Gamma_n^W - \Gamma_n^G - B^T \quad (3.14)$$

De acuerdo con la velocidad de Darcy definida en la ecuación (2.52), en una dimensión para cada fase toma la forma

$$u^W = -\lambda_w \left(\frac{\partial P^W}{\partial x} - \gamma^W \right) \quad (3.15)$$

$$u^N = -\lambda_N \left(\frac{\partial P^N}{\partial x} - \gamma^N \right) \quad (3.16)$$

$$u^G = -\lambda_G \left(\frac{\partial P^G}{\partial x} - \gamma^G \right) \quad (3.17)$$

En las ecuaciones (3.15) a (3.17), λ_α es la movilidad de fase, ésta se determina mediante

$$\lambda_\alpha = -k \frac{k_{r\alpha}}{\mu^\alpha} \quad (3.18)$$

El siguiente paso consiste en obtener una ecuación en términos de una sola variable. Básicamente, existen dos alternativas, en la primera, se define una presión global (ver, por ejemplo, Binning y Celia, 1999), mientras que en la segunda se expresan las presiones de la fase orgánica y del gas, P^N y P^G , en términos de la presión del agua P^W , para obtener una ecuación en términos de una sola variable (ver, por ejemplo Guarnaccia et al., 1995). Este es el enfoque que se adopta en este trabajo. Así, de acuerdo con las ecuaciones (2.57b) y (2.59b), se tiene que:

$$P^N = P^W + P_{cNW} \quad (3.19)$$

$$P^G = P^W + P_{cNW} + P_{cGN} \quad (3.20)$$

Combinando las ecuaciones (3.8) y (3.15) a (3.20), la velocidad total resulta ser

$$u^T = \lambda_T \frac{\partial P^W}{\partial X} + (\lambda_N + \lambda_G) \frac{\partial P_{cNW}}{\partial X} + \lambda_G \frac{\partial P_{cGN}}{\partial X} - (\lambda_W \gamma^W + \lambda_N \gamma^N + \lambda_G \gamma^G) \quad (3.21)$$

donde

$$\lambda_T = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \quad (3.22)$$

Combinando las ecuaciones (3.14) y (3.21), se obtiene la siguiente ecuación elíptica para la presión del agua, P^W .

$$\frac{\partial}{\partial X} \left(\lambda_T \frac{\partial P^W}{\partial X} \right) = \frac{\partial}{\partial X} \left((\lambda_W \gamma^W + \lambda_N \gamma^N + \lambda_G \gamma^G) - (\lambda_N + \lambda_G) \frac{\partial P_{cNW}}{\partial X} - \lambda_G \frac{\partial P_{cGN}}{\partial X} \right) \quad (3.23)$$

$$+ Q^T + E^T - \Gamma_n^W - \Gamma_n^G - B^T$$

Para continuar con el desarrollo, es necesario expresar las velocidades de las fases agua y gas como una fracción de la velocidad total, de esta manera se obtiene

$$u^W = f^W \left\{ u^T + \lambda_N \left(\frac{\partial P_{cNW}}{\partial X} + \gamma_{W-N} \right) + \lambda_G \left(\frac{\partial}{\partial X} (P_{cNW} + P_{cGN}) + \gamma_{N-G} \right) \right\} \quad (3.24)$$

$$u^G = f^G \left\{ u^T - \lambda_N \left(\frac{\partial P_{cGN}}{\partial X} + \gamma_{N-G} \right) - \lambda_G \left(\frac{\partial}{\partial X} (P_{cNW} + P_{cGN}) + \gamma_{W-G} \right) \right\} \quad (3.25)$$

f^{α} , definida por

$$f^{\alpha} = \frac{\lambda_{\alpha}}{\lambda_T} \quad (3.26)$$

es la función de flujo fraccional de la fase α . En las ecuaciones (3.24) y (3.25), se empleó la siguiente notación

$$\gamma_{\alpha-\beta} = \gamma^\alpha - \gamma^\beta$$

Una vez que se obtiene la ecuación para la presión del agua P^W , y haciendo uso de las ecuaciones (3.24) y (3.25), se procede a reformular las ecuaciones para la saturación de fase. Debido a la restricción (2.54), que en un sistema de tres fases toma la forma

$$S_w + S_n + S_g = 1,$$

sólo es necesario resolver dos ecuaciones. Una vez que se han seleccionado como variables primarias la saturación del agua y la del gas, se sustituyen las ecuaciones (3.24) y (3.25), en (3.1) y (3.3), respectivamente. Una vez realizada esta operación, haciendo uso de las ecuaciones, (2.60) y (2.64) y después de manipulaciones algebraicas, el sistema resultante es

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + F'_w(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{w-w}}(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{w-g}}(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} \right) = Q^w - \Gamma_n^w + E^w(S_w) - B^T(S_w) \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial S_{Tw}}{\partial t} + F'_g(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{g-g}}(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{g-w}}(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} \right) = \Gamma_n^g - Q^g - E^g(S_{Tw}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Es de hacer notar que por razones de consistencia con las relaciones constitutivas, la ecuación (3.27) se reformuló tomando en cuenta la noción de fluido total 'humedeciente'. Es decir, se hizo uso de

$$S_{Tw} = 1 - S_G \quad (2.64)$$

y se sustituyó en la ecuación (3.3). Además, en la ecuación (3.26) se han aplicado las siguientes definiciones

$$E^W = \frac{\bar{K}_n^W}{\rho^W} (\bar{C}_n^W - C_n^W) - \frac{\bar{K}_{n/W}^G}{\rho^W} (HC_n^W - C_n^G) \quad (3.29)$$

$$- \left\{ \frac{(1-\phi)\rho^S}{\rho^W} \right\} \left\{ K_d^n \frac{\partial C_n^W}{\partial t} + K_d^b \frac{\partial C_b^W}{\partial t} \right\}$$

$$Dc_{W-W}(S_W) = -f_W (\lambda_N + \lambda_G) \frac{dP_{cNW}}{dS_W} \quad (3.30)$$

$$Dc_{W-G}(S_{Tw}) = -f_W \lambda_G \frac{dP_{cGN}}{dS_{Tw}} \quad (3.31)$$

$$F_W = f_W (u_t + \lambda_N \gamma_{W-N} + \lambda_G \gamma_{N-G}) \quad (3.32)$$

De manera similar, en la ecuación (3.27), aplican las siguientes relaciones

$$E^G = \frac{1}{\rho^G} \left\{ \bar{K}_n^G (\bar{C}_n^G - C_n^G) - \bar{K}_{n/W}^G (HC_n^W - C_n^G) \right\} \quad (3.33)$$

$$Dc_{G-G}(S_{Tw}) = -f_G (\lambda_N + \lambda_G) \frac{dP_{cGN}}{dS_{Tw}} \quad (3.34)$$

$$Dc_{G-w}(S_w) = -f_G \lambda_G \frac{dP_{cNW}}{dS_w} \quad (3.35)$$

$$F_G = f_G (u_t + \lambda_N \gamma_{N-G} + \lambda_G \gamma_{W-G}) \quad (3.36)$$

3.2 ALGORITMO SECUENCIAL

De acuerdo con las variables primarias ya definidas, el sistema por resolver, está formado por las ecuaciones (3.23), (3.27), (3.28) y (3.4) a (3.6). Para formular el algoritmo secuencial y desacoplar el sistema, es necesario fijar el valor de las variables distintas de la ecuación que se está resolviendo. En el sistema que sigue, se marcan con un asterisco las variables que se mantienen fijas, durante la actualización de la variable que se indica. El doble asterisco indica un fuerte acoplamiento entre las ecuaciones.

Presión del agua

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T^* \frac{\partial P^W}{\partial x} \right) &= Q^{T^*} + E^{T^*} - \Gamma_n^{W^*} - \Gamma_n^{G^*} - B^{T^*} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda_W \gamma^W + \lambda_N \gamma^N + \lambda_G \gamma^G) - (\lambda_N + \lambda_G) \frac{\partial P_{cNW}}{\partial x} - \lambda_G \frac{\partial P_{cGN}}{\partial x} \right)^* \end{aligned} \quad (3.37)$$

Saturación del agua

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + F'_w(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(Dc_{w-w}(S_w) \frac{\partial S_w}{\partial x} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(Dc_{w-G}(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} \right)^{**} &= Q^{W^*} - \Gamma_n^{W^*} + E^W(S_w) - B^T(S_w) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Saturación del fluido total 'humedeciente'

$$\begin{aligned} & \phi \frac{\partial S_{Tw}}{\partial t} + F'_G(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{G-G}}(S_{Tw}) \frac{\partial S_{Tw}}{\partial x} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{G-W}}(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} \right)^{**} = \Gamma_n^{G*} - Q^{G*} - E^G(S_{Tw}) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Transporte de especies orgánicas en gas

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\phi S^{G*} C_n^G)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (C_n^G u^{G*}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi S^{G*} D_n^G \frac{\partial C_n^G}{\partial x} \right) = C_n^G Q^{G*} \\ & + \bar{K}_{n/W}^{G*} (HC_n^{W*} - C_n^G) + \bar{K}_n^{G*} (\bar{C}_n^G - C_n^G) \end{aligned} \quad (3.40)$$

Transporte de especies orgánicas en agua

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (R_n^{W*} C_n^W)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (C_n^W u^{W*}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi S^{W*} D_n^W \frac{\partial C_n^W}{\partial x} \right) = C_n^W Q^{W*} \\ & + \bar{K}_n^{W*} (\bar{C}_n^W - C_n^W) - \bar{K}_{n/W}^{G*} (HC_n^W - C_n^{G*}) \\ & - \phi S^{W*} \left\{ \frac{Y_b}{Y_n} \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i - \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_n^W} \right) C_n^W \delta_i \right\} \end{aligned} \quad (3.41)$$

Transporte de bioestimulante en agua

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (R_b^{W*} C_b^W)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (C_b^W u^{W*}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi S^{W*} D_b^W \frac{\partial C_b^W}{\partial x} \right) = C_b^W Q^{W*} \\ & - \phi S^{W*} \left\{ \frac{Y_n}{Y_b} \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_n^W} \right) C_n^W \delta_i - \left(\frac{XV_m/I_b I_n}{K_h I_c + C_b^W} \right) C_b^W \delta_i \right\} \end{aligned} \quad (3.42)$$

Para obtener las ecuaciones (3.38) y (3.39) en términos de la saturación, se aplicó el teorema de la función inversa a las ecuaciones (2.60) y (2.64). Así mismo, se aplicó la regla de la cadena en las derivadas espaciales de aquellas variables que dependen exclusivamente de la saturación. En la ecuación (3.41), R_n^{W*} , se define mediante

$$R_n^{W*} = \phi S^{W*} \left\{ 1 + (1 - \phi) \rho^S K_d^n \right\} \quad (3.43)$$

mientras que R_b^{W*} queda definido por

$$R_b^{W*} = \phi S^{W*} \left\{ 1 + (1 - \phi) \rho^S K_d^b \right\} \quad (3.44)$$

3.3 CONDICIONES DE FRONTERA

Una vez que se han definido las variables primarias es necesario contar con condiciones de frontera consistentes. Para la definición de éstas, debe considerarse para cada fase si la frontera está abierta o cerrada al flujo. De esto depende tanto el tipo de condiciones que se tienen, como si son lineales o no lineales. Se consideran tres de los casos más comunes en hidrología subterránea.

Caso 1. La frontera está cerrada al flujo de las tres fases. Esta condición se presenta típicamente cuando hay estratos impermeables que impiden el flujo. Para las tres variables se obtienen las siguientes condiciones de Neuman

$$\frac{\partial P^{W,k+1}}{\partial x} \cdot n \approx \rho^{W,k} g \quad (3.45a)$$

$$\frac{\partial S^{W,k+1}}{\partial x} \cdot n \approx \left[\frac{dS^W}{dP_{cNW}} (\rho^N - \rho^W) \right]^k g \quad (3.45b)$$

$$\frac{\partial S^{Tw,k+1}}{\partial x} \cdot n \approx \left[\frac{dS^{Tw}}{dP_{cGN}} (\rho^G - \rho^N) \right]^k g \quad (3.45c)$$

Caso 2. En la frontera solamente hay flujo de agua. Este caso es típico a nivel de superficie y se presenta cuando ha cesado el ingreso de alguna fase no miscible,

no hay flujo de vapores hacia la atmósfera, pero si hay infiltración o extracción de agua. Se obtiene una condición de Dirichlet para la presión del agua y de Neuman no lineales para las saturaciones.

$$P^W(x, t) = P_f^W \quad (3.46a)$$

$$\frac{\partial S^{W, k+1}}{\partial x} \cdot n \approx \left[\frac{dS^W}{dP_{cNW}} \left(\rho^N g - \frac{\partial P^W}{\partial x} \cdot n \right) \right]^k \quad (3.46b)$$

$$\frac{\partial S^{Tw, k+1}}{\partial x} \cdot n \approx \left[\frac{dS^{Tw}}{dP_{cGN}} (\rho^G - \rho^N) \right]^k g \quad (3.46c)$$

Caso 3. En la frontera hay flujo de todas las fases involucradas. Este es el caso, por ejemplo, cuando hay ingreso o extracción de fases no miscibles al subsuelo aunado a la infiltración o extracción de agua. Se obtienen condiciones de Dirichlet para todas las variables.

$$P^W(x, t) = P_f^W \quad (3.47a)$$

$$S^W(x, t) = S_f^W \quad (3.47b)$$

$$S^{Tw}(x, t) = 1 - S_f^G \quad (3.47c)$$

En las expresiones (3.45) a (3.47), $\bar{x} \in \partial\Omega$, el superíndice k se refiere al paso en el tiempo, y el subíndice f indica el valor prescrito de la variable.

De acuerdo con el sistema de ecuaciones (3.37)-(3.42), sujeto a las condiciones de frontera (3.45)- (3.47), el algoritmo secuencial queda definido de la siguiente manera:

1. En su caso, se actualizan los valores de las condiciones de frontera.
2. Se resuelve la ecuación (3.37) para obtener la presión del agua.
3. Una vez que se conoce la presión del agua, se calcula la velocidad de esta fase y se resuelve la ecuación (3.38) para obtener la saturación del agua.
4. De igual forma que en el punto 3, se resuelve la ecuación (3.39) para actualizar el valor de la saturación del fluido total 'humedeciente'.
5. Como las ecuaciones (3.38) y (3.39) están fuertemente acopladas, a través de la saturación de fase, es necesario iterar hasta que los resultados de ambas sean compatibles.
6. Una vez que se han resuelto (3.38) y (3.39) se calculan la saturación del gas y de la fase orgánica, haciendo uso de las ecuaciones (2.64) y (2.54) en su forma discreta.
7. Dadas las saturaciones de fase, es posible ya calcular la presión capilar entre pares de fluidos y la permeabilidad relativa de cada fase, de acuerdo con las ecuaciones constitutivas (2.79) a (2.88).
8. El siguiente paso consiste en calcular la velocidad de la fase orgánica.
9. A continuación se resuelve la ecuación (3.40) para calcular la concentración de especies orgánicas en gas

10. Después se resuelve la ecuación (3.41) para obtener la concentración de especies orgánicas en agua.
11. La siguiente ecuación a resolver es la (3.42) para calcular la concentración de bioestimulante en agua.
12. Finalmente, una vez que se conoce la concentración de especies orgánicas en gas y agua, se actualizan los valores de las propiedades físicas del agua y el gas mediante las ecuaciones (2.101) a (2.104).

CAPÍTULO 4

APROXIMACIÓN NUMÉRICA

4:1 INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones que forman el sistema que gobierna el transporte de masa en el subsuelo son del tipo advección-difusión-reacción. Como se señaló en la introducción, para esta clase de problemas, aún en su forma más sencilla (como por ejemplo, el caso lineal en una dimensión y con coeficientes constantes), procedimientos numéricos convencionales como diferencias finitas y elemento finito no resultan apropiados, ya que cuando el término advectivo es dominante, se tiende a la formación de frentes que no son reproducidos adecuadamente por estos procedimientos. En general, cuando éstos se utilizan, se presenta una combinación de oscilaciones espurias en la vecindad del frente o un suavizamiento del mismo -dispersión numérica- (Johnson, 1990; Allen et al., 1987; Gray y Pinder, 1976). La explicación de este fenómeno se ha descrito en detalle mediante el análisis de Fourier. Al comparar la solución analítica con la numérica, se demuestra que estos procedimientos no propagan adecuadamente los componentes de Fourier, produciéndose errores de fase (oscilaciones) y de amplitud (suavizamiento del frente). Por lo que éstos solamente son adecuados cuando la solución es suave. En otra clase de problemas como el transporte en sistemas de varias fases surgen complicaciones adicionales como el tratamiento de no linealidades y de coeficientes discontinuos. Debido a que el rango de variación de parámetros de reacción o biodegradación es muy amplio (véase por ejemplo Rathfelder et al., 2000), pueden obtenerse matrices de tipo 'stiff'. Éstas reflejan las diferentes escalas de tiempo características de cada uno de los procesos involucrados. Matrices de este tipo satisfacen las siguientes condiciones

$$\operatorname{Re} \lambda_z < 0, \quad z = 1, \dots, m$$

$$\max_{1 \leq z \leq m} |\operatorname{Re} \lambda_z| \gg \min_{1 \leq z \leq m} |\operatorname{Re} \lambda_z|$$

en donde $\operatorname{Re} \lambda$ es la componente real de los eigenvalores de la matriz.

El comportamiento de las soluciones está acotado por el número de Peclet (Pe), definido por

$$Pe = \frac{v \Delta x}{D} \quad (4.1)$$

Para que una solución no contenga oscilaciones espurias o dispersión numérica, se requiere que $Pe \leq 10$. Como la velocidad y el coeficiente de dispersión son datos del problema, una manera 'natural' de resolver esta dificultad es aumentar el número de nodos correspondientes a la discretización espacial, reduciendo con ello Δx y el número de Peclet. Sin embargo, con esto aumenta el tamaño del sistema de ecuaciones algebraicas. En problemas grandes, esta estrategia puede ser muy costosa en términos computacionales.

Métodos diversos se han desarrollado para la solución numérica del transporte predominantemente advectivo. Entre éstos cabe mencionar la técnica 'upstream weighting', en el contexto del método de diferencias finitas. Su correspondiente en el método de elemento finito es la técnica 'upwind'. En ambos casos, se reducen las oscilaciones a costa del suavizamiento del frente (Allen et al., 1987). Un procedimiento más adecuado que se formuló para el tratamiento del transporte predominantemente advectivo es el método modificado de las características (MMOC). Sin embargo, tiene el inconveniente de que no conserva la masa (Celia et al., 1990).

Basado en la teoría algebraica de Herrera (Herrera, 1987), se desarrolló el método de adjunto localizado (LAM), cuyos detalles se dan más adelante. Este procedimiento ha tenido un papel central en el tratamiento del transporte predominantemente advectivo. En términos generales, puede decirse que las aplicaciones de LAM se caracterizan por utilizar como funciones de peso, la solución de la ecuación adjunta homogénea. Cuando se utilizan funciones de peso exactas se obtienen métodos espacialmente óptimos (Celia et al., 1990). En este caso el método es exacto y se puede demostrar que los errores están asociados a

la aritmética de redondeo. Sin embargo, este procedimiento es limitado ya que no existen soluciones exactas para problemas en varias dimensiones, o bien, en una dimensión y el tiempo. Otra posibilidad es construir las funciones de peso con polinomios, cuando así se procede, se obtiene la solución aproximada de la ecuación adjunta homogénea en puntos de colocación gaussianos. Este es el método de colocación Trefftz-Herrera (colocación T-H). A diferencia del método de colocación tradicional, los valores de la solución se obtienen en los nodos de la discretización y puede obtenerse o no el valor de la primera derivada (Herrera, 1987).

En este contexto, para la resolución de problemas que evolucionan en el tiempo, básicamente se han desarrollado dos procedimientos. En el primero se construyen funciones de peso espacio-temporales. Es el método Euleriano Lagrangiano del Adjunto Localizado (ELLAM) que es una generalización del método de las características. A diferencia de MMOC, se introduce una formulación sistemática de las condiciones de frontera en tal forma que se garantiza la conservación de masa (Celia et al., 1990, Herrera et al, 1993). Cabe señalar que, cuando en el modelo de transporte se incluyen términos de reacción, se obtienen características no lineales.

Otro enfoque consiste en construir las funciones de peso mediante la solución exacta de la ecuación adjunta homogénea en el espacio y tratar las derivadas en el tiempo con procedimientos convencionales. A diferencia de ELLAM tiene restricciones en el número de Courant. Este se ha aplicado a la solución de la ecuación del transporte conservativo en una dimensión y a sistemas de ecuaciones acopladas en una dimensión y una fase que representan transporte con biodegradación, con términos de reacción no lineales (Celia et al., 1989). Un enfoque similar es el que se desarrolla en este trabajo. La diferencia principal es que las funciones de peso espaciales se construyen de manera aproximada. Esto es, se utiliza el método de colocación T-H.

Para evitar matrices mal condicionadas asociadas a los términos de reacción, puede resultar efectivo emplear algún método de separación de operadores (Tebes y Valocchi, 2000). En términos generales, cualquier procedimiento de esta clase, consiste en la descomposición del operador diferencial original en dos o más operadores, de tal forma que se obtengan problemas más sencillos en cada subintervalo de tiempo. Para la ecuación de transporte se han desarrollado diversos esquemas de descomposición que pueden agruparse en tres grupos. En el primero se incluyen los métodos de dirección alternante (ADI), en éstos se resuelve en cada subintervalo de tiempo, el problema en una dirección espacial. En consecuencia, preservan la naturaleza cuasi-hiperbólica de la ecuación. En el segundo, se pueden agrupar a aquellos procedimientos en los que se resuelve el término advectivo en un subintervalo y en el siguiente la difusión y la reacción se tratan aparte. Tienen el inconveniente de que, como el primer subproblema es estrictamente hiperbólico, es inconsistente con el problema original en términos de las condiciones de frontera. El tercer enfoque consiste en resolver la ecuación de advección-difusión en un subintervalo, y las reacciones químicas y/o términos de biodegradación en otro. Esta descomposición está orientada a evitar las matrices mal condicionadas (veáse por ejemplo, Tebes y Valocchi, 2000). En el subproblema de advección-difusión se preserva la naturaleza cuasi-hiperbólica de la ecuación. Dentro de este último grupos se puede ubicar el enfoque que se utiliza en este trabajo. A diferencia de los enfoques de este tipo, se desacopla el sistema de ecuaciones, en consecuencia, los términos de reacción no se resuelven en forma simultánea.

4.2 EVOLUCIÓN EN EL TIEMPO: ESQUEMA Θ DE SEPARACIÓN DE OPERADORES

Para la descripción del método, considérese el siguiente problema de valores iniciales

$$\begin{aligned} u(0) &= u^0 \\ \frac{du}{dt} + A(u, t) &= 0 \end{aligned} \tag{4.2}$$

En la ecuación (4.2), A es un operador diferencial, posiblemente no lineal, con la siguiente separación no trivial

$$A = A_1 + A_2 \tag{4.3}$$

donde A_1 y A_2 , son operadores más simples que A . De acuerdo con el esquema Θ introducido por Glowinski (2000), dada la descomposición (4.3), el problema (4.2), se resuelve de la siguiente manera

$$u(0) = u^0 \tag{4.4}$$

$$\frac{u^{k+\Theta} - u^k}{\Theta \Delta t} + A_1(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) + A_2(u^k, k\Delta t) = 0 \tag{4.5}$$

$$\frac{u^{k+1-\Theta} - u^{k+\Theta}}{(1-2\Theta)\Delta t} + A_2(u^{k+1-\Theta}, (k+1-\Theta)\Delta t) + A_1(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) = 0 \tag{4.6}$$

$$\frac{u^{k+1} - u^{k+1-\Theta}}{\Theta \Delta t} + A_1(u^{k+1}, (k+1)\Delta t) + A_2(u^{k+1-\Theta}, (k+1-\Theta)\Delta t) = 0 \tag{4.7}$$

El esquema (4.4)-(4.7), no debe de confundirse con el esquema θ convencional, definido de la siguiente manera

$$\frac{u^{k+1} - u^k}{\Delta t} + \theta A(u^{k+1}, (k+1)\Delta t) + (1-\theta)A(u^k, k\Delta t) = 0 \quad (4.8)$$

$$0 \leq \theta \leq 1$$

y que da lugar a los métodos explícito, implícito y de Crank-Nicholson para valores de $\theta = 0$, $\theta = 1$ y $\theta = 1/2$, respectivamente.

Se ha demostrado que el esquema (4.4)-(4.7) (veáse Glowinski, 2000) es de segundo orden e incondicionalmente estable, si una vez discretizado el problema lineal se obtiene una matriz positivo definida y si se utiliza el valor óptimo de Θ . Éste es $1-1/\sqrt{2}$

Otra característica del esquema definido por las ecuaciones (4.4)-(4.7) es que, si se define $A_1 = A$, y $A_2 = 0$, después de algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene el siguiente método de Runge-Kutta (Glowinski, 2000).

$$u(0) = u^0 \quad (4.10)$$

$$u^{k+\Theta} = u^k - \Theta \Delta t A(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) \quad (4.11)$$

$$u^{k+1} = u^k - \Delta t \left\{ \Theta A(u^{k+1}, (k+1)\Delta t) + (1-\Theta)A(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) \right\} \quad (4.12)$$

el esquema (4.10)-(4.12), es de segundo orden si se utiliza el valor óptimo de Θ , y es incondicionalmente estable.

Para el tratamiento de los términos fuente, considérese la siguiente definición:

$$A(u, t) = \mathcal{L}u - f_{\Omega}(x, t) \quad (4.13)$$

$$\mathcal{L}u = \mathcal{L}_1 u + \mathcal{L}_2 u \quad (4.14)$$

En las ecuaciones (4.13) y (4.14), $\mathcal{L}(\cdot)$ es un operador diferencial espacial y f_{Ω} , una función prescrita. En el contexto del esquema (4.4)-(4.7), se utiliza la siguiente separación

$$u(0) = u^0 \quad (4.15)$$

$$\frac{u^{k+\Theta} - u^k}{\Theta \Delta t} + A_1(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) + A_2(u^k, k\Delta t) = \tilde{\alpha} f_{\Omega}^{k+\Theta} + \tilde{\beta} f_{\Omega}^k \quad (4.16)$$

$$\frac{u^{k+1-\Theta} - u^{k+\Theta}}{(1-2\Theta)\Delta t} + A_2(u^{k+1-\Theta}, (k+1-\Theta)\Delta t) + A_1(u^{k+\Theta}, (k+\Theta)\Delta t) = \tilde{\alpha} f_{\Omega}^{k+\Theta} + \tilde{\beta} f_{\Omega}^{k+1-\Theta} \quad (4.17)$$

$$\frac{u^{k+1} - u^{k+1-\Theta}}{\Theta \Delta t} + A_1(u^{k+1}, (k+1)\Delta t) + A_2(u^k, (k+1-\Theta)\Delta t) = \tilde{\alpha} f_{\Omega}^{k+1} + \tilde{\beta} f_{\Omega}^{k+1-\Theta} \quad (4.18)$$

$\tilde{\alpha}$ y $\tilde{\beta}$ son factores de peso. Se debe cumplir que

$$\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} = 1 \quad (4.19)$$

Las selecciones más simples de $\tilde{\alpha}$ y $\tilde{\beta}$ son

$$\{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}\} = \{1, 0\} \quad (4.20a)$$

y

$$\{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}\} = \{0, 1\} \quad (4.20b)$$

Y sólo pueden utilizarse con el valor óptimo de Θ (veáse Glowinski, 2000). Por otra parte, cuando se tiene un 'mal operador', como es el caso de operadores con coeficientes discontinuos, se sugiere usar el siguiente esquema

$$u(0) = u^0 \quad (4.21)$$

$$\frac{u^{k+\Theta} - u^k}{\Theta \Delta t} + A_1(u, (k + \Theta)\Delta t) + A_2(u, k\Delta t) = 0 \quad (4.22)$$

$$\frac{\Theta u^{k+1-\Theta} - (1-\Theta)u^{k+\Theta} + (1-2\Theta)u^k}{\Theta(1-2\Theta)\Delta t} + A_2(u, (k+1-\Theta)\Delta t) = A_2(u, k\Delta t) \quad (4.23)$$

$$\frac{u^{k+1} - u^{k+1-\Theta}}{\Theta \Delta t} + A_1(u, (k+1)\Delta t) + A_2(u, (k+1-\Theta)\Delta t) = 0 \quad (4.24)$$

El costo computacional del esquema (4.21)-(4.24) es que en el segundo subintervalo se utilizan dos soluciones anteriores.

Para obtener el esquema de separación, considérese la forma general de la ecuación de flujo

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v^\alpha(u) \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + K_1 u + K_2(u) u = Q_1(u_j) + Q_2 \quad (4.25)$$

En la ecuación (4.25), Q_1 , contiene los términos de las variables u_j que permanecen fijas durante la solución de u , y Q_2 depende solamente de (x, t) . Si \mathcal{L}_1 y \mathcal{L}_2 se eligen de la siguiente manera

$$\mathcal{L}_1 u = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + v^\alpha(u) \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.26)$$

$$\mathcal{L}_2 u = K_1 u + K_2(u) u \quad (4.27)$$

De acuerdo con el esquema (4.4)-(4.7), se obtiene el siguiente problema

$$\begin{aligned} & u^{k+\Theta} - \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha(u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} - v^\alpha(u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} \right) \right\} \\ & = u^k + \Theta \Delta t \left\{ Q_1(u_j^k) + Q_2^k - K_1 u^k - K_2(u^k) u^k \right\} \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} & u^{k+1-\Theta} + \Theta \Delta t \left\{ K_1 u^{k+1-\Theta} + K_2(u^{k+1-\Theta}) u^{k+1-\Theta} \right\} = \\ & u^{k+\Theta} + \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha(u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} - v^\alpha(u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} \right) + Q_1(u_j^{k+1-\Theta}) + Q_2^{k+1-\Theta} \right\} \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} & u^{k+1} - \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha(u^{k+1}) \frac{\partial u^{k+1}}{\partial x} - v^\alpha(u^{k+1}) \frac{\partial u^{k+1}}{\partial x} \right) \right\} \\ & = u^{k+1-\Theta} + \Theta \Delta t \left\{ Q_1(u_j^{k+1-\Theta}) + Q_2^{k+1-\Theta} - K_1 u^{k+1-\Theta} - K_2(u^{k+1-\Theta}) u^{k+1-\Theta} \right\} \end{aligned} \quad (4.30)$$

4.3 TRATAMIENTO DE TÉRMINOS NO LINEALES: LINEALIZACIÓN DE PICARD

El esquema definido por las ecuaciones (4.28) a (4.30) es no lineal, por lo que antes de continuar con el desarrollo, conviene definir el tipo de linealización que habrá de utilizarse. El método de Picard se ha empleado para resolver problemas de flujo y transporte en sistemas de varias fases (veáse por ejemplo, Binning y Celia, 1999, Guarnaccia et al., 1995; Istok, 1989). El método de Newton también se ha utilizado (ver por ejemplo, Abriola y Pinder, 1985b). Sin embargo, puede ser muy costoso debido a que es necesaria la matriz jacobiana. En este trabajo se utiliza linealización de Picard; aplicando este método al problema (4.28)-(4.30), se transforma en

$$u^{k+\Theta, m+1} - \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right) - v^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right\} \quad (4.31)$$

$$= u^k + \Theta \Delta t \left\{ Q_1 (u_j^k) + Q_2^k - K_1 u^k - K_2 (u^k) u^k \right\}$$

$$u^{k+1-\Theta, m+1} + \Theta \Delta t \left\{ K_1 u^{k+1-\Theta, m+1} + K_2 (u^{k+1-\Theta, m}) u^{k+1-\Theta, m+1} \right\} = \quad (4.32)$$

$$u^{k+\Theta} + \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} \right) - v^\alpha (u^{k+\Theta}) \frac{\partial u^{k+\Theta}}{\partial x} + Q_1 (u_j^{k+1-\Theta}) + Q_2^{k+1-\Theta} \right\}$$

$$u^{k+1, m+1} - \Theta \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha (u^{k+1, m}) \frac{\partial u^{k+1, m+1}}{\partial x} \right) - v^\alpha (u^{k+1, m}) \frac{\partial u^{k+1, m+1}}{\partial x} \right\} \quad (4.33)$$

$$= u^{k+1-\Theta} + \Theta \Delta t \left\{ Q_1 (u_j^{k+1-\Theta}) + Q_2^{k+1-\Theta} - K_1 u^{k+1-\Theta} - K_2 (u^{k+1-\Theta}) u^{k+1-\Theta} \right\}$$

En las ecuaciones (4.31) a (4.33), el superíndice m indica el nivel de iteración. En el nivel m se utiliza el valor más reciente de la variable, se resuelve la ecuación y se compara con el valor en m+1, el proceso termina cuando se alcanza una tolerancia prescrita y se actualiza el valor de la variable en $k+\Theta, k+1-\Theta, k+1$, según sea el caso.

4.4 DISCRETIZACIÓN EN EL ESPACIO: COLOCACIÓN TREFFTZ-HERRERA

Como el problema se resolverá en una dimensión espacial, se introduce una partición en Ω definida en $[0, \ell]$. Esta consta de E subintervalos (x_{i-1}, x_i) y de $E+1$ nodos, con $i=0, \dots, E$, tal como se ilustra en la Figura 4.1. De acuerdo con ésta, $\partial\Omega$ es su frontera y Σ_i son las fronteras interiores.

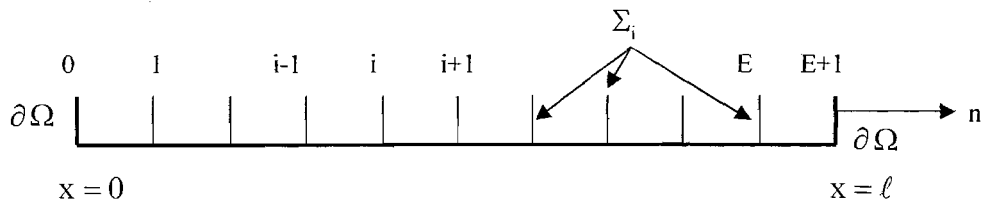


Figura 4.1 Ilustración esquemática de la discretización de la región Ω

MÉTODO DE ADJUNTO LOCALIZADO

Para la descripción del método, considérese el problema de valores a la frontera

$$\mathcal{L}u = f_{\Omega} \tag{4.34}$$

en donde Ω es la región de definición del problema, f_{Ω} una función prescrita en Ω y \mathcal{L} un operador diferencial lineal, cuyo adjunto formal es \mathcal{L}^*

De acuerdo con la teoría (Herrera 1985a y b, Herrera et al., 1985, Herrera, 1987, Herrera, 1995), existen dos principios variacionales asociados con cualquier problema de valores a la frontera. El primero se define en términos de los datos

$$\langle Pu, w \rangle - \langle Bu, w \rangle - \langle Ju, w \rangle = \langle f, w \rangle - \langle g, w \rangle - \langle j, w \rangle \quad \forall w \in D \tag{4.35}$$

y el segundo en términos de la información buscada

$$\langle Q^* u, w \rangle - \langle C^* u, w \rangle - \langle K^* u, w \rangle = \langle f, w \rangle - \langle g, w \rangle - \langle j, w \rangle \quad \forall w \in D \quad (4.36)$$

donde D es el espacio de las funciones admisibles; f , g y j son respectivamente, los valores prescritos del operador diferencial Pu , del operador de frontera Bu y del operador de salto Ju ; K^*u , C^*u y Q^*u son respectivamente, los promedios pesados, los valores complementarios de frontera, y la solución buscadas. Así, el principio variacional (4.36) es utilizado para analizar la información que contiene cualquier solución aproximada, misma que está formada por los promedios pesados en el interior de los elementos de la partición, los valores complementarios de frontera, y los valores de la solución y sus derivadas en los nodos de la partición. La equivalencia entre ambos principios (ecuaciones (4.35) y (4.36)) está garantizada cuando se cumple que

$$P - B - J = Q^* - C^* - K^* \quad (4.37)$$

que es una fórmula Green-Herrera para campos discontinuos (Herrera, 1995).

Los operadores en la ecuación (4.37) se definen como sigue

$$P = \langle Pu, w \rangle = \int_{\Omega} w \mathcal{L} u \, d\underline{x} \quad (4.38)$$

$$Q^* = \langle Q^* u, w \rangle = \int_{\Omega} u \mathcal{L}^* w \, d\underline{x} \quad (4.39)$$

$$B = \langle Bu, w \rangle = \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u, w) \, d\underline{x} \quad (4.40)$$

$$C^* = \langle C^* u, w \rangle = \int_{\partial\Omega} \mathcal{C}^*(u, w) \, d\underline{x} \quad (4.41)$$

$$J = \langle Ju, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) d\underline{x} \quad (4.42)$$

$$K^* = \langle K^*u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{K}^*(u, w) d\underline{x} = \sum_{i=1}^{E-1} \mathcal{K}^*(u, w)_i \quad (4.43)$$

Mientras que los términos del lado derecho de las ecuaciones (4.35) y (4.36) se definen por

$$\langle f, w \rangle = \int_{\Omega} w f_{\Omega} d\underline{x} \quad (4.44)$$

$$\langle g, w \rangle = \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u_{\partial}, w) d\underline{x} = \mathcal{B}(u_{\partial}, w) \Big|_0^c \quad (4.45)$$

$$\langle j, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u_{\Sigma}, w) d\underline{x} \quad (4.46)$$

La definición de adjunto formal requiere que el operador diferencial y su adjunto cumplan con la condición de que $w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w$ sea una divergencia (Herrera, 1995). Es decir

$$\int_{\Omega} \{w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w\} d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (4.47)$$

en la ecuación (4.47), \underline{n} es un vector normal, $\partial\Omega$ la frontera de la región y Σ las fronteras interiores. Los paréntesis cuadrados $-[]-$ indican el salto de la función. Aplicando el teorema de la divergencia a la ecuación (4.47) se obtiene

$$w \mathcal{L} u - u \mathcal{L}^* w = \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}(u, w) \quad (4.48)$$

Como $\underline{\mathcal{D}}(u, w)$ es una función bilineal se puede descomponer de la siguiente forma

$$\underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} = \mathcal{B}(u, w) - \mathcal{C}^*(u, w) \quad (4.49)$$

la forma que toman $\mathcal{B}(u, w)$ y $\mathcal{C}^*(u, w)$ depende de las condiciones de frontera del problema. Por otra parte, $-\left[\underline{\mathcal{D}}(u, w)\right] \cdot \underline{n}$ puede descomponerse en

$$-\left[\underline{\mathcal{D}}(u, w)\right] \cdot \underline{n} = \mathcal{J}(u, w) - \mathcal{K}^*(u, w) \quad (4.50)$$

Si los coeficientes son continuos, entonces (Herrera, 1995)

$$\left[\underline{\mathcal{D}}(u, w)\right] = \underline{\mathcal{D}}([u], \dot{w}) + \underline{\mathcal{D}}(\dot{u}, [w]) \quad (4.51)$$

en donde (\cdot) indica el promedio de la función. De acuerdo con las ecuaciones (4.50) y (4.51) se tiene que

$$\mathcal{J}(u, w) = -\underline{\mathcal{D}}([u], \dot{w}) \cdot \underline{n} \quad (4.52)$$

y

$$\mathcal{K}^*(u, w) = \underline{\mathcal{D}}(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n} \quad (4.53)$$

Como cualquier problema de valores a la frontera con saltos prescritos se formula mediante

$$\mathcal{L}u = f_{\Omega} \quad (4.34)$$

$$\mathcal{B}(u_{\partial}, \cdot) = g_{\partial}(\cdot) \quad (4.54)$$

$$\mathcal{J}(u_{\Sigma}, \cdot) = j_{\Sigma}(\cdot) \quad (4.55)$$

por lo tanto

$$\mathcal{B}(u, w) = \mathcal{B}(u_{\partial}, w) \quad \forall \underline{x} \in \partial \Omega \quad (4.56)$$

y

$$\mathcal{J}(u, w) = \mathcal{J}(u_{\Sigma}, w) \quad \forall \underline{x} \in \Sigma \quad (4.57)$$

Entonces u es una función que satisface las condiciones de frontera y los saltos prescritos, mientras que g_{∂} y j_{Σ} son funciones lineales con la siguiente propiedad

$$g_{\partial}(w) = \mathcal{B}(u_{\partial}, w); \quad (4.58a)$$

$$j_{\Sigma}(w) = \mathcal{J}(u_{\Sigma}, w) \quad (4.58b)$$

ECUACIÓN DE SEGUNDO ORDEN

Para continuar con el desarrollo del procedimiento, considérese la ecuación (4.31).

En este contexto, $\mathcal{L}u$ se define como

$$\mathcal{L}u = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right) + v^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \quad (4.59)$$

y f_Ω resulta ser

$$f_\Omega = \frac{u^k - u^{k+\Theta, m+1}}{\Theta \Delta t} + Q_1 (u_j^k) + Q_2^k - K_1 u^k - K_2 (u^k) u^k \quad (4.60)$$

La ecuación (4.59) es un operador elíptico de segundo orden, cuyo adjunto formal es

$$\mathcal{L}^*w = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right) - v^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \quad (4.61)$$

De acuerdo con las ecuaciones (4.47) y (4.48), en este caso

$$\mathcal{D}(u, w) = D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \left(u^{k+\Theta, m+1} \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} - w^{k+\Theta, m} \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right) + v^\alpha (u^{k+\Theta, m}) u^{k+\Theta, m+1} w^{k+\Theta, m} \quad (4.62)$$

Si las condiciones de frontera son de Dirichlet, entonces

$$\mathcal{B}(u, w) = \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} + v^\alpha (u^{k+\Theta, m}) w^{k+\Theta, m} \right) u^{k+\Theta, m+1} \quad (4.63)$$

haciendo uso de (4.49) se obtiene

$$\mathcal{C}^*(u, w) = D^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) w^{k+\Theta, m} \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \quad (4.64)$$

en cambio, si las condiciones de frontera son de Neuman se tiene que

$$\mathcal{B}(u, w) = -D^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) w^{k+\Theta, m} \frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \quad (4.65)$$

$$\mathcal{C}^*(u, w) = - \left(D^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} + v \left(u^{k+\Theta, m} \right) w^{k+\Theta, m} \right) u^{k+\Theta, m+1} \quad (4.66)$$

Siguiendo las definiciones (4.52) y (4.53) $J(u, w)$ y $K^*(u, w)$, toman la forma

$$\mathcal{J}(u, w) = D^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) \left(\dot{w}^{k+\Theta, m} \left[\frac{\partial u^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right] - \left[u^{k+\Theta, m+1} \right] \frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right) - v^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) \left[u^{k+\Theta, m+1} \right] \dot{w}^{k+\Theta, m} \quad (4.67)$$

$$\mathcal{K}^*(u, w) = D^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) \left(\dot{u}^{k+\Theta, m+1} \left[\frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right] - \left[w^{k+\Theta, m} \right] \frac{\partial \dot{u}^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} \right) + v^\alpha \left(u^{k+\Theta, m} \right) \dot{u}^{k+\Theta, m+1} \left[w^{k+\Theta, m} \right] \quad (4.68)$$

Si se utilizan funciones de peso de tal forma que

$$Qw = 0, \quad \mathcal{C}w = 0 \quad (4.69)$$

entonces

$$\mathcal{L}^*w = 0 \quad (4.70a)$$

$$C^*(w, \cdot) = 0 \quad (4.70b)$$

Si además los saltos prescritos son

$$[u^{k+\Theta, m+1}] = 0 \quad \text{y} \quad [w^{k+\Theta, m}] = 0 \quad (4.71)$$

entonces

$$K^*(\hat{u}, w) = \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right] \right) \hat{u}^{k+\Theta, m+1} \quad (4.72)$$

y la ecuación (4.36) se reduce a

$$-\langle K^* \hat{u}, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle \quad (4.73)$$

por el principio de completéz Trefftz-Herrera (Herrera, 1987, Herrera et al., 1985), se tiene que

$$\langle K^* \hat{u}, w \rangle = \langle K^* u, w \rangle \quad (4.74)$$

Haciendo uso de (4.74) y, de acuerdo con las ecuaciones (4.43) y (4.72) se obtiene el siguiente resultado:

$$\langle K^* u, w \rangle = \sum_{i=1}^{E-1} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right] \right)_i u_i^{k+\Theta, m+1} \quad (4.75)$$

Sustituyendo (4.60) y (4.75) en (4.36) el problema por resolver es

$$-\sum_{i=1}^{E-1} \left(D^\alpha (u^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right] \right)_i u_i^{k+\Theta, m+1} = \int_{\Omega} \left(\left(\frac{u^k - u^{k+\Theta, m+1}}{\Theta \Delta t} \right) + Q_1 (u_j^k) + Q_2 - K_1 u^k - K_2 (u^k) u^k \right) w^{k+\Theta, m} dx \quad (4.76)$$

4.5 CONSTRUCCIÓN DE LAS FUNCIONES DE PESO

Si las funciones de peso se definen de tal forma que satisfagan (ver Figura 4.2)

$$w_i^{k+\Theta, m}(x) = 0 \quad x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \quad (4.77)$$

entonces, (4.76) se transforma en el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} a_{1,1} u_1 + a_{1,2} u_2 &= b_1 \\ a_{i,i-1} u_{i-1} + a_{i,i} u_i + a_{i,i+1} u_{i+1} &= b_i \\ a_{E-2,E-1} u_1 + a_{E-1,E-1} u_{E-1} &= b_{E-1} \end{aligned} \quad (4.78)$$

que es un sistema tridiagonal, en donde

$$a_{i,i-1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m} dx - \Theta_1 D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w_i^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right]_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, E-2 \quad (4.79)$$

$$a_{i,i} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m} dx - \Theta_1 D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w_i^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right]_i \quad i = 1, 2, \dots, E-1 \quad (4.80)$$

$$a_{i,i+1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m} dx - \Theta_1 D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \left[\frac{\partial w_i^{k+\Theta, m}}{\partial x} \right]_{i+1} \quad i = 1, 2, \dots, E-2 \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned}
 b_1 = & \sum_{i=0}^2 u_i^k (1 - \Theta_1 K_1) \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_i^{k+\Theta, m} dx + \Theta_1 \int_0^2 \hat{\phi}_1 (Q_1(u_j^k) + Q_2^k - K_2(u^k)u^k) w_i^{k+\Theta, m} dx \\
 & + \Theta_1 \left(D^\alpha(u_i^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w_i^{k+\Theta, m+1}}{\partial x} + v^\alpha(u_i^{k+\Theta, m}) w_i^{k+\Theta, m} \right) u_0 \delta_1 \\
 & - \Theta_1 D^\alpha(u_i^{k+\Theta, m}) w_i^{k+\Theta, m} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0 \delta_2
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

$$\begin{aligned}
 b_i = & \sum_{i=i-1}^{i+1} u_i^k (1 - \Theta_1 K_1) \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m} dx \\
 & \Theta_1 \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i (Q_1(u_j^k) + Q_2^k - K_2(u^k)u^k) w_i^{k+\Theta, m} dx \quad i = 2, 3, \dots, E-2
 \end{aligned} \tag{4.83}$$

$$\begin{aligned}
 b_{E-1} = & \sum_{i=E-2}^{E-1} u_i^k (1 - \Theta_1 K_1) \int_0^2 \hat{\phi}_{E-1} w_{E-1}^{k+\Theta, m} dx \\
 & + \Theta_1 \int_0^2 \hat{\phi}_{E-1} (Q_1(u_j^k) + Q_2^k - K_2(u^k)u^k) w_{E-1}^{k+\Theta, m} dx - \Theta_1 D^\alpha(u_{E-1}^{k+\Theta, m}) w_{E-1}^{k+\Theta, m} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{E-1} \delta_2 \\
 & + \Theta_1 \left(D(u_{E-1}^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w_{E-1}^{k+\Theta, m}}{\partial x} + v(u_{E-1}^{k+\Theta, m}) w_{E-1}^{k+\Theta, m} \right) u_E \delta_1
 \end{aligned} \tag{4.84}$$

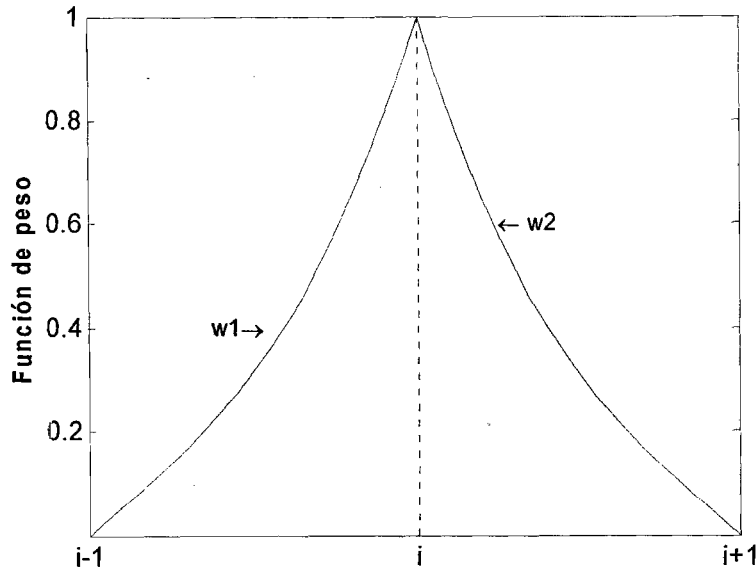


Figura 4.2. Funciones de peso utilizadas.

En las ecuaciones (4.83) y (4.84), δ_1 vale uno si las condiciones son de Dirichlet y cero si son de Neuman. De igual forma, δ_2 vale uno si las condiciones son de Neuman y cero si son de Dirichlet.

Para resolver el sistema, es necesario definir de forma más específica, las funciones de peso y de base para poder evaluar las derivadas, integrales y saltos de las ecuaciones (4.79) a (4.84). Para construir las funciones de peso, se utilizan polinomios de grado G y se definen de la siguiente manera

$$w_i^{k+\theta, m}(x) = \begin{cases} w_1^{k+\theta, m}(x); & x_{i-1} < x < x_i \\ w_2^{k+\theta, m}(x); & x_i < x < x_{i+1} \end{cases} \quad (4.85)$$

$$w_i^{k+\theta, m}(x_i) = 1 \quad (4.86a)$$

$$w_i^{k+\theta, m}(x_{i-1}) = w_i^{k+\theta, m}(x_{i+1}) = 0 \quad (4.86b)$$

$$w1_i^{k+\theta,m}(x) = \sum_{j=1}^G P_{1j}^i \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right)^j \quad (4.87a)$$

$$w2_i^{k+\theta,m}(x) = \sum_{j=1}^G P_{2j}^i \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^j \quad (4.87b)$$

Cuando se utiliza colocación, se requieren n puntos de colocación, n se define por

$$n = G - 1 \quad (4.88)$$

Si la colocación es ortogonal -como en este trabajo-, los puntos de colocación son las raíces del polinomio de Legendre de grado n. En este trabajo se seleccionaron polinomios de tercer grado, entonces (4.87a y b) toman la forma:

$$w1_i^{k+\theta,m}(x) = \sum_{j=1}^3 P_{1j}^i \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right)^j \quad (4.89a)$$

$$w2_i^{k+\theta,m}(x) = \sum_{j=1}^3 P_{2j}^i \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \right)^j \quad (4.89b)$$

Y los puntos de colocación son

$$\xi_{1\pm} = \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (4.90a)$$

$$\xi_{2\pm} = \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (4.90b)$$

Para evaluar las integrales cuyo integrando involucra a alguna función, se definen funciones de base, de tal forma que

$$u \approx u_i \hat{\phi}_i$$

donde

$$\hat{\phi}_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (4.91)$$

Si el integrando es no lineal, como es el caso de $K_2(u)$, entonces la integral se evalúa numéricamente. Por consistencia con el número de puntos de colocación empleados en la discretización espacial, se emplea cuadratura gaussiana con dos puntos. De acuerdo con las ecuaciones (4.59) y (4.87), la forma aproximada de la ecuación adjunta homogénea es

$$\mathcal{L}^* w_1^{k+\theta, m} = - \sum_{j=1}^3 p_{1j}^i \left\{ \begin{array}{l} D^\alpha (u_i^{k+\theta, m}) (j(j-1)/h^2) (\xi_{1\pm}/h)^{j-2} \\ + v^\alpha (u_i^{k+\theta, m}) (j/h) (\xi_{1\pm}/h)^{j-1} \end{array} \right\} \quad (4.92)$$

$$\mathcal{L}^* w_2^{k+\theta, m} = - \sum_{j=1}^3 p_{2j}^i \left\{ \begin{array}{l} D^\alpha (u_i^{k+\theta, m}) (j(j-1)/h^2) (\xi_{2\pm}/h)^{j-2} \\ - v^\alpha (u_i^{k+\theta, m}) (j/h) (\xi_{2\pm}/h)^{j-1} \end{array} \right\} \quad (4.93)$$

haciendo uso de las ecuaciones (4.70a) y (4.86a) los coeficientes de los polinomios $-p_{k,j}$ se determinan al resolver los siguientes sistemas de ecuaciones

$$\begin{aligned} p_{11}^i + p_{12}^i + p_{13}^i &= 1 \\ c_{21} p_{11}^i + c_{22} p_{12}^i + c_{23} p_{13}^i &= 0 \\ c_{31} p_{11}^i + c_{32} p_{12}^i + c_{33} p_{13}^i &= 0 \end{aligned} \quad (4.94)$$

$$\begin{aligned}
 p_{21}^i + p_{22}^i + p_{23}^i &= 1 \\
 d_{21}p_{21}^i + d_{22}p_{22}^i + d_{23}p_{23}^i &= 0 \\
 d_{31}p_{21}^i + d_{32}p_{22}^i + d_{33}p_{23}^i &= 0
 \end{aligned} \tag{4.95}$$

Los sistemas de ecuaciones (4.94) y (4.95), se representan en forma matricial mediante

$$\tilde{C}(u^{k+\Theta, m}) \underline{p}_1^{k+\Theta, m} = \underline{b}_0 \tag{4.96}$$

$$\tilde{D}(u^{k+\Theta, m}) \underline{p}_2^{k+\Theta, m} = \underline{b}_0 \tag{4.97}$$

donde

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ c_{2,1} & c_{2,2} & c_{2,3} \\ c_{3,1} & c_{3,2} & c_{3,3} \end{bmatrix}, \tag{4.98a}$$

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ d_{2,1} & d_{2,2} & d_{2,3} \\ d_{3,1} & d_{3,2} & d_{3,3} \end{bmatrix}, \tag{4.98b}$$

$$\underline{p}_k = [p_{k1} \quad p_{k2} \quad p_{k3}]^T, \quad k = 1, 2 \tag{4.99}$$

$$\underline{b}_0 = [1 \quad 0 \quad 0]^T. \tag{4.99}$$

Los coeficientes $c_{i,j}$ y $d_{i,j}$ de los sistemas de ecuaciones (4.94) y (4.95), se definen de la siguiente manera:

$$c_{ij}^i = d_{ij}^i = 1 \tag{4.100}$$

$$c_{21}^i = c_{31}^i = -v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) / h \quad (4.101)$$

$$c_{22}^i = -2/h^2 (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1-} + D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})) \quad (4.102)$$

$$c_{23}^i = -(3/h^3) (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1-}^2 + 2D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1-}) \quad (4.103)$$

$$c_{32}^i = -2/h^2 (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1+} + D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})) \quad (4.104)$$

$$c_{33}^i = -(3/h^3) (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1+}^2 + 2D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{1+}) \quad (4.105)$$

$$d_{21}^i = d_{31}^i = v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) / h \quad (4.106)$$

$$d_{22}^i = 2/h^2 (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2-} - D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})) \quad (4.107)$$

$$d_{23}^i = (3/h^3) (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2-}^2 - 2D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2-}) \quad (4.108)$$

$$d_{32}^i = 2/h^2 (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2+} - D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})) \quad (4.109)$$

$$d_{33}^i = (3/h^3) (v^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2+}^2 - 2D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m}) \xi_{2+}) \quad (4.110)$$

Por otra parte, los coeficientes $a_{i,j}$ se definen mediante

$$a_{i,i-1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m+l} dx - \frac{\Theta_i D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})}{h} p_{11}^i \quad i = 2, 3, \dots, E-1 \quad (4.111)$$

$$a_{i,i} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m+1} dx + \frac{\Theta_i D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})}{h^2} \sum_{j=1}^3 j (p_{1j}^i + p_{2j}^i) \quad i = 1, 2, \dots, E-1 \quad (4.112)$$

$$a_{i,i+1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta, m+1} dx - \frac{\Theta_i D^\alpha (u_i^{k+\Theta, m})}{h^2} p_{2i}^i \quad i = 1, 2, \dots, E-2 \quad (4.113)$$

en las ecuaciones (4.96) a (4.109),

$$h = x_i - x_{i-1} = x_{i+1} - x_i, \quad y$$

$$\Theta_i = \Theta \Delta t$$

4.6 SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS

Aplicando el esquema de separación de operadores a los resultados anteriores, se tiene que para la ecuación (4.25), en cada intervalo de tiempo se resuelven los siguientes subproblemas

$$\tilde{C}(u^{k+\Theta,m})p_1^{k+\Theta,m} = b_0 \quad (4.96)$$

$$\tilde{D}(u^{k+\Theta,m})p_2^{k+\Theta,m} = b_0 \quad (4.97)$$

$$A_1(u^{k+\Theta,m})u^{k+\Theta,m+1}((k+\Theta)\Delta t) = b_1(k\Delta t) \quad (4.114)$$

$$A_2(u^{k+1-\Theta,m})u^{k+1-\Theta,m+1}((k+1-\Theta)\Delta t) = b_2((k+\Theta)\Delta t) \quad (4.115)$$

$$A_3(u^{k+1,m})u^{k+1,m+1}((k+1)\Delta t) = b_3((k+1-\Theta)\Delta t) \quad (4.116)$$

Los coeficientes de la matriz A_1 están determinados por las ecuaciones (4.111) a (4.113) y los del vector b_1 , por las ecuaciones (4.82) a (4.84). En los coeficientes de la matriz A_3 y b_3 , sólo cambian los superíndices que indican el nivel de avance en el tiempo. Es decir,

$$k + \Theta \rightarrow k + 1, \quad y$$

$$k \rightarrow k + 1 - \Theta$$

Los coeficientes de la matriz A_2 y del vector b_2 , se definen por

$$a_{ij} = \int_{x=i-1}^{x=i+1} \hat{\phi}_i \left\{ 1 + \Theta_2 \left(K_1 + K_2 \left(u^{k+1-\Theta,m} \right) \right) \right\} w_i^{k+1-\Theta,m} dx \quad (4.117)$$

$$i = 1, 2, \dots, E-1 \quad j = i-1, i, i+1$$

$$b_1 = u_1^{k+\Theta} \left\{ \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1^{k+\Theta} dx - \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_1^{k+\Theta})}{h^2} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j}^1 + p_{2j}^1) \right\} \quad (4.118)$$

$$u_2^{k+\Theta} \left\{ \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1^{k+\Theta} dx + \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_1^{k+\Theta})}{h} p_{21}^1 \right\}$$

$$+ \Theta_2 \int_0^2 \hat{\phi}_1 (Q_1(u_j^k) + Q_2^k) w_1^{k+\Theta} dx$$

$$+ \Theta_2 \left(D^\alpha (u_1^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w_1^{k+\Theta}}{\partial x} + v(u_1^{k+\Theta, m}) w_1^{k+\Theta} \right) u_0 \delta_1 - \Theta_2 D(u_1^{k+\Theta}) w_1^{k+\Theta} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0 \delta_2$$

$$b_i = u_{i-1}^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta} dx + \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_i^{k+\Theta})}{h} p_{1i}^i \right\} \quad i = 2, 3, \dots, E-2 \quad (4.119)$$

$$+ u_i^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta} dx - \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_i^{k+\Theta})}{h^2} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j}^i + p_{2j}^i) \right\}$$

$$+ u_{i+1}^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i^{k+\Theta} dx + \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_i^{k+\Theta})}{h} p_{2i}^i \right\} + \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i \Theta_2 \{Q_1(u_j^k) + Q_2^k\} w_i^{k+\Theta} dx$$

$$b_{E-1} = u_{E-2}^{k+\Theta} \left\{ \int_{E-2}^E \hat{\phi}_{E-1} w_{E-1}^{k+\Theta} dx + \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_{E-1}^{k+\Theta})}{h} p_{1i}^{E-1} \right\} \quad (4.120)$$

$$+ u_{E-1}^{k+\Theta} \left\{ \int_{E-2}^E \hat{\phi}_{E-1} w_{E-1}^{k+\Theta} dx - \frac{\Theta_2 D^\alpha (u_{E-1}^{k+\Theta})}{h^2} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j}^{E-1} + p_{2j}^{E-1}) \right\}$$

$$+ \Theta_2 \int_{E-2}^E \hat{\phi}_{E-1} (Q_1(u_j^k) + Q_2^k) w_{E-1}^{k+\Theta} dx$$

$$+ \Theta_2 \left(D^\alpha (u_{E-1}^{k+\Theta, m}) \frac{\partial w_{E-1}^{k+\Theta}}{\partial x} + v(u_{E-1}^{k+\Theta, m}) w_{E-1}^{k+\Theta} \right) u_E \delta_1 - \Theta_2 D(u_{E-1}^{k+\Theta}) w_{E-1}^{k+\Theta} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{E-1} \delta_2$$

De acuerdo con el esquema (4.112)-(4.114), en el primer y el tercer subintervalos, el operador advección-difusión se resuelve de forma implícita, mientras que en el segundo se resuelve de manera explícita. Si

$$u^{(\cdot),m} \rightarrow x^m, \quad y$$

$$u^{(\cdot),m+1} \rightarrow x^{m+1}$$

En cada subintervalo de tiempo, los sistemas de ecuaciones a resolver son de la forma

$$\tilde{C}(x^m)p_1^m = b_0 \quad (4.121a)$$

$$\tilde{D}(x^m)p_2^m = b_0 \quad (4.121b)$$

$$A(x^m)x^{m+1} = b \quad (4.121c)$$

A es la matriz de coeficientes y el sistema es lineal en $m+1$. Siguiendo el método de Picard, para resolver el sistema se construyen una secuencia de soluciones basadas cada una en la solución anterior. El procedimiento inicia especificando una solución inicial $[x^0]$. Desde que $m=0,1,2,\dots$, hasta que se alcanza una tolerancia prescrita:

1. Se construyen

$$\begin{aligned} &\tilde{C}(x^m) \\ &\tilde{D}(x^m) \\ &A(x^m) \end{aligned} \quad (4.122)$$

2. Se resuelven los sistemas de ecuaciones lineales

$$\tilde{C}(x^m)p_1^m = b_0$$

$$\tilde{D}(x^m)p_2^m = b_0$$

$$A(x^m)x^{m+1} = b$$

(4.123)

3. Se construye el vector residual

$$R^{m+1} = b - A(x^m)x^{m+1} \quad (4.124)$$

o

$$R^{m+1} = x^{m+1} - x^m$$

4. Se hace la prueba de convergencia

$$\left| \max[r_i^{m+1}] \right| < \varepsilon \quad (4.125)$$

El proceso iterativo termina si la desigualdad (4.125) se satisface, en caso contrario

$$m+1 \rightarrow m \quad (4.126)$$

y se reinicia el ciclo que comienza en el punto 1, (ecuaciones (4.122)).

Como en el segundo subintervalo de tiempo, los coeficientes v^α y D^α dependen de la solución en $k+\Theta$, en el esquema iterativo no se considera la solución de las matrices \tilde{C} y \tilde{D} .

CAPÍTULO 5

EJEMPLOS NUMÉRICOS

Para analizar las propiedades de la aproximación numérica expuesta en el capítulo anterior y evaluar si ésta es apropiada para resolver un sistema de transporte en sistemas de varias fases, se resolvieron problemas más sencillos, ya que esto permite comparar los resultados obtenidos con la solución exacta o analítica, según sea el caso, y con procedimientos convencionales como elemento finito y diferencias finitas.

5.1 TRANSPORTE EN EL ESTADO ESTACIONARIO

Se resolvió la ecuación de transporte para una especie en una fase, con coeficientes constantes y se tomaron en cuenta tanto el caso con reacción química como en el que no hay reacción química. Como no hay evolución en el tiempo, no se aplica el esquema de descomposición de operadores. Se resolvió la ecuación

$$D^w \frac{d^2 u}{dx^2} - v^w \frac{du}{dx} - K^w u = 0 \quad (5.1)$$

sujeta a las condiciones

$$\begin{aligned} u(0, t) &= u_0 = 10 \\ u(\ell, t) &= u_\ell = 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

y con los siguientes parámetros

Sin reacción	Sin reacción	Caso reactivo	Caso reactivo
Pe = 10	Pe = 5	Pe = 10	Pe = 5
$D^w = 0.2$	$D^w = 0.2$	$D^w = 0.2$	$D^w = 0.2$
$v^w = 1$	$v^w = 1$	$v^w = 1$	$v^w = 1$
$K^w = 0$	$K^w = 0$	$K^w = 0.01$	$K^w = 0.01$
$\ell = 100$	$\ell = 100$	$\ell = 100$	$\ell = 100$
E = 50	E = 100	E = 50	E = 100

$$a_{i,i} = \frac{D^w}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{11} + p_{12}) \quad i = 1, 2, \dots, E-1 \quad (5.6b)$$

$$a_{i,i+1} = -\frac{D^w}{h} p_{21} \quad i = 1, 2, \dots, E-2 \quad (5.6c)$$

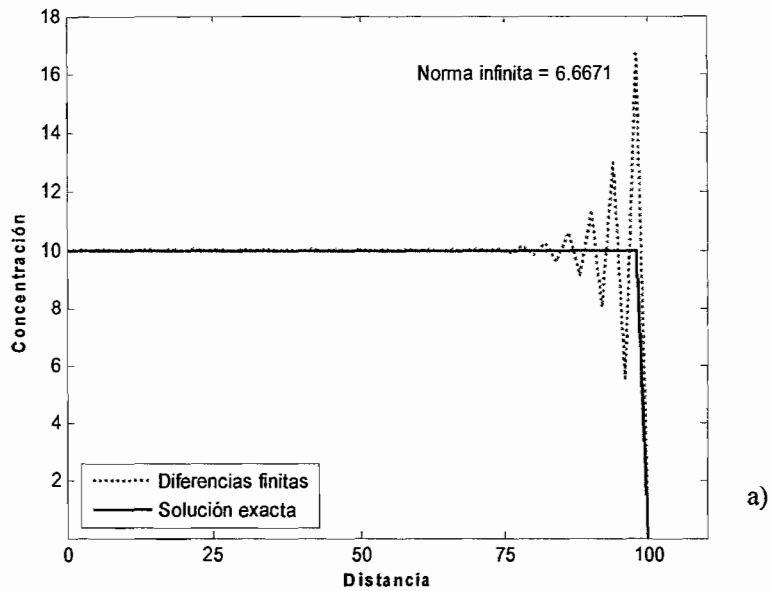
y las entradas del vector \underline{b} son

$$b_1 = \frac{D}{h} p_{11} u_0 \quad (5.7a)$$

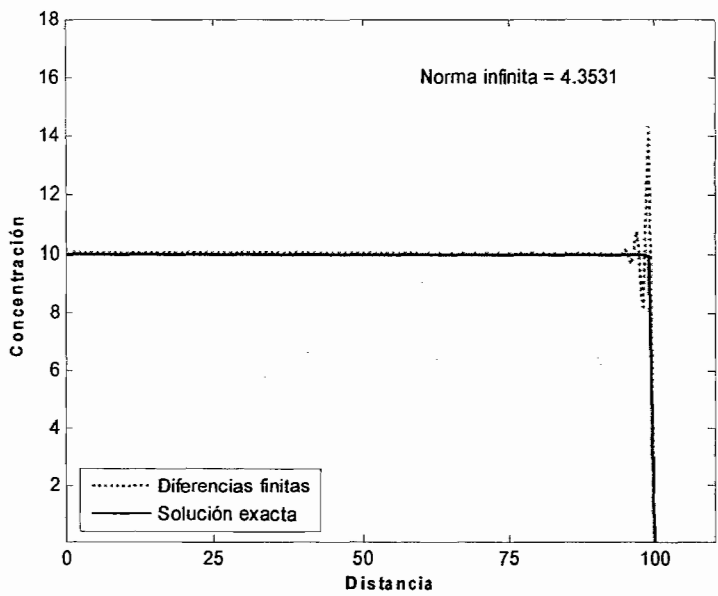
$$b_i = 0 \quad i = 2, 3, \dots, E-1 \quad (5.7b)$$

En este caso, la solución exacta se compara con los resultados obtenidos con los métodos de colocación T-H, diferencias finitas y elemento finito. Como en este último se usó el método de Galerkin con funciones lineales, cuando no ocurren reacciones químicas, se obtiene la misma aproximación que con el método de diferencias finitas. En la Figura 5.1 se muestra la comparación de la solución exacta con la aproximación obtenida con el método de diferencias finitas en el caso en que no existen reacciones químicas, para números de Peclet 10 y 5. Debido a que en la frontera derecha se tiene una condición homogénea de Dirichlet, se forma un frente y puede observarse que con este procedimiento se producen oscilaciones espurias, aún con números de Peclet conservadores. Por otra parte, en la Figura 5.2, se presentan los resultados obtenidos para este mismo problema con el método de colocación T-H. En este caso, se produce un suavizamiento del frente. Sin embargo, la norma infinita es menor para este procedimiento y muestra un mejor comportamiento cuando hay una reducción en el número de Peclet.

En las Figuras 5.3, 5.4 y 5.5 se muestran los resultados obtenidos para la ecuación del transporte reactivo en el estado estacionario obtenidos con los métodos de diferencias finitas, elemento finito y colocación T-H, respectivamente. En todos estos ejemplos se puede ver una reducción en los valores que toma la norma infinita. Con los métodos de diferencias finitas y elemento finito se obtienen resultados muy similares y pese a la reducción en la norma, se mantienen las oscilaciones en la vecindad del frente. De manera consistente, la aproximación mejora cuando se utiliza el método de colocación T-H.



a)



b)

Figura 5.1 Resultados obtenidos usando el método de diferencias finitas para la ecuación del transporte sin reacción química en el estado estacionario, a) $Pe = 10$; y b) $Pe = 5$.

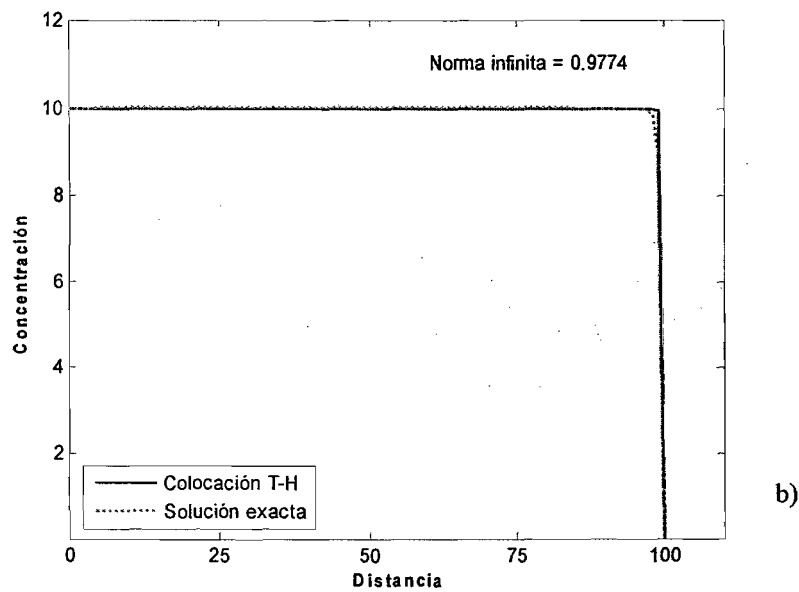
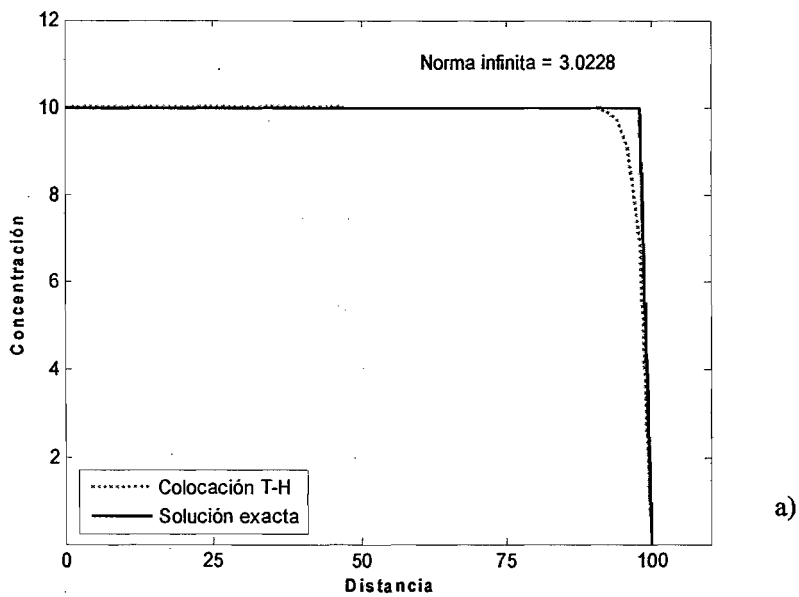


Figura 5.2 Resultados obtenidos usando el método de colocación T-H para la ecuación del transporte sin reacción química en el estado estacionario, a) $Pe = 10$; y b) $Pe = 5$.

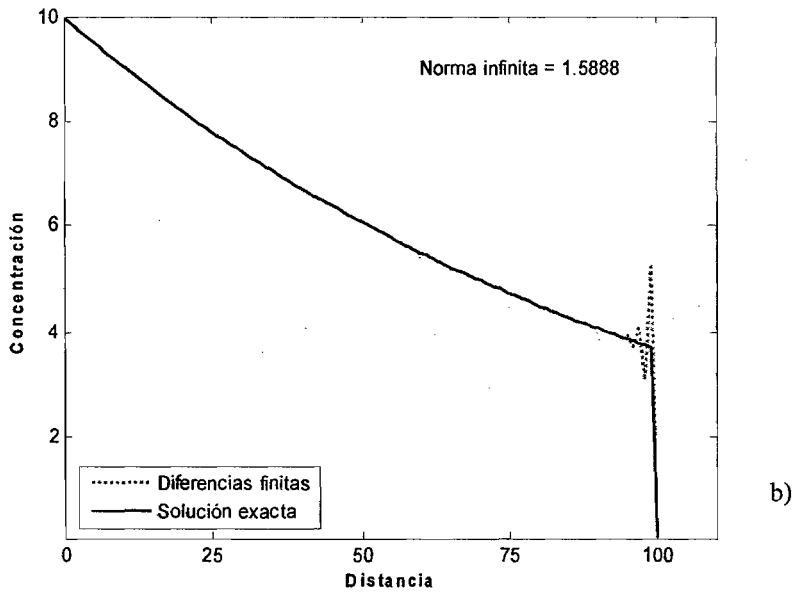
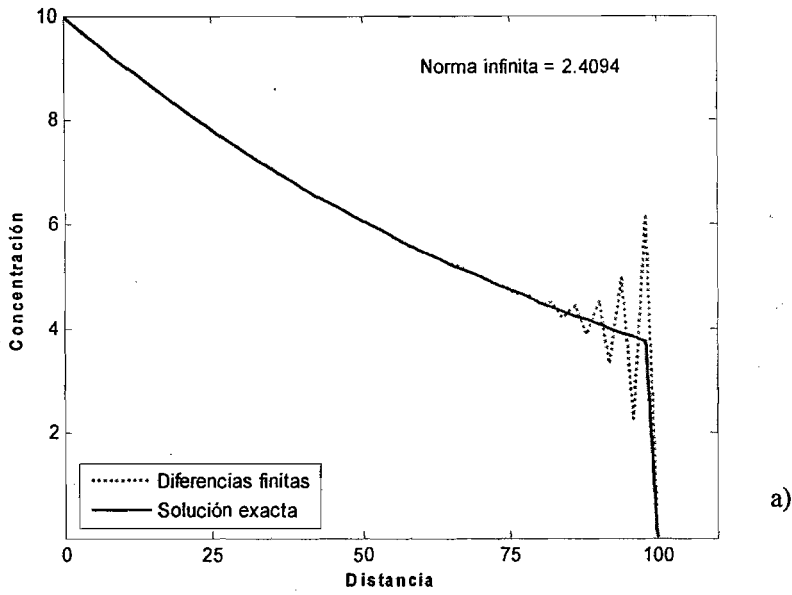


Figura 5.3 Resultados obtenidos usando el método de diferencias finitas para la ecuación del transporte reactivo en el estado estacionario, a) $Pe = 10$; y b) $Pe = 5$.

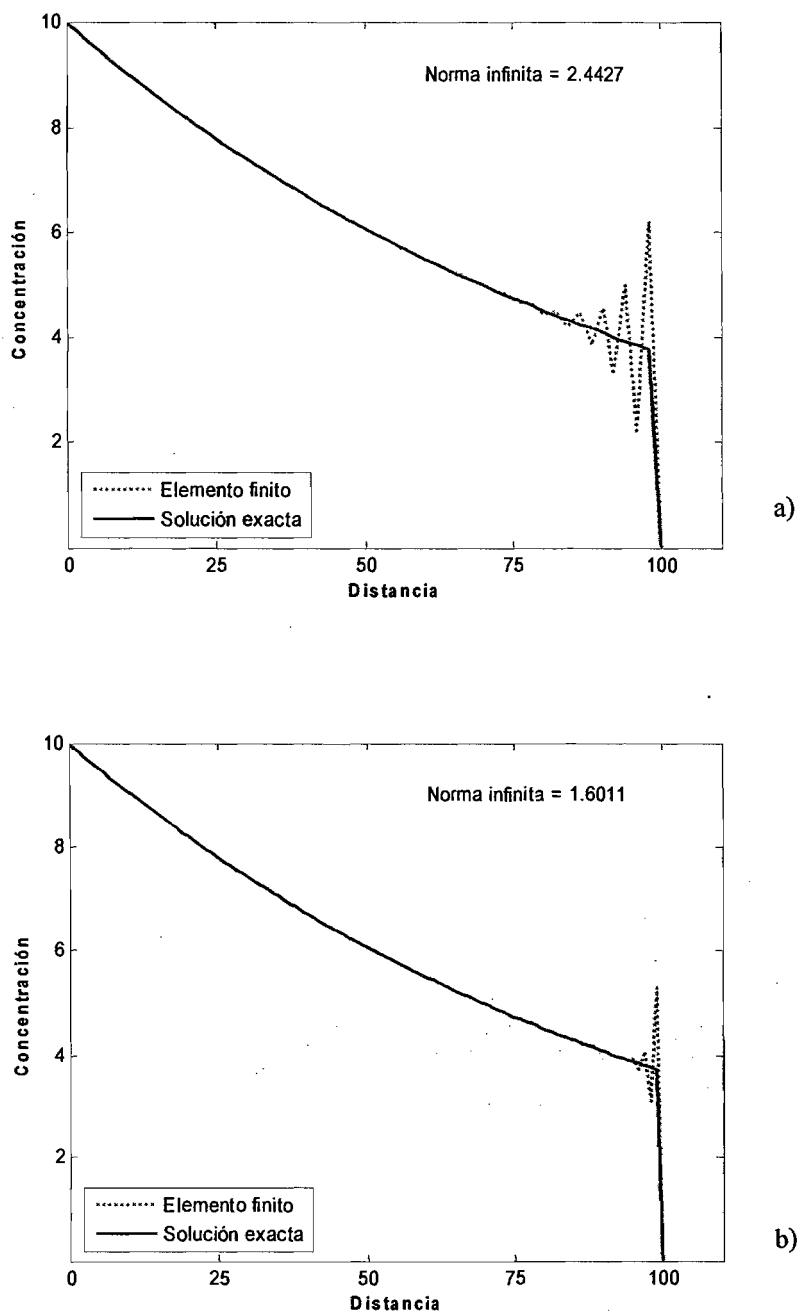


Figura 5.4 Resultados obtenidos usando el método de elemento finito para la ecuación del transporte reactivo en el estado estacionario, a) $Pe = 10$; y b) $Pe = 5$.

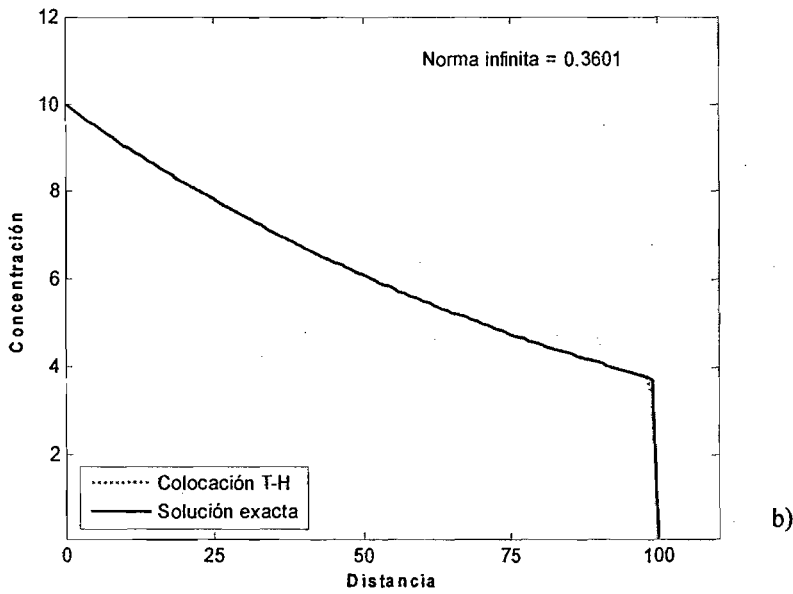
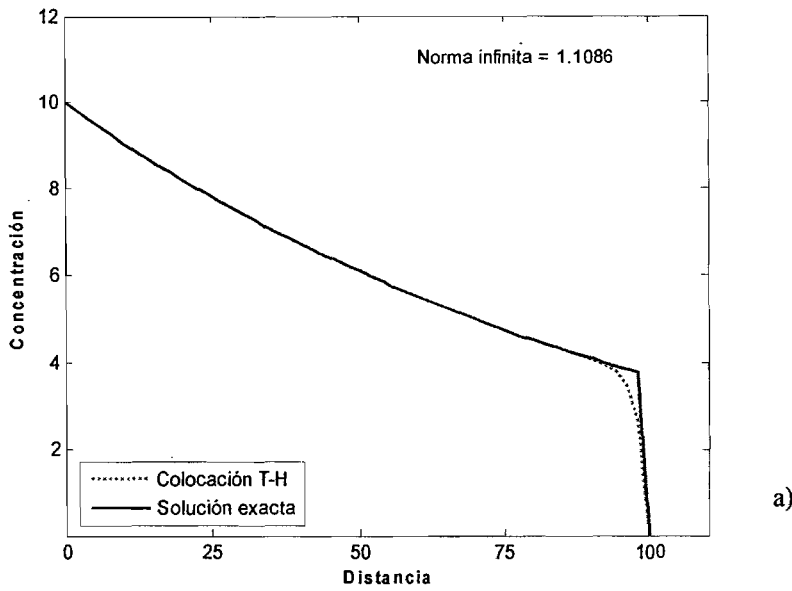


Figura 5.5 Resultados obtenidos con el método de colocación T-H para la ecuación del transporte reactivo en el estado estacionario, a) $Pe = 10$; y b) $Pe = 5$.

5.2 TRATAMIENTO DE TÉRMINOS FUENTE

Para saber si la presencia de términos fuente, es consistente con el grado de precisión, se resolvió la ecuación

$$D \frac{d^2 u}{dx^2} = f \quad (5.8)$$

sujeta a las condiciones

$$u(0, t) = u_0 = 10 \quad (5.9)$$

$$u(\ell, t) = 0$$

Y con los siguientes parámetros

$$D = 0.5 \quad f = -0.0025, \quad \ell = 100$$

La solución exacta de (5.8), sujeta a las condiciones (5.9) es

$$u(x) = u_0 \left(1 - \frac{x}{\ell}\right) + \frac{f}{2D} (x^2 - x\ell), \quad (5.10)$$

su derivada es

$$\frac{du}{dx} = \frac{f}{D} \left(x - \frac{\ell}{2}\right) - \frac{u_0}{\ell}, \quad (5.11)$$

En este caso las funciones de peso son lineales, por lo que

$$p_{11} = p_{21} = 1, \quad y \tag{5.12}$$

$$p_{12} = p_{22} = p_{13} = p_{23} = 0$$

Se decidió resolver esta ecuación porque es la forma más sencilla que puede adoptar la ecuación para la presión del agua (ecuación (3.37)) en el problema completo. A diferencia de lo que hasta aquí se ha presentado, se seleccionaron funciones de peso de tal forma que $[w] \neq 0$. De esta forma se obtiene el valor de la función y su derivada en los nodos de la discretización, (ver Herrera, 1987). Esta clase de aproximación se requiere, ya que de acuerdo con las ecuaciones (3.15) a (3.20), es necesaria la derivada de la presión para calcular la velocidad de fase.

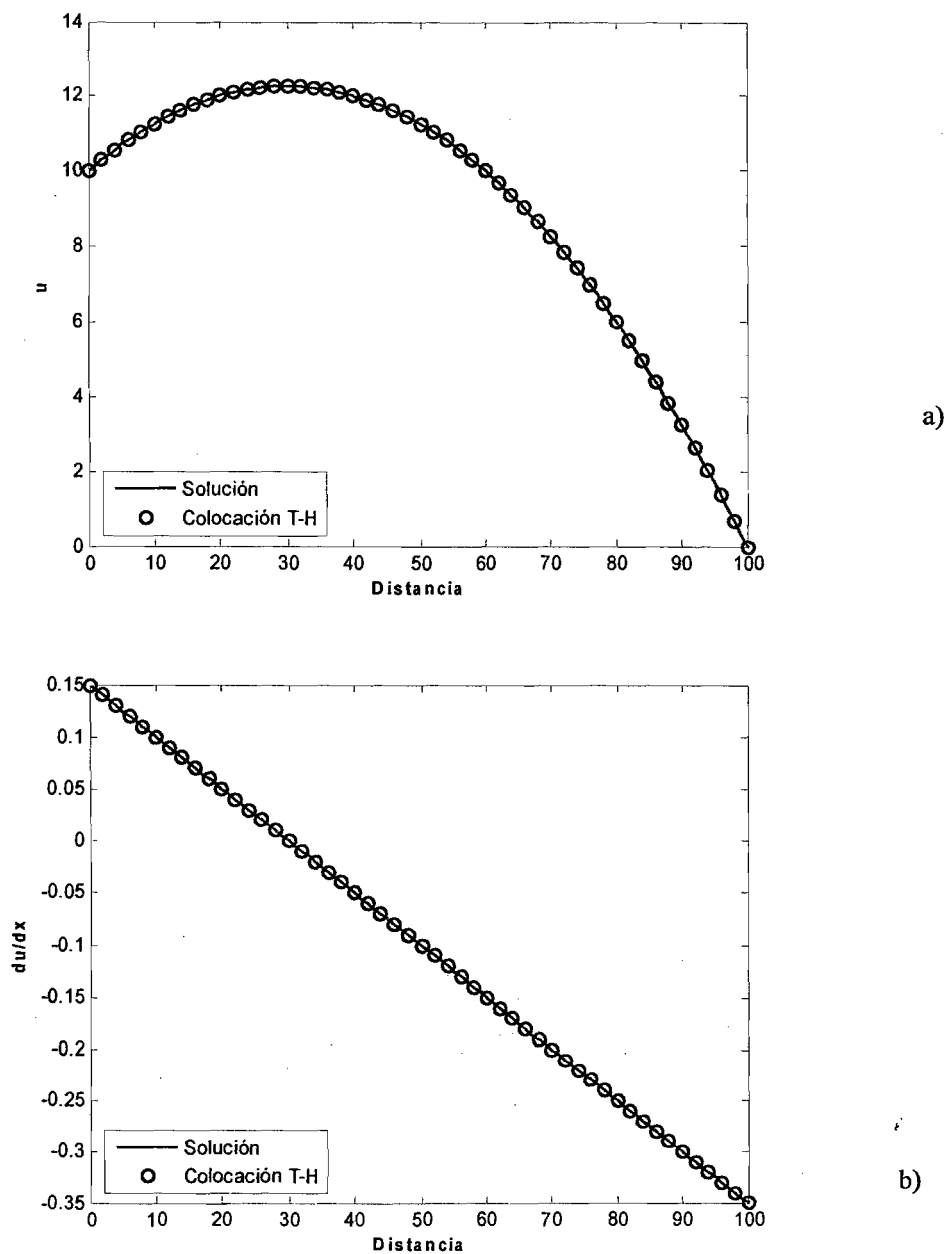


Figura 5.6 Resultados obtenidos para la ecuación 5.8. a) Valor de la función, b) valor de la derivada.

De acuerdo con los resultados mostrados en las gráficas de la Figura 5.6, es claro que vía los términos fuente, no se introduce algún error adicional en la solución. Sin embargo, la aproximación de la derivada es menos precisa cuando $\Delta x > 1$.

5.3 TRATAMIENTO DE COEFICIENTES DISCONTINUOS.

Al igual que en el problema anterior, y como los coeficientes de las ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte en sistemas de varias fases son variables, se desea saber si varía o no la precisión del método de discretización espacial al incluir esta clase de coeficientes. La estrategia que se adoptó fue la de considerar coeficientes localmente continuos. Se resolvió la siguiente ecuación diferencial:

$$x^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + x \frac{du}{dx} + 4u = 1 \quad \text{en}[1, \ell] \quad (5.13)$$

sujeta a las condiciones

$$\begin{aligned} u(1, t) &= 0 \\ u(\ell, t) &= 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

y cuya solución exacta es

$$u(x) = \frac{1}{4} \left\{ (1 - \cos(2 \ln x)) + \left(\frac{\cos(2 \ln \ell) - 1}{\sin(2 \ln \ell)} \right) \sin(2 \ln x) \right\} \quad (5.15)$$

Las matrices \tilde{C} y \tilde{D} , en este caso toman la forma

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{(4\xi_{1-} - x_i)}{h} & \frac{(4\xi_{1-}^2 - 2x_i\xi_{1-} + 2x_i^2)}{h^2} & \frac{(4\xi_{1-}^3 - 3x_i\xi_{1-}^2 + 6x_i^2\xi_{1-})}{h^3} \\ \frac{(4\xi_{1+} - x_i)}{h} & \frac{(4\xi_{1+}^2 - 2x_i\xi_{1+} + 2x_i^2)}{h^2} & \frac{(4\xi_{1+}^3 - x_i\xi_{1+}^2 + 6x_i^2\xi_{1+})}{h^3} \end{bmatrix} \quad (5.16a)$$

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{(4\xi_{2-} - x_i)}{h} & \frac{(4\xi_{2-}^2 - 2x_i\xi_{2-} + 2x_i^2)}{h^2} & \frac{(4\xi_{2-}^3 - 3x_i\xi_{2-}^2 + 6x_i^2\xi_{2-})}{h^3} \\ \frac{(4\xi_{2+} - x_i)}{h} & \frac{(4\xi_{2+}^2 - 2x_i\xi_{2+} + 2x_i^2)}{h^2} & \frac{(4\xi_{2+}^3 - x_i\xi_{2+}^2 + 6x_i^2\xi_{2+})}{h^3} \end{bmatrix} \quad (5.16b)$$

Y los coeficientes de la matriz A en el sistema de ecuaciones algebraicas se definen mediante

$$a_{i,i-1} = \frac{x_i^2}{h} p_{11}^i \quad (5.17a)$$

$$a_{i,i} = -\frac{x_i^2}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j}^i + p_{2j}^i) \quad (5.17b)$$

$$a_{i,i+1} = \frac{x_i^2}{h} p_{21}^i \quad (5.17c)$$

mientras que el lado derecho del sistema es

$$b_i = \int_{i-1}^{i+1} w_i dx \quad i = 1, 2, \dots, E-1 \quad (5.18)$$

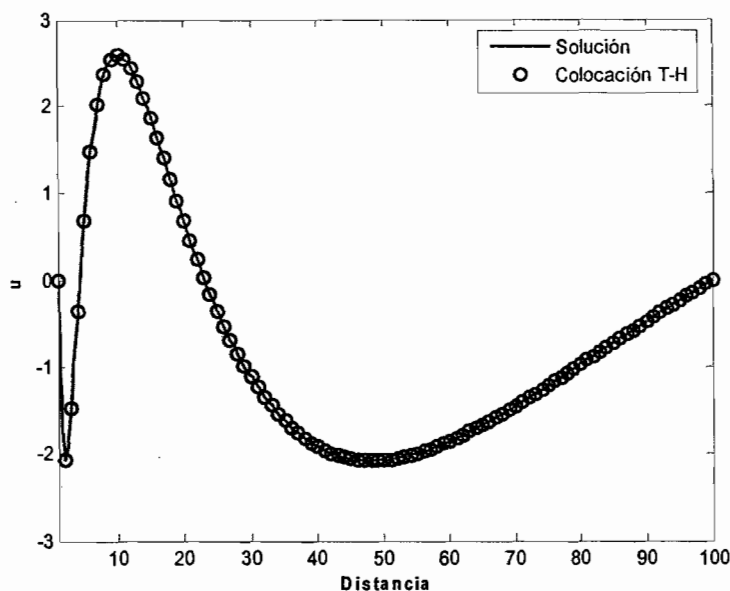


Figura 5.7 Resultados obtenidos para la aproximación de la ecuación (5.15)

Siguiendo los resultados que se muestran en la Figura 5.7, puede observarse que el método es apropiado para el tratamiento de coeficientes discontinuos. Según los experimentos mostrados, la norma infinita no se reduce significativamente cuando $\Delta x > 1$. A esto se suma el hecho de que la generación de la matriz de coeficientes no es complicada.

5.4 TRANSPORTE DE UNA ESPECIE EN UNA FASE

Con los resultados anteriores se pasa a la solución de problemas que evolucionan en el tiempo. En el caso del transporte sin reacción química, la solución analítica se compara con el método de colocación T-H, así como con los procedimientos de diferencias finitas y elemento finito. Se presentan resultados para dos valores del número de Peclet. La ecuación a resolver es

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial u}{\partial x} - Ku \quad (5.19)$$

sujeta a las condiciones

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= 10 & 0 < x \leq \ell & \quad (5.20) \\ u(0, t) &= 10 \\ u(\ell, t) &= 0 \end{aligned}$$

y con los siguientes parámetros:

$$\begin{aligned} D &= 0.2 & K &= 0.01 & v &= \{1, 2\} & \quad (5.21) \\ \ell &= 100 & \Delta x &= 2 & t &= \{68, 20\} \end{aligned}$$

Cuando no hay reacción química, la solución analítica de (5.19), sujeta a las condiciones (5.20) es

$$u(x, t) = \frac{u_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + e^{\frac{v}{D}x} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\} \quad (5.22)$$

En este ejemplo, no se aplica el método de separación de operadores, puesto que sólo hay una especie y una constante de reacción. Para la aplicación del método de colocación T-H, el sistema de ecuaciones para determinar los coeficientes de los polinomios queda definido por los sistemas (5.3), con $K=0$ y los coeficientes a_{ij} de la matriz tridiagonal se definen por

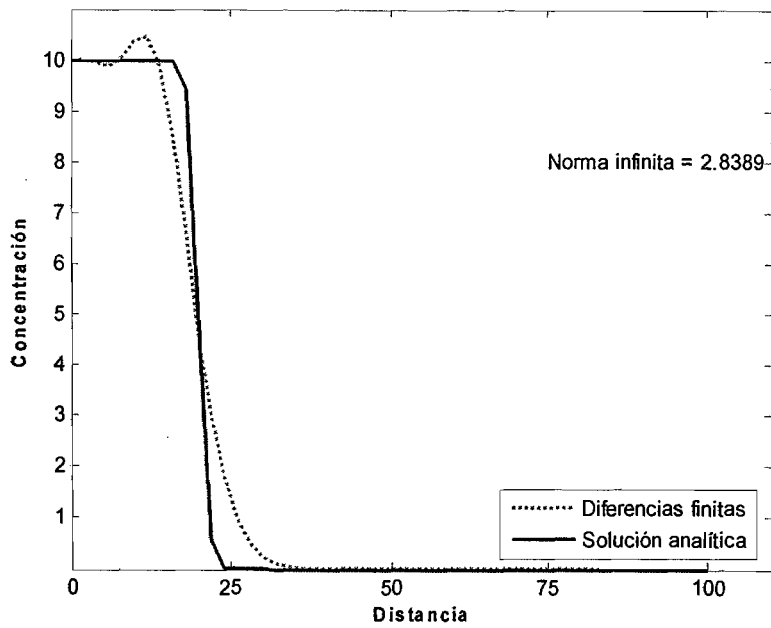
$$a_{i,i-1} = \int_{x=i-1}^{x=i+1} \hat{\phi}_i w_i dx - \frac{\Delta t D}{h} p_{11} \quad (5.23a)$$

$$a_{i,i} = \int_{x=i-1}^{x=i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + \frac{\Delta t D}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j} + p_{2j}) \quad (5.23b)$$

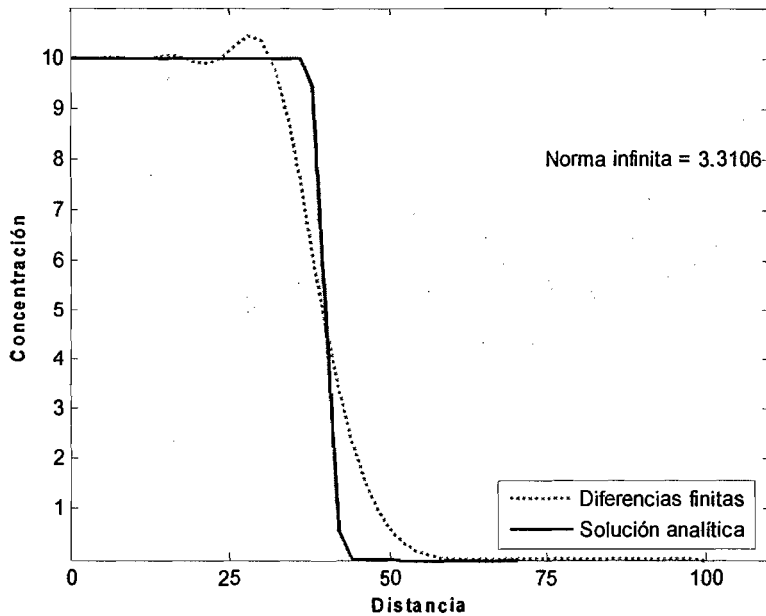
$$a_{i,i+1} = \int_{x=i-1}^{x=i+1} \hat{\phi}_i w_i dx - \frac{\Delta t D}{h} p_{21} \quad (5.23c)$$

$$b_1 = u_1^k \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx + u_2^k \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx + \frac{\Delta t D}{h} p_{11} u_0 \quad (5.24a)$$

$$b_i = u_{i-1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_i^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_{i+1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx, \quad i = 2, 3, \dots, E-1 \quad (5.24b)$$

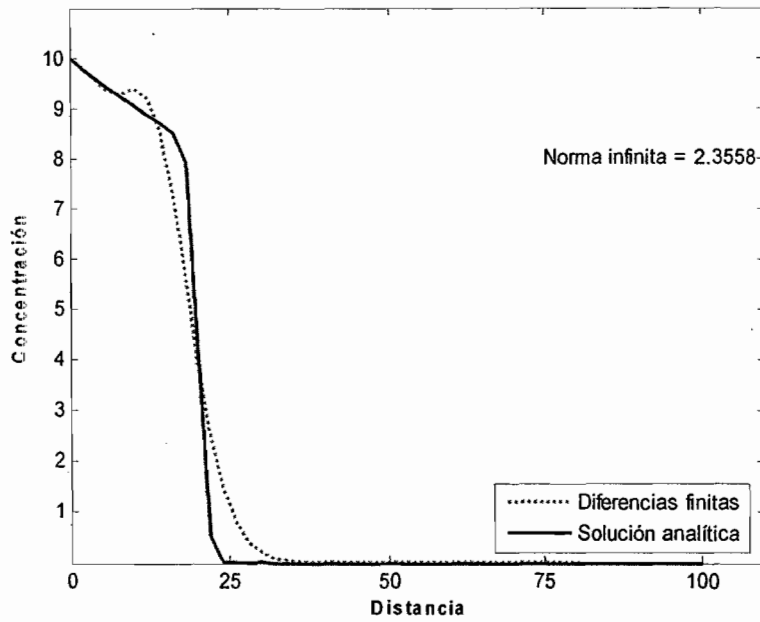


a)

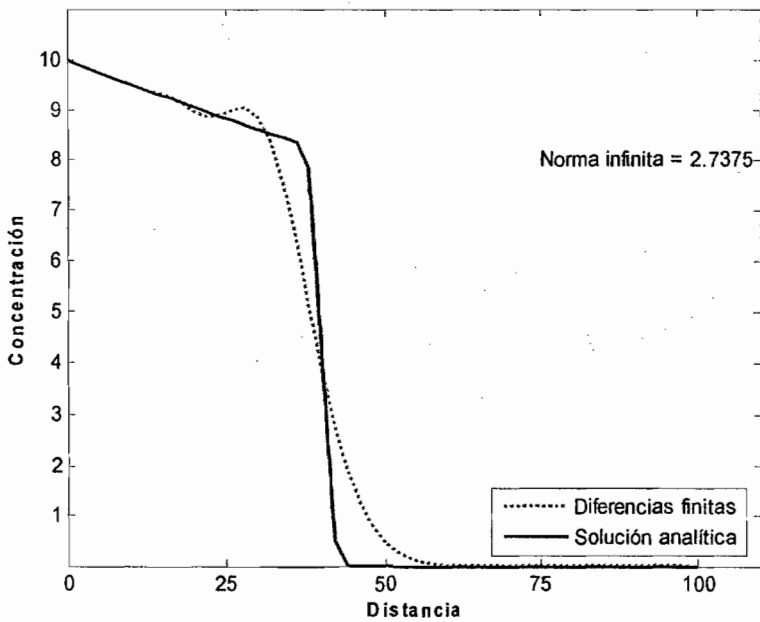


b)

Figura 5.8 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte sin reacción química utilizando el método de diferencias finitas centradas en el espacio. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

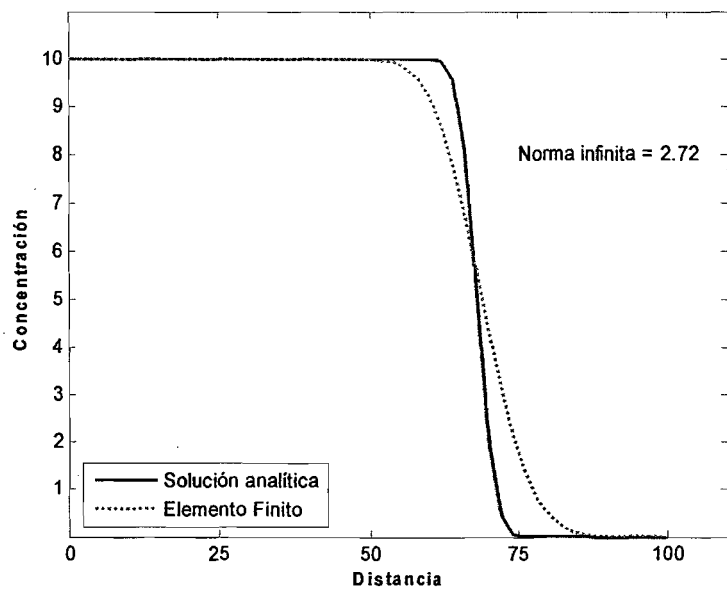


a)

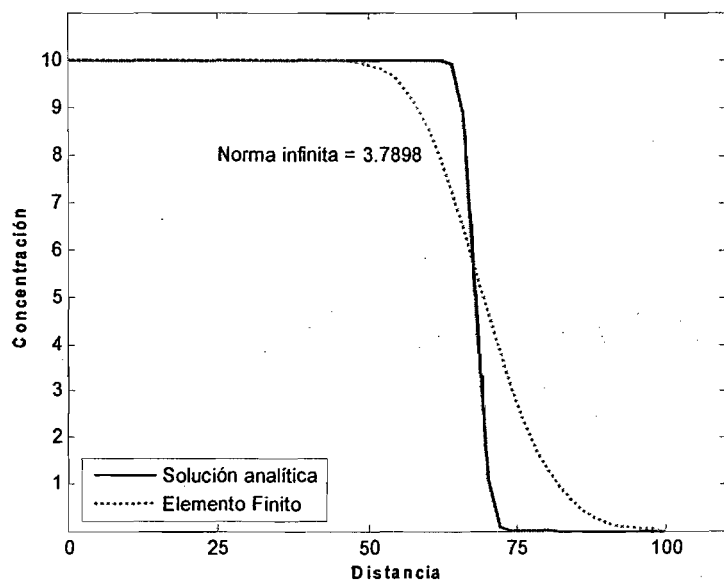


b)

Figura 5.9 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte reactivo utilizando el método de diferencias finitas centradas en el espacio. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

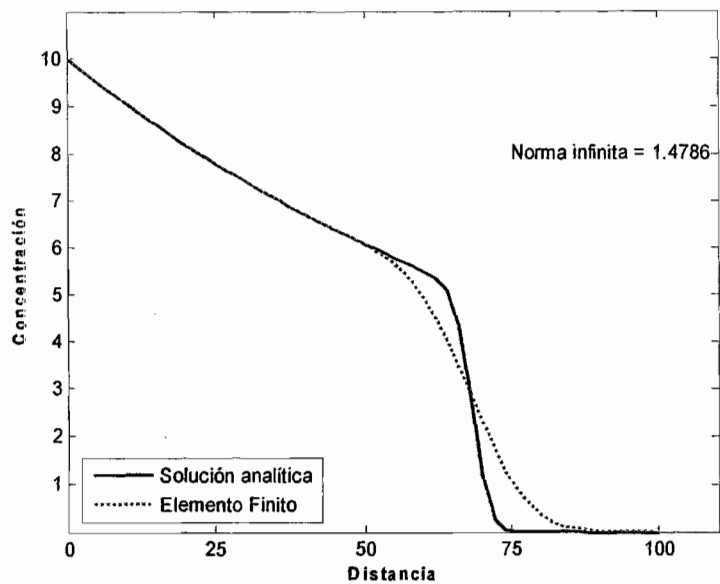


a)

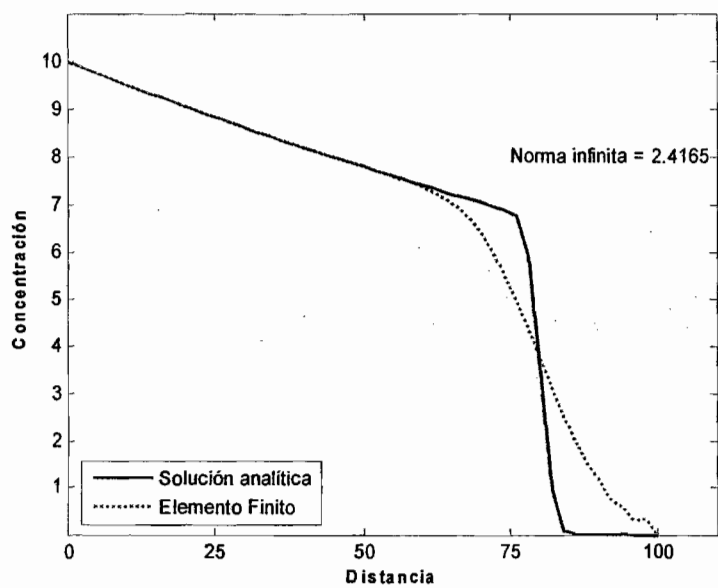


b)

Figura 5.10 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte sin reacción química utilizando el método de elemento finito. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

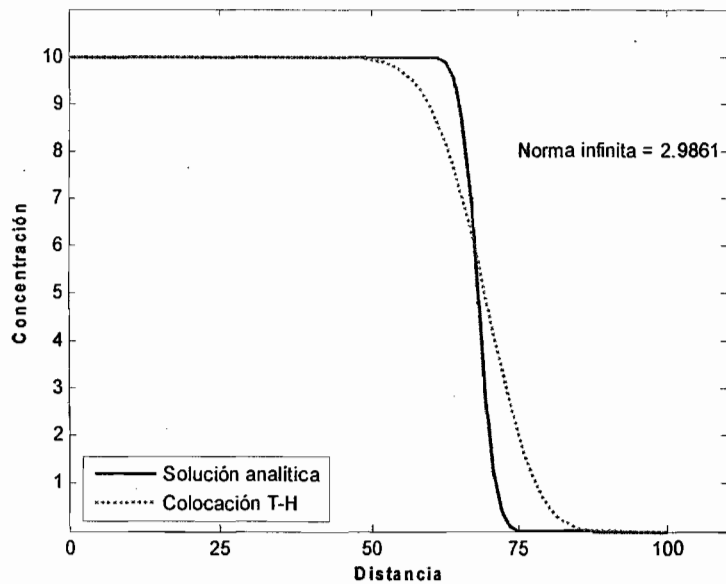


a)

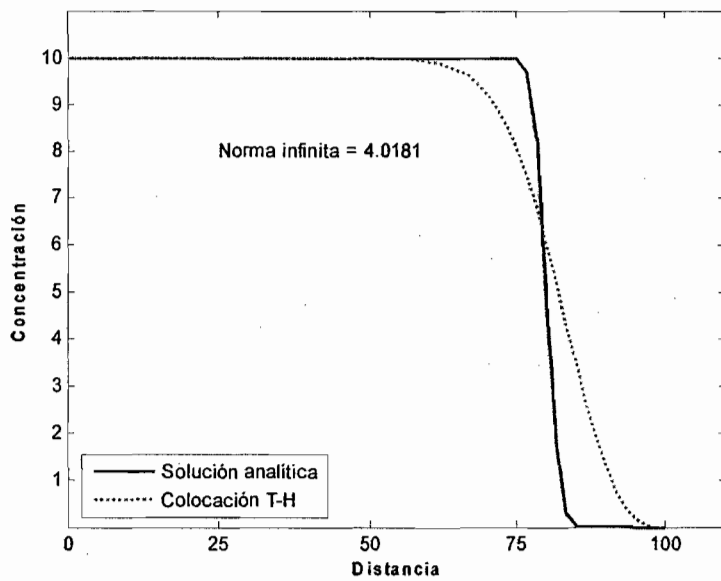


b)

Figura 5.11 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte reactivo utilizando el método de elemento finito. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

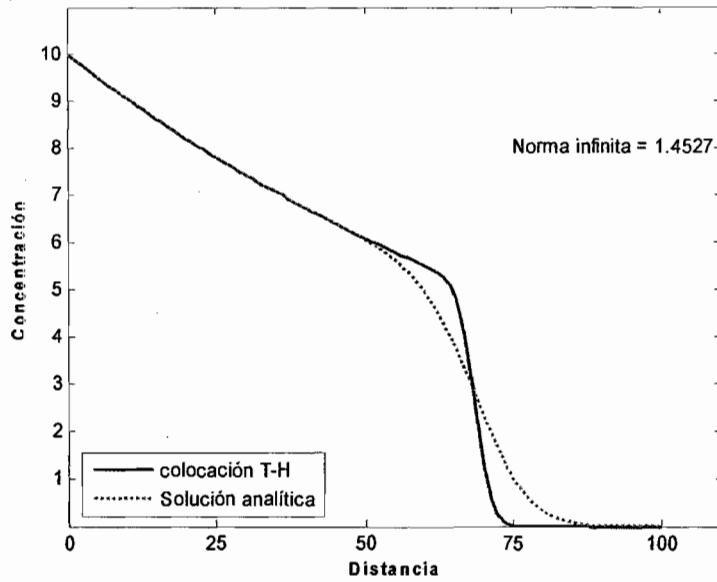


a)

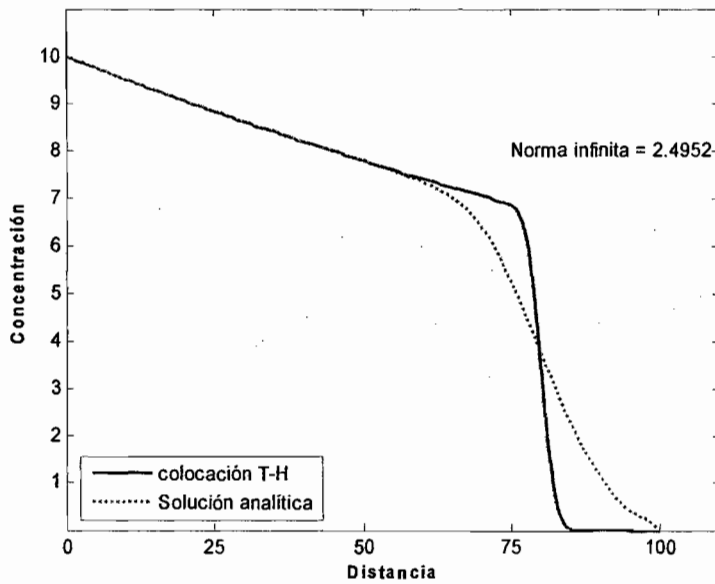


b)

Figura 5.12 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte sin reacción química utilizando el método de colocación Trefftz-Herrera. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.



a)



b)

Figura 5.13 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte reactivo utilizando el método de colocación Trefftz-Herrera. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

En los resultados presentados en las Figuras 5.10 a 5.15 se puede observar que, como se ha mostrado en otros trabajos (ver por ejemplo, Gray y Pinder, 1976), el método de diferencias finitas oscila aun para números bajos de Peclet. A medida que crece el número de Peclet, la aproximación con el método de elemento finito tiende a oscilar, mientras que la desarrollada con el método de colocación T-H tiende a suavizar el frente. Estos resultados son consistentes con los obtenidos para el caso del transporte estacionario. Otra ventaja de este método es que no es necesario integrar, lo que es ventajoso cuando los términos advectivo y difusivo son variables o no lineales.

5.5 ALGORITMO TIPO RUNGE-KUTTA

A continuación se muestran los resultados que se obtuvieron al aplicar el método de separación de operadores a la ecuación (5.19) para el caso en que no se producen reacciones químicas. Si se define:

$$\mathcal{L}_1 u = -D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.25)$$

Es claro que $\mathcal{L}_2 u_i = 0$, y se obtiene el método de tipo Runge-Kutta descrito en las ecuaciones (4.10) a (4.12). En este caso las matrices \tilde{C} y \tilde{D} quedan definidas por (5.3), con $K = 0$. En los dos subintervalos de tiempo los coeficientes de la matriz A se definen por

$$a_{i,i-1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx - \frac{\Theta_1 D}{h} p_{11} \quad (5.26a)$$

$$a_{i,i} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + \frac{\Theta_1 D}{h} \sum_{j=1}^3 j (p_{1j} + p_{2j}) \quad (5.26b)$$

$$a_{i,i+1} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx - \frac{\Theta_1 D}{h} p_{2i} \quad (5.26c)$$

En el primer subintervalo, las entradas del lado derecho se definen por las ecuaciones (5.24). Y en el segundo subintervalo, las entradas son

$$b_1 = u_0 \frac{\Theta_3 D}{h} p_{11} - u_1^{k+\Theta} \frac{\Theta_3 D}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j} + p_{2j}) + u_2^{k+\Theta} \frac{\Theta_3 D}{h} p_{21} \quad (5.27a)$$

$$+ u_1^k \int_0^2 \hat{\phi}_i w_i dx + u_2^k \int_0^2 \hat{\phi}_i w_i dx,$$

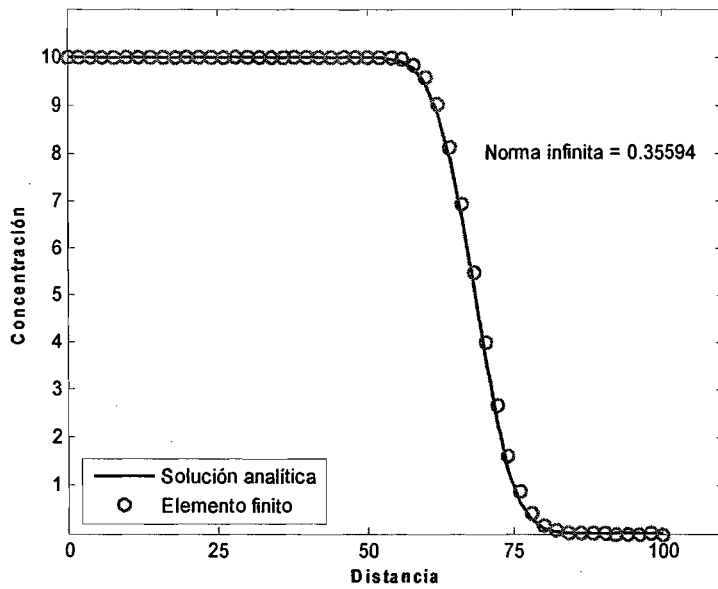
$$b_i = u_{i-1}^{k+\Theta} \frac{\Theta_3 D}{h} p_{11} - u_i^{k+\Theta} \frac{\Theta_3 D}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j} + p_{2j}) + u_{i+1}^{k+\Theta} \frac{\Theta_3 D}{h} p_{21} \quad (5.27b)$$

$$+ u_{i-1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_i^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_{i+1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx, \quad i = 2, 3, \dots, E-1$$

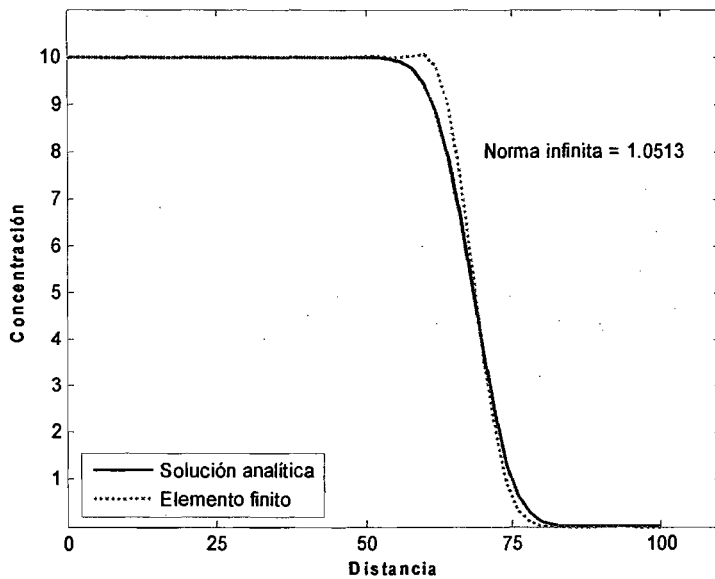
En las ecuaciones (5.26) y (5.27)

$$\Theta_1 = \Delta t \Theta$$

$$\Theta_3 = \Delta t (1 - \Theta)$$

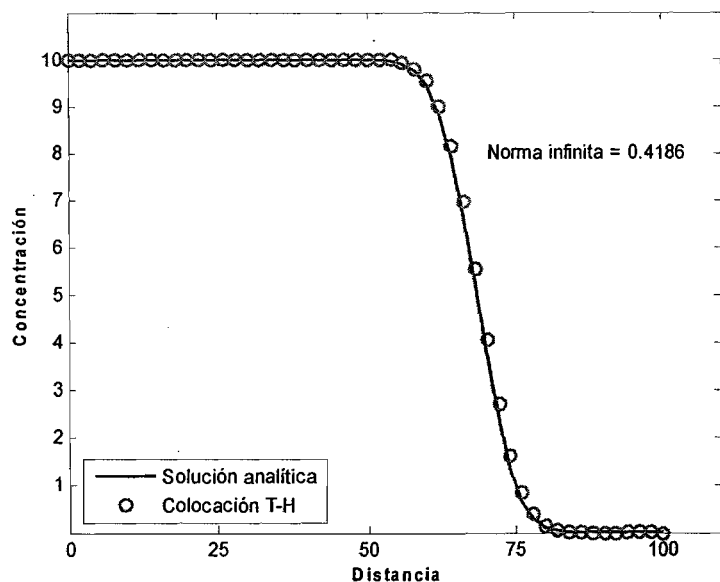


a)

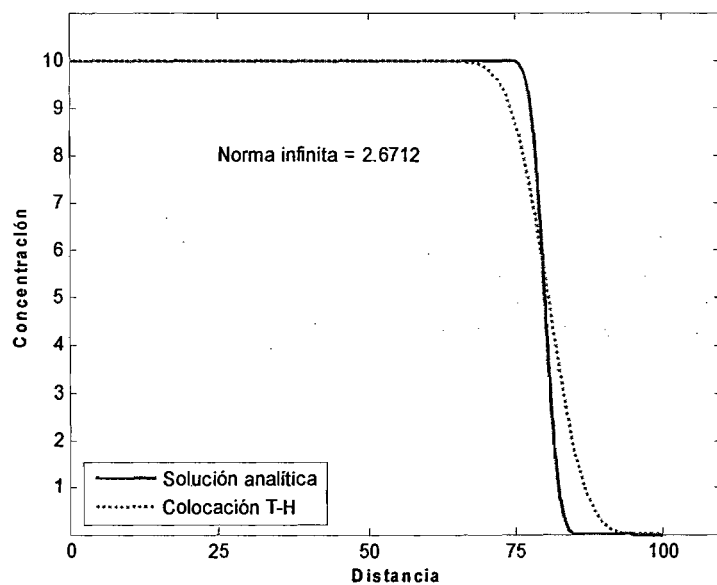


b)

Figura 5.14 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte sin reacción química utilizando el método de elemento finito en combinación con el algoritmo tipo Runge-Kutta. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.



a)



b)

Figura 5.15 Resultados obtenidos para la ecuación del transporte sin reacción química utilizando el método de colocación Trefftz-Herrera en combinación con el algoritmo tipo Runge-Kutta. a) $Pe = 10$; b) $Pe = 20$.

En las Figuras 5.14 y 5.15, puede observarse que cuando se aplica la aproximación tipo Runge-Kutta, la solución numérica muestra un buen comportamiento, tanto con el método de elemento finito como con el de colocación T-H. En este sentido, se puede concluir que el orden de la aproximación espacial se mantiene cuando los términos de reacción y/o biodegradación son nulos. Haciendo un examen de las ecuaciones (2.146)-(2.151) se puede ver que, cuando el equilibrio se alcanza, los términos de reacción desaparecen; así mismo, el término de biodegradación puede desaparecer, dependiendo de si el compuesto es o no limitante. Y este resultado garantiza que el método converge aun en este caso.

5.6 TRANSPORTE DE DOS ESPECIES EN UNA FASE.

El problema que se resuelve a continuación, representa un escenario típico de degradación biológica que da lugar a un sistema de dos ecuaciones de transporte acoplado en los términos de biodegradación. Se tomó el modelo de Celia et al. (1989), y es el mismo que se utiliza en el sistema de ecuaciones de transporte en varias fases. Se aplicó el método de separación de operadores tanto con el método de elemento finito como con el método de colocación T-H. La ventaja de la separación propuesta es que se evitan las no linealidades cuando el término advectivo y difusivo están presentes. Como en el subintervalo 1 y 3 las matrices de coeficientes son iguales, sólo es necesario invertir las matrices A , \tilde{C} y \tilde{D} , una vez. En cambio, si no se emplea el esquema de descomposición, estas últimas se tienen que invertir en cada paso en el tiempo. Se resolvió el sistema

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + v \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{V_m X u_1}{K_h + u_1} \delta_1 + \frac{Y_1 V_m X u_2}{Y_2 K_h + u_2} \delta_2 = 0 \quad (5.28a)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + v \frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{V_m X u_2}{K_h + u_2} \delta_2 + \frac{Y_1 V_m X u_1}{Y_2 K_h + u_1} \delta_1 = 0 \quad (5.28b)$$

En problemas reales, u_1 es la especie contaminante y u_2 es oxígeno si el proceso ocurre en condiciones aeróbicas. Se definieron condiciones de Dirichlet en la frontera izquierda y de Neuman en la derecha, es decir

$$\begin{aligned}
 u_1(x,0) &= 0, & 0 < x \leq \ell \\
 u_2(x,0) &= 3, \\
 u_1(0,t) &= 10 \\
 u_2(0,t) &= 3 \\
 \left. \frac{\partial u_1}{\partial x} \right|_{\ell} &= \left. \frac{\partial u_2}{\partial x} \right|_{\ell} = 0
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\begin{aligned}
 D &= 0.2 & v &= \{1, 2, 4\} \\
 \ell &= 100 & t &= \{68, 25, 15\} & \Delta x &= 2 \\
 K_h &= 0.01 & V_m &= 1 & X &= 0.2 & Y_1/Y_2 &= 0.5 & Y_2/Y_1 &= 2
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Para aplicar el método de separación de operadores, se consideraron las siguientes definiciones

$$\mathcal{L}_1 u_1 = -D \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + v \frac{\partial u_1}{\partial x} \tag{5.31a}$$

$$\mathcal{L}_1 u_2 = -D \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + v \frac{\partial u_2}{\partial x} \tag{5.31b}$$

$$\mathcal{L}_2 u_1 = \frac{V_m X u_1}{K_h + u_1} \delta_1 \tag{5.32a}$$

$$\mathcal{L}_2 u_2 = \frac{V_m X u_2}{K_h + u_2} \delta_2 \tag{5.32b}$$

$$f_{\Omega}(u_1) = \frac{Y_2 V_m X u_2}{Y_1 K_h + u_2} \delta_2 \quad (5.33a)$$

$$f_{\Omega}(u_2) = \frac{Y_1 V_m X u_1}{Y_2 K_h + u_1} \delta_1 \quad (5.33b)$$

En los niveles $k+\Theta$, y $k+1$, los coeficientes de las matrices A , \tilde{C} y \tilde{D} , están dados por las ecuaciones (5.3) y (5.26) y las entradas del lado derecho son

$$n=1,2; \quad p=1,2 \quad n \neq p$$

$$b_{n,1} = u_{n,1}^k \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx + u_{n,2}^k \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx + \frac{\Theta D}{h} p_{11} u_{n,0} - \Theta_1 \int_0^2 \hat{\phi}_1 \frac{V_m X u_n^k}{K_h + \hat{\phi}_1 u_n^k} \delta_n w_1 dx - \Theta_1 \int_0^2 \hat{\phi}_1 \frac{Y_p}{Y_n} \frac{V_m X u_p^k}{K_h + \hat{\phi}_1 u_p^k} \delta_p w_1 dx \quad (5.34a)$$

$$b_{n,i} = u_{n,i-1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_{n,i}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + u_{n,i+1}^k \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx, \quad i=2,3,\dots,E-1 \quad (5.34b)$$

$$- \Theta_1 \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i \frac{V_m X u_{n,i}^k}{K_h + \hat{\phi}_i u_{n,i}^k} \delta_n w_i dx - \Theta_1 \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i \frac{Y_p}{Y_n} \frac{V_m X u_{p,i}^k}{K_h + \hat{\phi}_i u_{p,i}^k} \delta_p w_i dx$$

En el nivel $k+1-\Theta$, se tiene que

$$a_{n,i,j} = \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + \theta_2 \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i \frac{V_m X u_{n,i}^{k+1-\Theta,m}}{K_h + \hat{\phi}_i u_{n,i}^{k+1-\Theta,m}} \delta_n w_i dx \quad (5.35)$$

$$i=1,2,\dots,E-1 \quad j=i-1,i,i+1$$

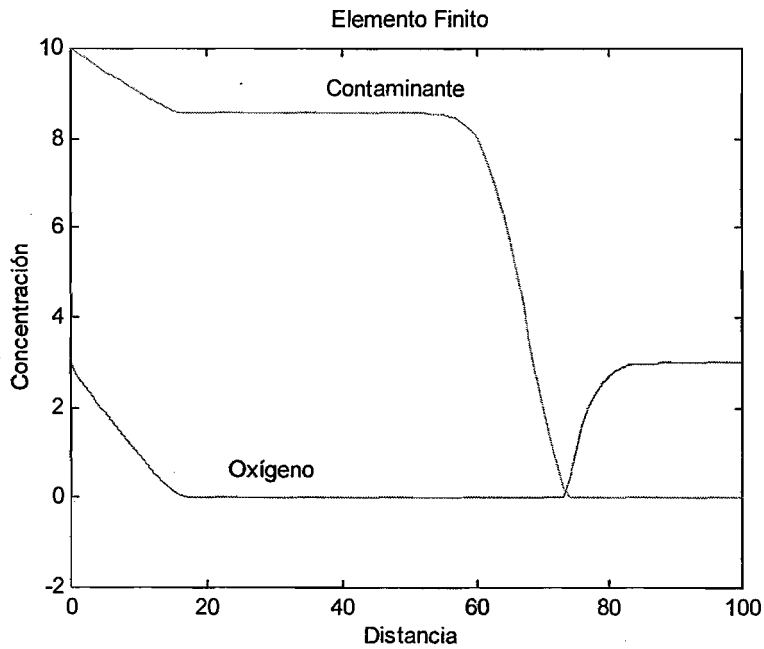
$$b_{n,1} = \frac{\Theta_2 D}{h} p_{21} u_{n,0} + u_{n,1}^{k+\Theta} \left\{ \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx - \frac{\Theta_2 D}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j} + p_{2j}) \right\} \quad (5.36a)$$

$$u_{n,2}^{k+\Theta} \left\{ \int_0^2 \hat{\phi}_1 w_1 dx + \frac{\Theta_2 D}{h} p_{21} \right\} - \Theta_2 \int_0^2 \hat{\phi}_1 \frac{Y_p}{Y_n} \frac{V_m X u_p^{k+\Theta}}{K_h + \hat{\phi}_1 u_p^{k+\Theta}} \delta_p w_1 dx$$

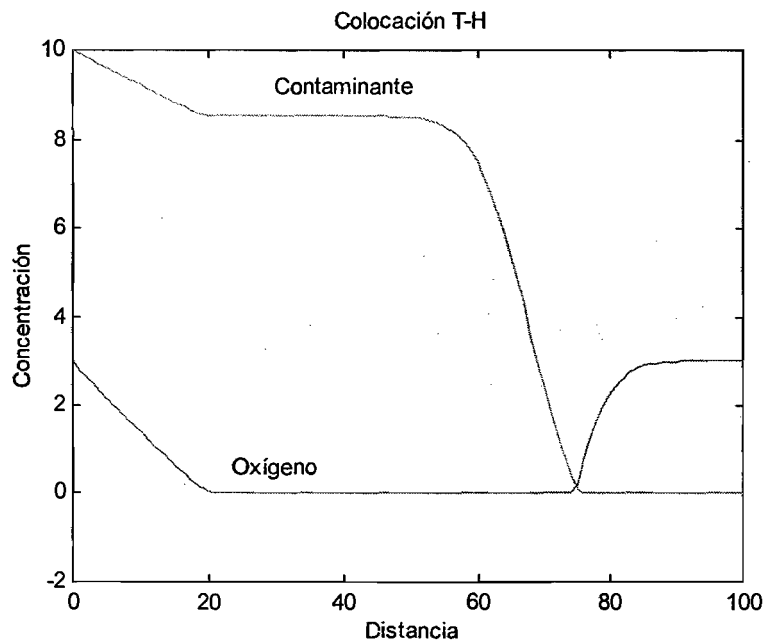
$$b_{n,i} = u_{n,i-1}^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + \frac{\Theta_2 D}{h} p_{11} \right\} + u_{n,i+1}^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx + \frac{\Theta_2 D}{h} p_{21} \right\}$$

$$+ u_{n,i}^{k+\Theta} \left\{ \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i w_i dx - \frac{\Theta_2 D}{h} \sum_{j=1}^3 j(p_{1j} + p_{2j}) \right\} + \Theta_2 \int_{i-1}^{i+1} \hat{\phi}_i \frac{Y_p}{Y_n} \frac{V_m X u_{p,i}^{k+\Theta}}{K_h + \hat{\phi}_i u_{p,i}^{k+\Theta}} \delta_p w_i dx \quad (5.36b)$$

$i = 2, 3, \dots, E-1$

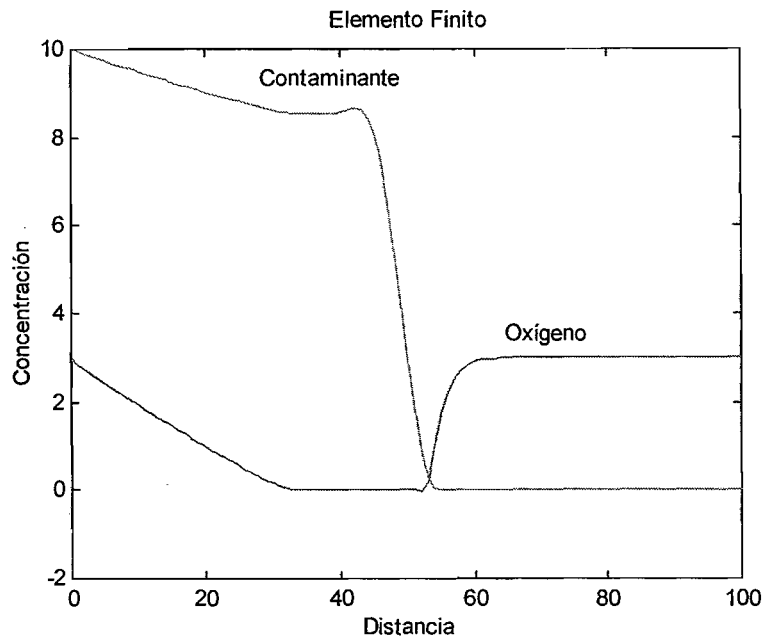


a)

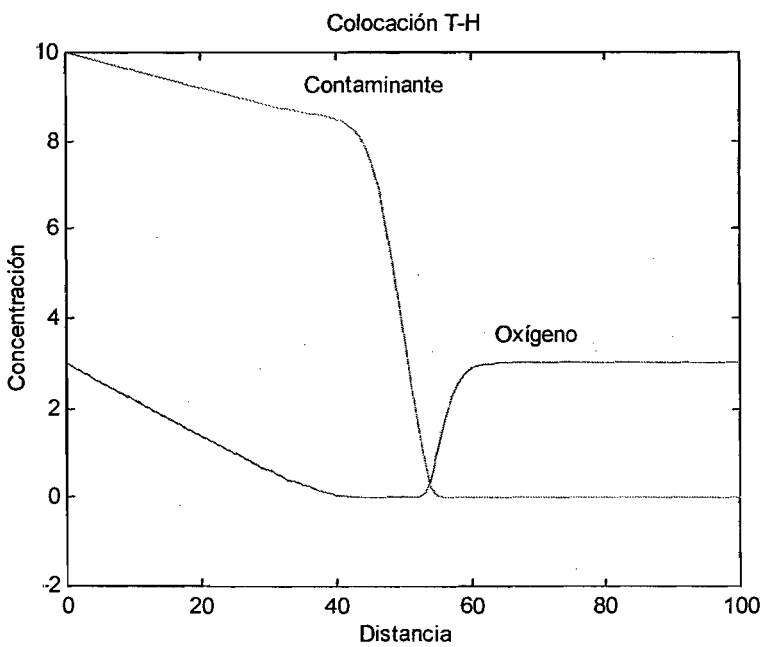


b)

Figura 5.16 Resultados obtenidos para el sistema de dos ecuaciones acopladas en los términos de reacción que describe el transporte de dos especies en una fase, con $Pe = 10$. a) Método de elemento finito, b) método de colocación T-H.

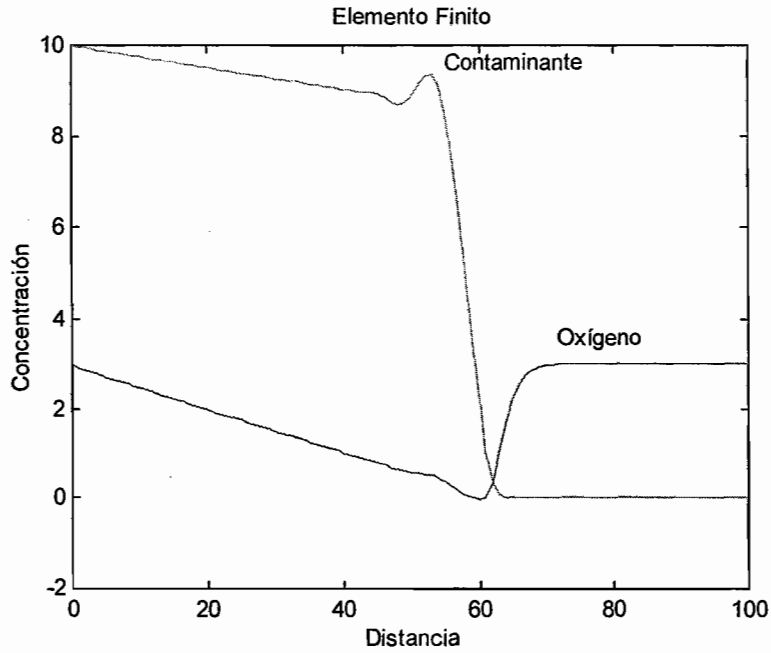


a)

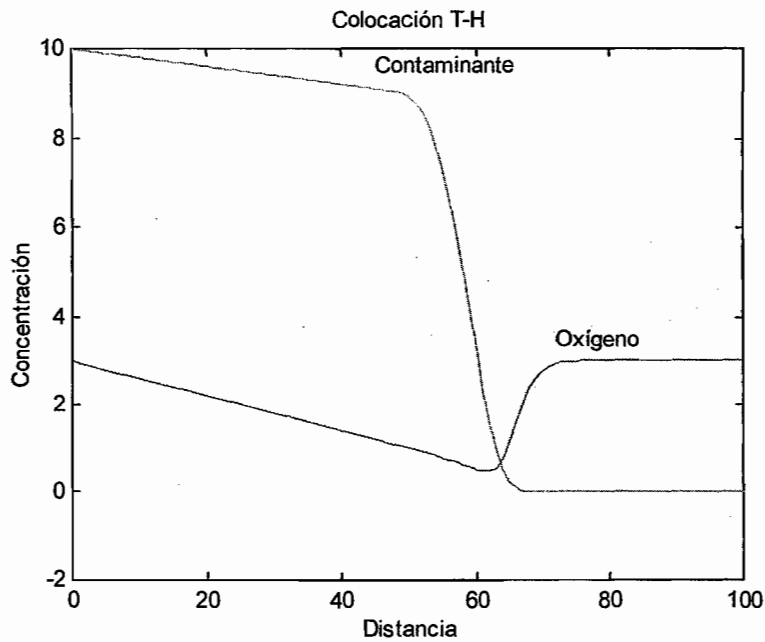


b)

Figura 5.17 Resultados obtenidos para el sistema de dos ecuaciones acopladas en los términos de reacción que describe el transporte de dos especies en una fase, con $Pe = 20$. a) método de elemento finito, b) método de colocación T-H.



a)



b)

Figura 5.18 Resultados obtenidos para el sistema de dos ecuaciones acopladas en los términos de reacción que describe el transporte de dos especies en una fase, con $Pe = 40$. a) método de elemento finito, b) método de colocación T-H.

Los resultados obtenidos en los experimentos numéricos y que se muestran en las Figuras 5.16, 5.17 y 5.18, son consistentes con observaciones experimentales, en donde se muestra que la pluma contaminante está desprovista de oxígeno en el centro. Además, los resultados son consistentes con los presentados por Celia et al. (1989) y Våg et al. (1996), en ambos trabajos se usa el mismo modelo matemático, con los mismos parámetros. En Våg et al. (1996), el problema se resolvió utilizando ELLAM. Si bien, este procedimiento es adecuado para simular el transporte predominantemente advectivo, tiene la desventaja de que cuando hay términos de reacción, se obtienen características no lineales. Esto último lo puede hacer ineficiente para resolver problemas en escenarios más complicados, por ejemplo, en dos dimensiones y/o con más especies involucradas. Por otra parte, se puede observar que el método de colocación T-H, es más estable para números intermedios de Peclet: 20 y 40.

5.7 SISTEMA DE ECUACIONES DE FLUJO

En este ejemplo se resuelve el sistema de ecuaciones de flujo exclusivamente y suponiendo que la fase orgánica está en saturación residual (ecuaciones (3.1) a (3.3)). Como no hay transporte de especies, desaparecen los términos asociados a reacciones químicas y procesos de degradación biológica. Por lo que, la saturación de la fase orgánica se mantiene constante durante todo el proceso, y el problema se reduce a resolver las ecuaciones (3.1) y (3.3). Se plantea como un problema de flujo a lo largo de un núcleo o columna de suelo. En la parte superior hay flujo de agua pero no de gas. En la frontera inferior el flujo se interrumpe por la existencia de una capa impermeable. El sistema de ecuaciones a resolver es

$$\phi \left\{ \frac{\partial S^w}{\partial t} + \frac{S^w}{\rho^w} \frac{\partial \rho^w}{\partial t} \right\} + \frac{\partial u^w}{\partial x} + \frac{u^w}{\rho^w} \frac{\partial \rho^w}{\partial x} = 0 \quad (5.37a)$$

$$\phi \left\{ \frac{\partial S_G}{\partial t} + \frac{S^G}{\rho^G} \frac{\partial \rho^G}{\partial t} \right\} + \frac{\partial u^G}{\partial x} + \frac{u^G}{\rho^G} \frac{\partial \rho^G}{\partial x} = 0 \quad (5.37b)$$

Sujeto a las condiciones

$$S^W(x, 0) = S_{rw}, \quad 0 < x < \ell \quad (5.38)$$

$$S^W(0, t) = 0.75$$

$$v^W \Big|_{\ell} = v^G \Big|_{\ell} = 0$$

Después de aplicar la formulación fraccional a las ecuaciones (5.37), se obtiene el siguiente sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial P^W}{\partial x} \right) = - \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda_W \gamma^W + \lambda_G \gamma^G) - \lambda_G \frac{\partial P_{cGW}}{\partial x} \right) \\ + \frac{\lambda_W}{\rho^W} \left(\frac{\partial P^W}{\partial x} - \gamma^W \right) \frac{\partial \rho^W}{\partial x} + \frac{\lambda_G}{\rho^G} \left(\frac{\partial P^W}{\partial x} + \frac{\partial P_{cGW}}{\partial x} - \gamma^G \right) \frac{\partial \rho^G}{\partial x} \end{aligned} \quad (5.39a)$$

$$\phi \frac{\partial S_W}{\partial t} + F'_W(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_c(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} \right) = \frac{\lambda_W}{\rho^W} \left(\frac{\partial P^W}{\partial x} - \gamma^W \right) \quad (5.39b)$$

Debe notarse que, como en el modelo se definió que las propiedades físicas dependen de la concentración de especies, en este caso no cambian. Por lo que las ecuaciones (5.39) se reducen a

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial P^W}{\partial x} \right) = - \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda_W \gamma^W + \lambda_G \gamma^G) - \lambda_G \frac{\partial P_{cGW}}{\partial x} \right) \quad (5.40a)$$

$$\phi \frac{\partial S_W}{\partial t} + F'_W(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_c(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} \right) = \frac{\lambda_W}{\rho^W} \left(\frac{\partial P^W}{\partial x} - \gamma^W \right) \lim_{\delta x \rightarrow 0} \quad (5.40b)$$

en donde

$$f_w(S_w) = \frac{k_{rw}/\mu_w}{k_{rw}/\mu_w + k_{rg}/\mu_g} \quad (5.41)$$

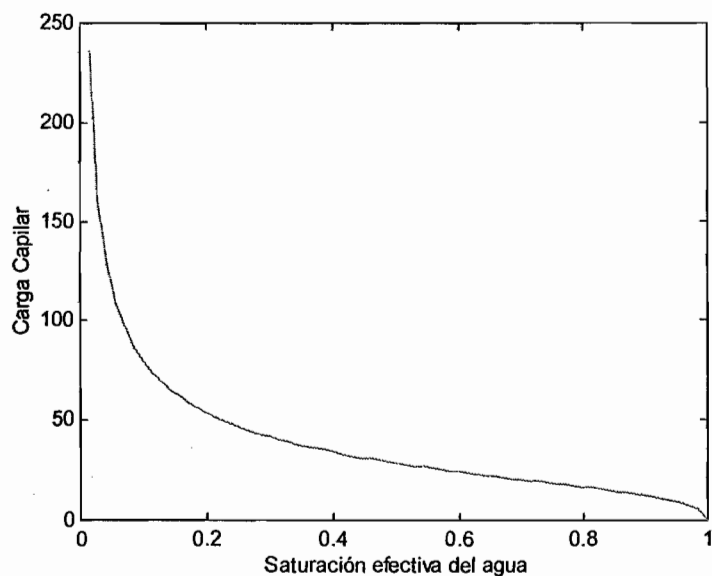
$$D_c(S_w) = -f_w \lambda_g \frac{dP_{cGW}}{dS_w} \quad (5.42)$$

$$F_w = f_w (u_t + \lambda_g (\rho_w - \rho_g) g) \quad (5.43)$$

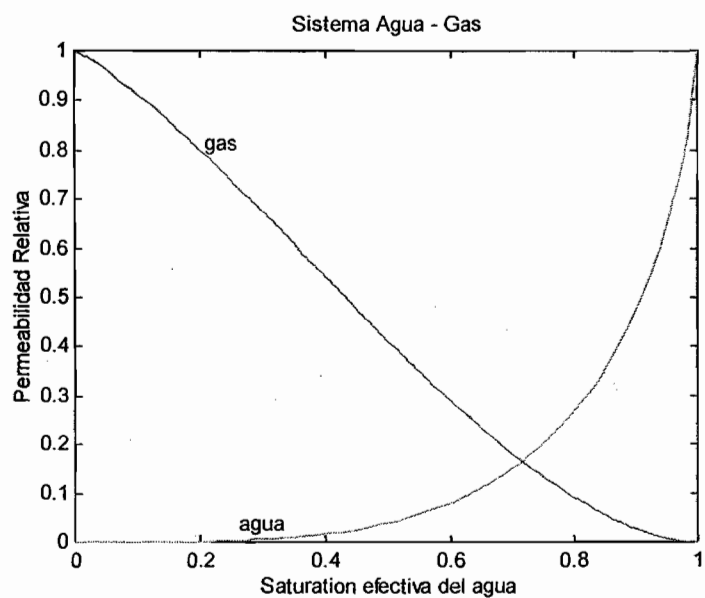
Para obtener las ecuaciones (5.39b) a (5.42), se hace uso de la definición de la velocidad del agua como una fracción de la velocidad total, es decir

$$u_w = f_w \left(u_t + \lambda_g \left(\frac{\partial P_{cGW}}{\partial x} + (\rho_w - \rho_g) g \right) \right) \quad (5.44)$$

La forma de las funciones (5.41) y (5.42), así como las de permeabilidad relativa y carga capilar se muestran en las Figuras 5.21 y 5.22.

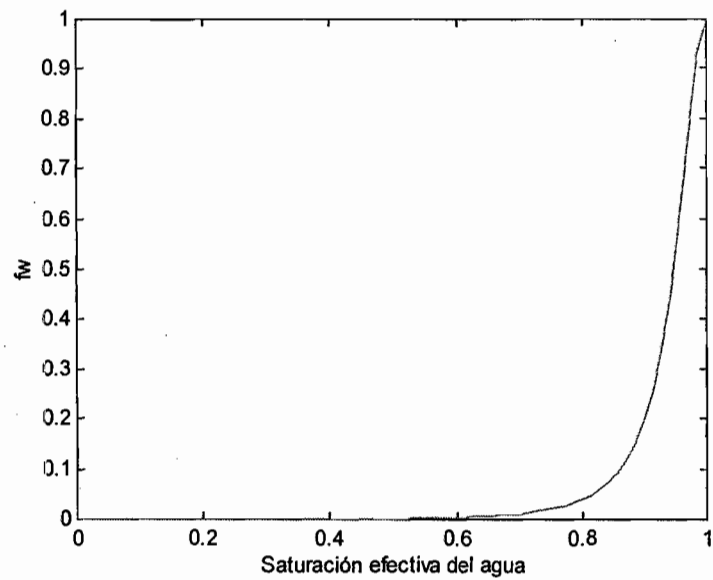


a)

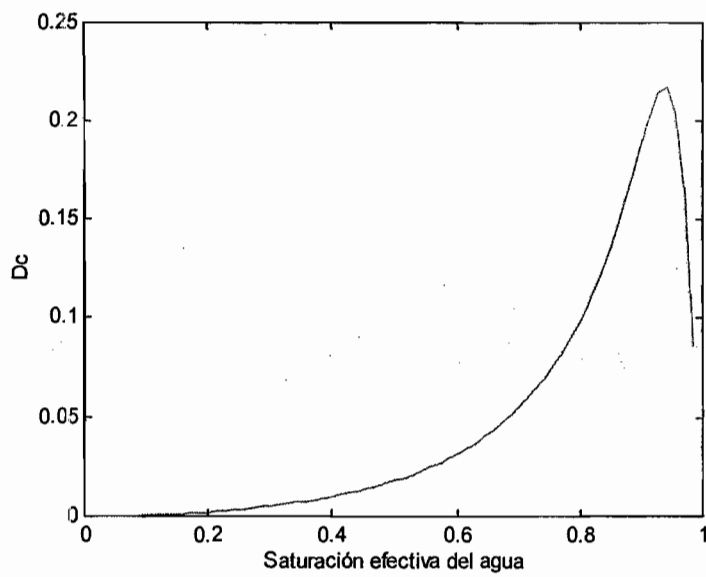


b)

Figura 5.19 Funciones utilizadas en el modelo de flujo. a) presión capilar y b) permeabilidad relativa.



a)



b)

Figura 5.20 Funciones utilizadas en el modelo de flujo. a) flujo fraccional y b) difusión capilar.

Las curvas obtenidas son consistentes con otras reportadas en la literatura especializada para sistemas agua-gas, ver por ejemplo (Binning y Celia, 1999, Guarnaccia et al., 1995). En el modelo K-S-P, se usaron parámetros representativos de un sistema agua-gas, éstos son

$$S_{wr} = 0.08$$

$$\tau = \zeta = 1/2$$

$$n = 2.815$$

$$a_i = 2$$

$$\phi = 0.4$$

$$\mu_w = 0.001$$

$$\mu_g = 1.83 \times 10^{-5}$$

$$\rho^w = 1000$$

$$g = 9.81$$

En este ejemplo, para resolver la ecuación (5.39b), se empleó el algoritmo tipo Runge-Kutta, y el sistema de ecuaciones se resuelve de acuerdo con el procedimiento secuencial descrito en el capítulo III, y eliminando los pasos 4, 5 y 8 a 12. Los resultados que se obtuvieron para 5 intervalos de tiempo igualmente espaciados, se muestran en la Figura 5.21.

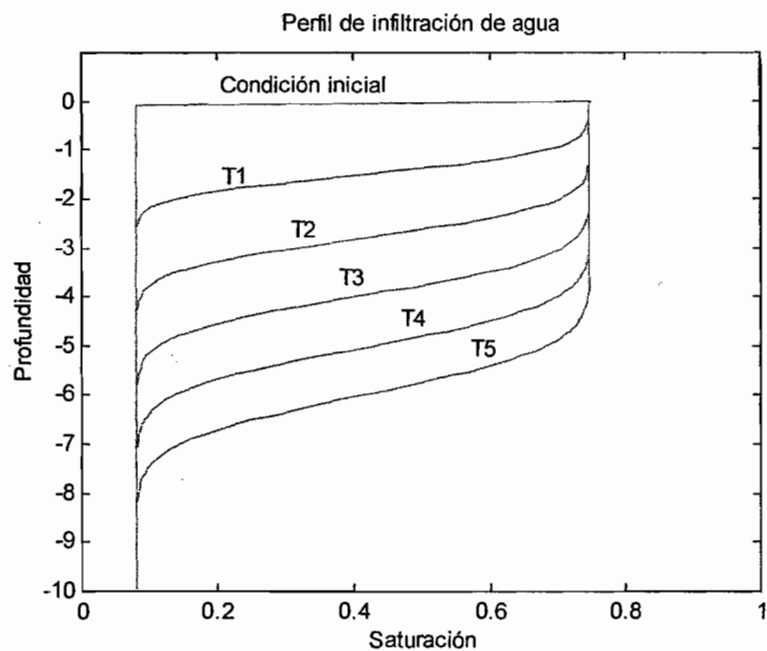


Figura 5.21 Resultados obtenidos en la simulación del flujo del sistema agua-gas.

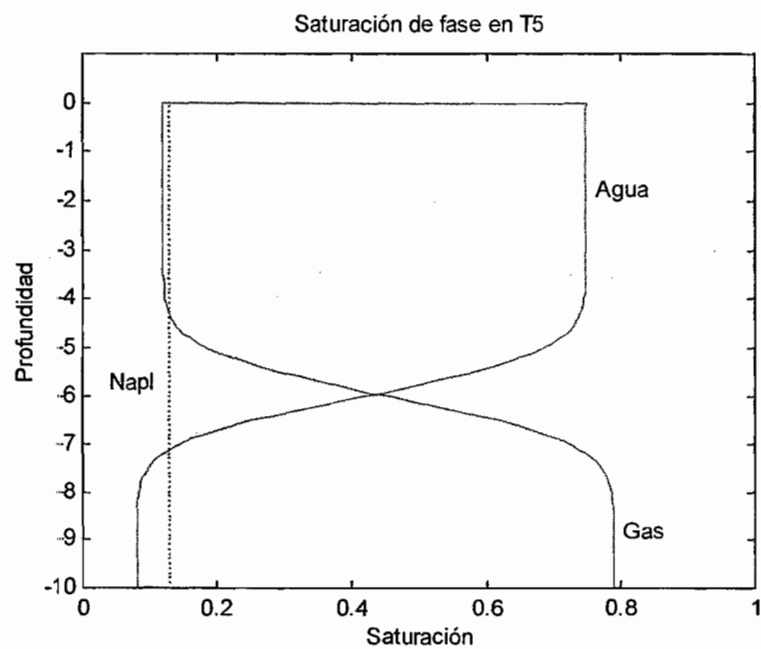


Figura 5.22 Saturación de fase obtenida en la simulación del flujo del sistema agua-gas.

En las Figura 5.21, se puede observar que la velocidad del frente de infiltración va disminuyendo de manera muy lenta mientras que su forma, relativamente suave, se conserva. Esto se debe a que la saturación es alta. Si se hace un examen de la forma de la difusión capilar que se muestra en la Figura 5.20 b), puede observarse que ésta es significativa cuando la saturación es alta, lo que a su vez significa que aumenta el coeficiente de la segunda derivada en la ecuación (5.39b). De hecho, una vez que se conocen las condiciones iniciales y de frontera, y dadas las funciones de flujo fraccional y de difusión capilar, se puede tener a priori, una idea de la forma que tendrán las soluciones de las ecuaciones de saturación de fase. Debe notarse que, como se trata de un evento de infiltración, la saturación del agua nunca alcanza la unidad. Los resultados obtenidos son similares a otros obtenidos con métodos numéricos diferentes y con parámetros similares, ver por ejemplo (Binning y Celia, 1999, Celia y Binning, 1992, Abriola y Pinder, 1985b).

5.8 SISTEMA COMPLETO

Finalmente, se desarrolla la solución del problema de transporte en varias fases descrito por las ecuaciones (3.37) a (3.42). El flujo tiene las mismas características que las descritas en el problema anterior. Este escenario se presenta típicamente después de que ha ocurrido algún derrame y ha cesado el flujo de la fase orgánica. En este sentido la fase es inmóvil, pero sigue siendo una fuente de contaminación debido a que ocurren procesos de transferencia de masa con el agua y el gas. En este ejemplo, se considera que las propiedades físicas de fase no cambian durante el proceso, y que no hay fuentes o sumideros asociados a pozos.

Por consistencia, en las ecuaciones de transporte se prescriben condiciones de Dirichlet en la frontera superior y de Neuman en la inferior. Es decir

$$\begin{aligned}
 C_n^G(x, 0) &= 0, & 0 < x \leq \ell \\
 C_n^W(x, 0) &= 0, & 0 < x \leq \ell \\
 C_b^W(x, 0) &= 3, \\
 C_n^G(0, t) &= 4 \\
 C_n^W(0, t) &= 10 \\
 C_b^W(0, t) &= 3 \\
 \left. \frac{\partial C_n^G}{\partial x} \right|_{\ell} &= \left. \frac{\partial C_n^W}{\partial x} \right|_{\ell} = \left. \frac{\partial C_b^W}{\partial x} \right|_{\ell} = 0
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

Como hay reacciones de disolución y volatilización asociadas al transporte de especies, la saturación de la fase ya no permanece constante. Bajo estas condiciones, no es necesaria la ecuación (3.38) y las ecuaciones (3.37) y (3.38) se transforma en

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T^* \frac{\partial P^W}{\partial x} \right) &= E^{T*} - \Gamma_n^{W*} - \Gamma_n^{G*} - B^{T*} \\
 + \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda_W \gamma^W + \lambda_G \gamma^G) - \lambda_G \frac{\partial P_{cGW}}{\partial x} \right)^*
 \end{aligned} \tag{5.46}$$

$$\begin{aligned}
 \phi \frac{\partial S_W}{\partial t} + F'_W(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{c_{W-W}}(S_W) \frac{\partial S_W}{\partial x} \right) \\
 = E^W(S_W) - B^T(S_W) - \Gamma_n^{W*}
 \end{aligned} \tag{5.47}$$

y la saturación de la fase orgánica se actualiza al resolver

$$\phi \frac{dS^N}{dt} = - \left\{ \frac{\bar{K}_n^W}{\rho^N} (\bar{C}_n^W - C_n^W) + \frac{\bar{K}_n^G}{\rho^N} (\bar{C}_n^G - C_n^G) \right\}^* \tag{5.48}$$

Naturalmente, a esta ecuación no se le aplica el esquema de separación de operadores y se resuelve una sola vez en cada paso en el tiempo. Las ecuaciones de transporte ((3.40) a (3.42)), se resuelven con $Q^{a*} = 0$.

Para resolver el sistema de ecuaciones, se aplica el algoritmo secuencial descrito en las páginas 121 y 122, sin tomar en cuenta los puntos 4, 5 y 12. En cada subintervalo de tiempo, los sistemas de ecuaciones algebraicas se resuelven haciendo uso del algoritmo descrito en las páginas 155 y 156. Los coeficientes de las matrices A , \tilde{C} y \tilde{D} están por las ecuaciones (4.96) a (4.109) y (4.117), haciendo los cambios apropiados de notación en cada caso, y de acuerdo con el subintervalo de tiempo. Para los procesos de biodegradación se usaron los mismos parámetros que en el problema de transporte de dos especies en una fase (ver(5.30)). Se consideran dos casos, el primero sin reacciones de disolución y el segundo con reacciones de disolución.

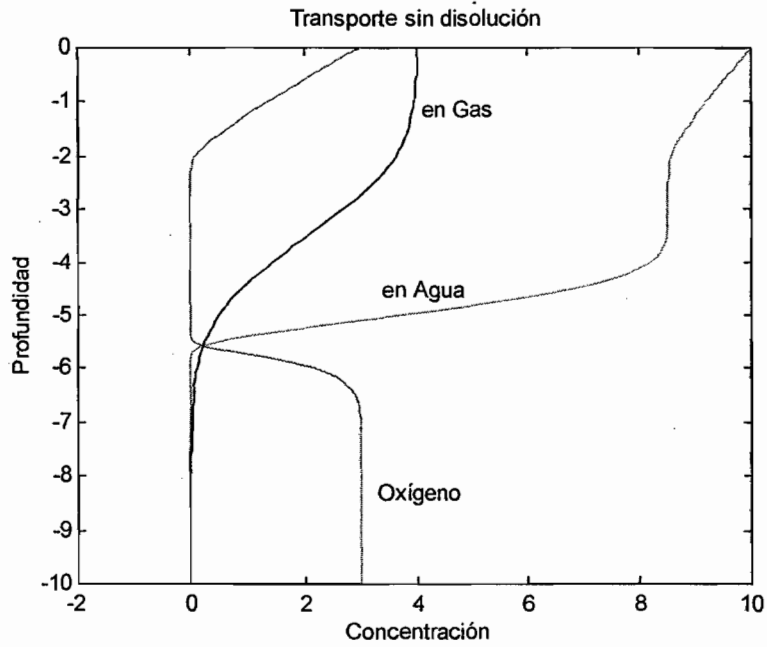
De acuerdo con los resultados mostrados en las gráficas de la Figura 5.23, se puede observar que el proceso de biodegradación es menos eficiente cuando hay reacciones de disolución. Este ejemplo muestra claramente, que la fase NAPL en condiciones de saturación residual, es una fuente permanente de contaminación, lo que es consistente con la teoría y con observaciones experimentales. De hecho, se puede ver que la disminución original en la concentración de especies orgánicas en agua, se revierte una vez que se ha agotado el oxígeno. Por lo tanto, para que la restauración sea permanente, sería necesaria la adición de oxígeno y estimular con ello la degradación biológica. Para evaluar la eficacia de esta estrategia y con un modelo matemático como herramienta, sería necesario incluir en la simulación, el balance de masa del oxígeno en gas y cuantificar su disolución en agua.

La distribución de especies en agua, es consistentes con los resultados obtenidos para el mismo problema en una fase. La similitud con éstos se debe a

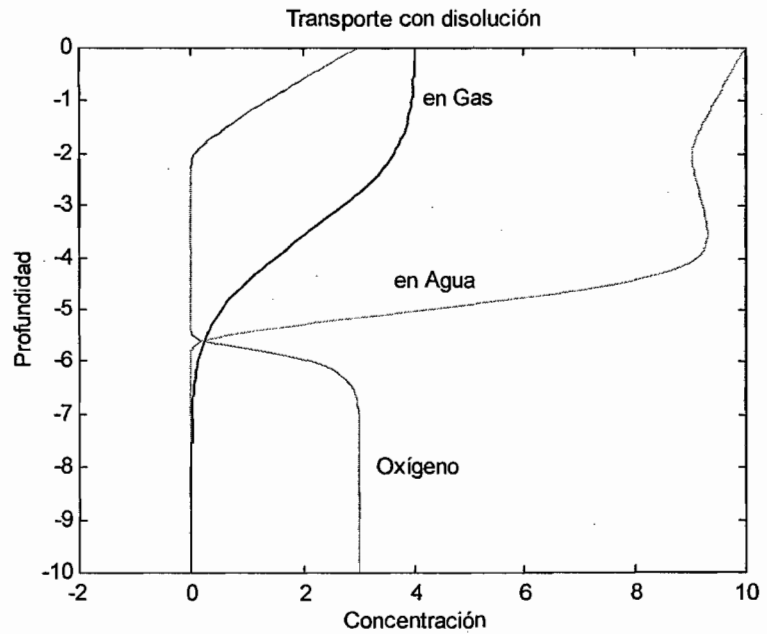
que la saturación de fase es alta y a que las propiedades físicas de las fases no cambian con el tiempo. A lo que se suma el hecho de que solamente se tomó en cuenta el proceso de infiltración de agua. Es decir, al despreciar el ascenso por capilaridad se eliminó la histéresis en el modelo K-S-P. Con todo esto, se obtuvo un patrón de flujo relativamente estable.

Por otra parte, la solución de la ecuación de transporte de especies orgánicas en gas, refleja el hecho de que el transporte en esta fase, por lo general no es predominantemente advectivo. Y las curvas que describen la distribución de especies son más suaves.

Se optó por definir este escenario, simplificado en cierto sentido, porque se podía tener una idea a priori de la solución, lo que resulta más apropiado para validar la solución numérica propuesta en este trabajo.



a)



b)

Figura 5.23 Resultados obtenidos en la simulación del problema completo. a) Transporte sin reacciones de disolución b) transporte con reacciones de disolución.

CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrollo un modelo matemático y numérico para simular el desplazamiento vertical de hidrocarburos en el subsuelo. En la formulación del modelo se incluyeron ecuaciones constitutivas para cuantificar procesos de biodegradación con una cinética de tipo Monod en donde la tasa de biodegradación depende de la concentración de la biomasa y de los compuestos involucrados.

Para obtener la solución numérica se definieron las variables primarias mediante un algoritmo de tipo secuencial que garantiza que en cada iteración se actualiza sólo una de las variables. Se aplicó el método de colocación Trefftz-Herrera para discretizar las derivadas en el espacio y se utilizó el esquema Θ de descomposición de operadores con el fin de desacoplar los términos de reacción en las ecuaciones de transporte. Con el procedimiento así desarrollado, primero se resolvieron ecuaciones en el estado estacionario y la ecuación de transporte de una sola especie en el estado transitorio con el fin de comparar con soluciones analíticas conocidas así como con los métodos de diferencias finitas y elemento finito. En estos ejercicios se pudo observar el comportamiento de las soluciones así como las ventajas que representa en relación con otras metodologías.

De acuerdo con los resultados de este trabajo, las ventajas de la formulación de flujo fraccional en combinación con el algoritmo secuencial son:

1. Es muy flexible para variar el número de fases y componentes que intervienen en el proceso global.
2. Da la posibilidad resolver con métodos diferentes cada una de las ecuaciones del sistema. Esto permite seleccionar el método más apropiado en cada caso.
3. La solución en su conjunto es paralelizable. Por ejemplo, en cada iteración se pueden resolver en paralelo primero las ecuaciones de flujo y después las de transporte.
4. Su extensión a dos o tres dimensiones no representa dificultades adicionales.

El método de Picard es apropiado para el tratamiento de términos no lineales. Al simplificarse el problema de flujo, definiendo a una de las fases como inmóvil, no pudo evaluarse el esquema iterativo entre las dos ecuaciones de saturación de fase. Sin embargo, si éste fuera ineficiente, tomando en cuenta las características de la solución propuesta, es posible resolver ambas ecuaciones en forma simultánea. En este caso cambiaría la dimensión de la matriz resultante.

El esquema Θ de descomposición de operadores y la forma en que se definieron los sub-problemas, son adecuados para la solución del sistema de ecuaciones de transporte de especies biodegradables y sujetas a otros procesos de transferencia de masa. De acuerdo con los experimentos numéricos que se llevaron a cabo, se puede observar que tiene las siguientes propiedades:

1. Por ser un método de segundo orden, el error adicional que se introduce no es significativo.
2. Este método es flexible y muy eficiente para variar el número de compuestos involucrados. Esto se debe a que la matriz de coeficientes que involucra a la advección y la difusión, se invierte solamente una vez en cada paso en el tiempo, sin importar el número de especies involucradas.
3. Es consistente con las condiciones de frontera del problema original.
4. Al desacoplar las ecuaciones de transporte no es necesario resolver sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales.
5. Puede extenderse sin ambigüedades a problemas en dos o tres dimensiones, en este caso, sólo cambia el número de diagonales distintas de cero en la matriz de coeficientes.

El método de colocación Trefftz-Herrera resulta ser muy adecuado para resolver la ecuación de la presión del agua. Esto se debe a que se trata de una ecuación elíptica y como se puede observar en los ejemplos que se realizaron en el estado estacionario tiene mejor comportamiento que los métodos de diferencias

finitas y elemento finito. En problemas que evolucionan en el tiempo presenta las siguientes características:

1. Aun cuando mantiene un grado de precisión similar al método de elemento finito, su ventaja frente a éste radica en que no se requiere de algún procedimiento de integración en los términos advectivo y difusivo, que son no lineales y variables. Esto puede significar mayor eficiencia computacional en problemas de esta clase.
2. En el estado transitorio, se tiende a un suavizamiento del frente. Esta dificultad disminuye cuando se aplica el esquema de descomposición de operadores. Esto probablemente se debe a que cuando no hay reacción se tiene un método de tipo Runge-Kutta.
3. A diferencia del método de colocación tradicional tiene la ventaja de que la aproximación se calcula en los nodos de la discretización, además de que se puede optar o no por calcular la primera derivada.

Este modelo matemático y numérico es apropiado para resolver problemas de transporte, cuando menos en una dimensión y puede generalizarse para simular procesos que involucren escenarios más complicados, como la interacción de más compuestos en procesos de biodegradación, o bien, la influencia de vapor de agua si se quiere evaluar remediación mediante inyección de vapor. Por otra parte, resulta apropiado para diseñar y cuantificar experimentos de columna cuyo propósito sea analizar y evaluar la eficiencia de procedimientos de restauración en esta escala.

BIBLIOGRAFÍA

Abriola, Linda M. and George F. Pinder, **1985a**, *A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds 1. Equation Development*, Water Resources Research, Vol. 21, No. 1, pp. 11-18.

Abriola, Linda M. and George F. Pinder, **1985b**, *A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds 2. Numerical Simulation*, Water Resources Research, Vol. 21, No. 1, pp. 19-26.

Ahlfeld, D.P., J.M. Mulvey, G. F. Pinder and E. Wood, **1988**, *Contaminated Groundwater Remediation Design Using Simulation, Optimization and Sensitivity Theory: 1.- Model Development*, Water Resources Research, Vol. 24, No. 3, pp. 431-441.

Allen, M., I. Herrera and G.F. Pinder, **1987**, *Mathematical Modeling in Science and Engineering*, John Wiley.

Appelo, C. A. J. and D. Postma, **1993**, *Geochemistry, Groundwater and Pollution*, A. A. Balkema, Rotterdam.

Aziz, K. and A. Settari, **1979**, *Petroleum Reservoir Simulation*, Applied Science Publishers LTD, London.

Bear, Jacob, **1979**, *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill, New York.

Bear, Jacob; **1972**, *Dynamics of Fluids in Porous Media*, American Elsevier.

Berglund, Sten, **1997**, *Aquifer Remediation by Pumping: A Model for Stochastic-Advective Transport with Nonaqueous Phase Liquid Dissolution*, Water Resources Research, Vol. 33, No. 4, pp. 649-661.

Binning, P. and M. A. Celia, **1999**, *Practical Implementation of the Fractional Flow Approach to Multi-phase Flow Simulation*; Advances in Water Resources, Vol 22, No. 5, pp. 461-478.

Bremer, B. M., R: C. Mier J. Noriega y M. Peña; **1997**; *Problemática del Agua en Monterrey N.L.*, Centro de Calidad Ambiental, ITESM.

Bustani A. Albert y P. W. Mackay, **1997**, *Crisis de Agua*, Centro de Calidad Ambiental, ITESM.

Celia, M.A., Russell, T.F., Herrera, I. y Ewing, R.E., **1990**, *An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation*; Advances in Water Resources, Vol. 13, No. 4, pp.187-206.

Celia, M.A., Kindred, J.S. y Herrera, I., **1989**, *Contaminant Transport and Biodegradation. 1: A Numerical Model for Reactive Transport in Pours Media*, Water Resour. Res., Vol. 25, No.6, pp. 1141-1148.

Chapelle, Francis H., **1993**, *Ground-Water Microbiology and Geochemistry*, Cap. 12, p. 322-357. John Wiley and Sons, New York.

Chapelle, Francis H., **1998**, *Biorremediation of Petroleum Hydrocarbon Contaminated Groundwater: The Perspectives of History and Hydrology*, Ground Water

Cherry, J.A. and S Feenstra, **1990**, *Dense Organic Solvents in Groundwater: Conceptual Models and Implications*, in " Dense Organic Solvents in Groundwater", Cap. 1.

Cherry, John A., **1995**, *Status of Groundwater Remediation*, Forum in Mexico on Groundwater Remediation, México, D.F..

Ellerd, M. G., J.M. Massmann, D.P. Schwaegler, **1999**, *Enhancements for Passive Vapor Extraction: The Hanford Study*, Ground Water, Vol. 37, No. 3, pp. 427-437.

Fischer, U., R. Schlin, and M. Keller, **1996**, *Experimental and Numerical Investigation of Soil Vapor Extraction*, Water Resources Research, Vol. 32, No. 13, pp. 3413-3427.

François, O., M. J. Pinto and S. M. Gorelick, **1996**, *A Physically based Model for Air Lift Pumping*, Water Resources Research, Vol. 32, No. 8, pp. 2383-2399.

Freeze, R.A. and J. A. Cherry, **1979**, *Groundwater*, Perentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

Glowinsky, Roland, **2000**, *Operator-Splitting Methods for Initial Value Problems: Application to the Atmospheric Dispersion Equations*, Lectures 6-8, University of Houston.

González, Rosa L. y R. Quintero, **1995**, *La Biotecnología Ambiental en México*, Memorias del Segundo Minisimosio Internacional sobre Remoción de Contaminantes de Aguas y Suelos, I. Kuppsuamy y C. Durán de Bazúa, Eds., México, D.F..

Gorelick, Steven M., R. A., Freeze, D. Donohue and J. F. Kelly, **1993**, *Groundwater Contamination: Optimal Capture and Containment*, Lewis Publishers.

Gray, W. G. and G. F. Pinder, **1976**, *An Analysis of the Numerical Solution of the Transport Equation*, Water Resources Research, Vol. 12, No. 3, pp. 547-555.

Guarnaccia, Joseph F., George F. Pinder and I. Herrera, **1995**, *A Mathematical and Numerical Model for the Study of Transport and Fate of NAPLs in Variably Liquid-Saturated Granular Soils: Theory Development and Simulator Documentation*; EPA Cooperative Agreement No. CR-820499.

Hassanizadeh, S.M. and W.M. Gray, **1993**, *Toward an Improved Description of the Physics of Two-Phase Flow*, *Advances in Water Resources Research*, Vol. 16, pp. 53-67.

Herrera, I., **1995** *Trefftz-Herrera Domain Decomposition*, *Advances in Engineering Software*, Vol. 24, pp. 43-56.

Herrera, I., Ewing, R.E., Celia, M.A. y Russell, T., **1993**, *Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework*. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 9, No. 4, pp. 431-457.

Herrera, I., **1985a** *Unified Approach to Numerical Methods. Part 1. Green's Formulas for Operators in Discontinuous Fields*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 1, No. 1, pp. 12-37.

Herrera, I., **1985b**, *Unified Approach to Numerical Methods. Part 2. Finite Elements, Boundary Methods and its Coupling*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 1, No. 3, pp. 159-186.

Herrera, I., **1987**, *The Algebraic Theory Approach for Ordinary Differential Equations: Highly Accurate Finite Differences*; *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 3, No. 3, pp. 199-218.

Herrera, R. Ismael, **1987**, *Nota sobre las condiciones de incompresibilidad en un medio poroso*; *Comunicaciones Técnicas del Instituto de Geofísica, UNAM, Serie Docencia y Divulgación No.7*.

Herrera, I., **1994**, *Contaminación y Remediación y sus Modelos Matemáticos*, *Memorias de la Reunión Nacional Agua Subterránea en México: Diagnóstico y Perspectivas de Investigación*, Ismael Herrera Revilla y Alvaro Aldama, Eds., Instituto Mexicano de Tecnología del Agua.

Herrera, I., Chargoy, L. y Alduncin, G, **1985**, *Unified Approach to Numerical Methods. part 3. Finite Differences and Ordinary Differential Equations*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 1, pp. 241-258.

Herrera, I., Ewing, R.E., Celia, M.A. y Russell, T., **1993**, *Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework*. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 9, No. 4, pp. 431-457.

Herrera, I., Guarnaccia, J. y Pinder, G.F., **1994**, *Domain Decomposition Method for Collocation Procedures*, Computational Methods in Water Resources X, Vol. 1, Eds. A. Peters, et. al., Kluwer Academic Publishers.

Herrera, R. I. y M. Allen, **1986**, *Modelación Computacional en Ciencias e Ingeniería: Formulación de las Ecuaciones Básicas*; Comunicaciones Técnicas del Instituto de Geofísica, UNAM, Serie Docencia y Divulgación No. 9.

Herrling, B., W. Buerman and J. Stam, **1992**, *In Situ Remediation of Volatile Contaminants in Groundwater by a New System of Vacuum-Vaporizers Wells*, en K.U. Weyer, Ed. Subsurface Contamination by Immiscible Fluids, Balkema Rotterdam, p.351-359.

Hughes, B.M., R.W. Gillham and C. A. Mendoza, **1992**, *Transport of Trichloroethylene Vapors in the Unsaturated Zone: A Field Experiment*, en K.U. Weyer, Ed. Subsurface Contamination by Immiscible Fluids, Balkema Rotterdam, p. 81-87.

Huyakorn, Peter S. and George F. Pinder; **1983**; *Computational methods in subsurface flow*; Academic Press, London.

Istok, Jonathan, **1989**, *Groundwater Modeling by the Finite Element Method*; American Geophysical Union, Water Resources Monograph, No. 13.

Johnson, P. C., M. W. Kemblowski and J. D. Colthart, **1990**, *Quantitative Analysis for the Cleanup of Hydrocarbon Contaminated Soils by In-Situ Soil Venting*, Ground Water, Vol. 28, No. 3, pp. 413-429.

Johnson, R. L., K. A. McCarthy, M. Perrott and C. A. Mendoza, **1992**, *Density-driven Transport: Physical and Numerical Modeling*, en K.U. Weyer, Ed. Subsurface Contamination by Immiscible Fluids, Balkema Rotterdam, p. 19-27.

Kindred, J. Scott and Michel A. Celia, **1989**, *Contaminant Transport and Biodegradation 2. Conceptual Model and Test Simulations*, Water Resources Research, Vol. 25, No. 6, pp. 1141-1148.

Kinzelbach, W., W. Schäfer and J. Herzer, **1991**, *Numerical Modeling of Natural and Enhanced Denitrification Processes in Aquifers*, Water Resources Research, Vol. 27, No. 6, pp. 1123-1135.

Knox, R. C., D. A. Sabatini, J. H. Harwell, R. E. Brown, C. C. West, F. Blaha and C. Griffin, **1997**, *Surfactant Remediation Field Demonstration Using Vertical Circulation Well*, Ground Water, Vol. 35, No. 6, pp. 948-953.

Knox, Robert C., Sabatini, David A. and Canter, Larry W., **1993**, *Subsurface Transport and Fate Processes*, Lewis Publishers.

Kueper, B. H. and E. O. Frind, **1992**, *Numerical Modeling of Multiphase/Multicomponent Flow and Transport in Porous Media: An Overview*, en K.U. Weyer, Ed. Subsurface Contamination by Immiscible Fluids, Balkema Rotterdam, p. 3-17.

Lindqvist, R., J. S. Cho and Carl G. Enfield, **1994**, *A Kinetic Model for Cell Density Dependent Bacterial Transport in Porous Media*, *Water Resources Research*, Vol. 30, No. 12, pp. 3291-3299.

Lucia, P. C., **1996**, *Evaluation of Remedial Systems and Strategies*, en M.M. Aral, Ed., *Advances in Groundwater Pollution Control and Remediation*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands.

Luckner, L.M., T. van Genuchten and D.R.Nielsen, **1989**, *A Consistent Set of Parametric Models for the Two Phase Flow of Immiscible Fluids in the Subsurface*, *Water Resources Research*, Vol. 25, No. 10, pp. 2187-2193.

McNab, W. W., Jr. and B. P. Dooker, **1998**, *Uncertainty Analyses of Fuel Hydrocarbon Biodegradation Signatures in Ground Water by Probabilistic Modeling*, *Ground Water*, Vol. 36, No. 4, p.691-698.

Minsker, B.S. and C. Shoemaker, **1998**, *Quantifying the Effects of Uncertainty on Optimal Groundwater Bioremediation Policies*, *Water Resources Research*, Vol. No. pp. 3615-3625.

National Research Council, **1990**, *Groundwater Models, Scientific and Regulatory Applications*, National Academic Press, Washington, D. C.

Oya, S. and A. J. Valocchi, **1998**, *Transport and Biodegradation of Solutes in Stratified Aquifers under Enhanced In Situ Bioremediation Conditions*, *Water Resources Research*, Vol. 34, No. 12, pp. 3323-3334.

Parker, J.C., R.L. Lenhard and T. Kuppusamy, **1987**, *A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media*, *Water Resources Research*, Vol. 23, No. 4, pp. 618-624.

Powers, S. E., C. O. Loureiro, L. M. Abriola and W. J. Weber Jr., **1991**, *Theoretical Study of the Significance of Nonequilibrium Dissolution of Nonaqueous Phase Liquids in Subsurface Systems*, *Water Resources Research*, Vol. 27, No. 4, pp. 463-477.

Procuraduría Federal de Protección al Ambiente, **1999**, *Boletín Informativo*.

Rathfelder, K.M., J.R. Lang and L. Abriola, **2000**, *A Numerical Model (MISER) for the Simulation of Coupled Physical, Chemical and Biological Processes in Soil*

Vapor Extraction an Bioventing Systems, Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 43, pp.239-270.

Rauber, M., F. Stauffer, P. Huggenberg and T. Dracos, **1998**, *A Numerical Three-Dimensional Conditioned-Unconditioned Stochastic Facies Type Model Applied to a Remediation Well System*, Water Resources Research, Vol. 34, No. 9, pp. 2225-2233.

Reeves, H. W. and L. Abriola; **1994**; *An Iterative Compositional Model for Subsurface Multiphase Flow*; Journal of Contaminant Hydrology; Vol. 15, pp. 249-276.

Rizzo, Donna M. and D. E. Dougherty, **1996**, *Design Optimizaation for Multiple Managemente Period Groundwater Remediation*, Water Resources Research, Vol. 32 No. pp. 3615-3625.

Rusell, Thomas F., **1995**, *Modeling of Multiphase Multicontaminant Transport in the Subsurface*, Reviews of Geophysics, Supplement, pp. 1035-1047.

Sabatini, D. A., R. C. Knox, J. H. Harwell, T. Soerens, L. Chen, R. E. Brown and C. C. West, **1997**, *Design of a Surfactant Remediation Field Demonstration Based on Laboratory and Modeling Studies*, Ground Water, Vol. 35, No. 6, pp. 954-963.

Sawyer, Ch S., David P. Ahlfeld and A. J. King, **1995**, *Groundwater Remediation Design Using a Three Dimensional Simulation Model and Mixed-Integer Programming*, Water Resources Research, Vol. 31, No. 5, pp. 1373-1385.

Schmelling, Stephen G., **1992**, *An Overview of Aquifer Remediation: NAPLs, Pump and Treat and Biorremediation*, en en K.U. Weyer, Ed. Subsurface Contamination by Immiscible Fluids, Balkema Rotterdam, p.39-.

Sun, Y-H., M. W. Davert and W. W-G Yeh, **1996**, *Soil Vapor Extraction System Design by Combinatorial Optimization*, Water Resources Research, Vol. 32, No. 6, pp. 1863-1873.

Thomson, N.R., J.F. Sykes and D. Van Vliet, **1997**, *A Numerical Investigation into factors Affecting Gas and Aqueous Phase Plumes in the Subsurface*, Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 28, pp.39-70.

Tebes-Stevens, C.L., and A.J. Valocchi, **2000**, *Calculation of Reaction Parameter Sensivity Coefficients in Multicomponent Subsurface Transport Models*; Advances in Water Resources, Vol 23, No. 5, pp. 591-611.

Testa, S. and D. L. Winegardner, **1992**, *Restoration of Petroleum Contaminated Aquifers*, Lewis Publishers.

Våg, Jan E., W. Hong and H. K. Dahle, **1996**, *Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods for Systems of Nonlinear Advective-Diffusive-Reactive Transport Equations*, *Advances in Water Resources*, Vol. 19, No. 5, pp. 297-315

Van der Ham, A. G. and H.J.H. Browsers, **1998**, *Modeling and Experimental Investigation of Transient Non Equilibrium Mass Transfer During Steam Stripping of a Nonaqueous Phase Liquid in Unsaturated Porous Media*, *Water Resources Research*, Vol. 34, No. 1, pp. 47-54.

Wadell, D. W. and J. C. Parker, **1997**, *Simulating Recover of Light Nonaqueous Phase Liquid from Unconfined Heterogeneous Aquifers*, *Ground Water*, Vol. 35, No. 6, pp. 938-947.

Weber, W. J. Jr., K. D. Pennell, T. S. Dekker and L. M. Abriola, **1996**, *Sorption and Retardation of Organic Contaminants in Subsurface Systems: Effects on Transport and Fate*, en M. M. Aral Ed., *Advances in Groundwater Pollution Control and Remediation*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, p. 1-31.

Weisbord, N., M. R. Niemet, T. McGinnis, and J. S. Selker, **2003**, *Water Vapor Transport in the Vicinity of Imbibing Saline Plumes: Homogeneous and Layered Unsaturated Porous Media*, *Water Resources Research*, Vol. 39, No. 6, pp. 1145-1152.