



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**Análisis Paramétrico de  
Medios Porosos para  
Estudios de Contaminación  
en Acuíferos**

**TESIS**

Que para obtener el título de  
**Ingeniero Geofísico**

**P R E S E N T A**

Marco Antonio Noguez Morales

**DIRECTOR DE TESIS**

Dr. Josué Tago Pacheco



**Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2017**



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.

## Resumen

La creciente preocupación por la correcta administración y remediación de acuíferos ha impulsado extensos estudios de los mecanismos de transporte en aguas subterráneas mediante la modelación matemática. Dichos mecanismos se conocen como Dispersión Mecánica y Difusión Molecular. En éste trabajo se revisaron los conceptos y la teoría para la formulación axiomática de modelos matemáticos de sistemas continuos macroscópicos y el procedimiento para el desarrollo de los modelos matemáticos de flujo de fluidos y transporte de soluto en medios porosos. Así mismo, se resolvió el modelo de transporte de soluto en medios porosos sobre un acuífero confinado, homogéneo e isótropo, por el Método de Diferencias Finitas, mediante la elaboración de un programa en lenguaje Fortran 2008. Finalmente, haciendo uso del programa se realizó un análisis de sensibilidad de los coeficientes de dispersividad dinámica transversal y longitudinal, así como de las condiciones bajo las cuales predomina la Difusión Molecular o la Dispersión Mecánica por medio del Número de Peclet. Éstos resultados resaltan la importancia de determinar las características físicas de un acuífero como un estudio previo a la implementación de técnicas de remediación.

## **Abstract**

Growing concern about administration and remediation of aquifers has led to extensive studies of ground-water transport processes using mathematical models. These processes are known as Molecular Diffusion and Mechanical Dispersion. This thesis reviews the theory and concepts necessary to formulate mathematical models of continuous macroscopic systems and it shows the development of Ground-Water Flow and Solute Transport models. In addition, the solute transport model is solved numerically using the Finite Difference Method considering an homogeneous isotropic confined aquifer, through the development of a code based in Fortran 2008 language. This program is then used to conduct a sensibility study of longitudinal and transversal dynamic dispersivity coefficients, as well as to evaluate the relative contribution of mechanical dispersion and molecular diffusion in solute transport using the Peclet number. These results show the importance of understanding and quantifying the physical properties of an aquifer as a previous study to the implementation of remediation techniques.

*What distinguishes a mathematical model from, say, a poem, a song, a portrait or any other kind of "model", is that the mathematical model is an image or picture of reality painted with logical symbols instead of with words, sounds or watercolors.*

*John L. Casti*

# Agradecimientos

A mis padres:

Por su infinito amor, paciencia, cariño y apoyo incondicionales para concluir esta etapa de mi vida.

A mis hermanos:

Por estar conmigo en todo momento, apoyándome en todos los aspectos de mi vida, y por todos los momentos felices que compartimos.

A mi asesor:

Por haberme brindado la oportunidad de ser su tesista y alumno, así como por su paciencia, dedicación, amistad y consejos que me han guiado en mi formación académica.

A mis amigos:

Por los buenos momentos, por todo su apoyo y por acompañarme en esta etapa de mi vida.

# Índice general

Índice de figuras	v
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2 Marco teórico</b>	<b>3</b>
2.1 Modelación Matemática . . . . .	3
2.1.1 Descripción Material y Espacial de Sistemas Continuos . . . . .	3
2.1.2 Propiedades Intensivas y Extensivas . . . . .	4
2.1.3 Ecuaciones de Balance Global . . . . .	6
2.1.4 Ecuaciones de Balance Local . . . . .	7
2.2 Flujo de fluidos en medios porosos. . . . .	9
2.2.1 El modelo básico de flujo de fluidos en medios porosos . . . . .	11
2.2.2 Compresibilidad del fluido y elasticidad de la matriz sólida . . . . .	11
2.2.3 La Ley de Darcy . . . . .	14
2.2.4 Ecuaciones Generales de Flujo de Fluidos en Medios Porosos . . . . .	16
2.2.5 Las Condiciones de Salto . . . . .	17
2.3 Transporte de Solute en Medios Porosos . . . . .	18
2.3.1 El Modelo Básico de Transporte de Solute en Medios Porosos . . . . .	18
2.3.2 Procesos de Transporte . . . . .	19
2.3.3 Ecuación General de Transporte de Solute en Medios Porosos . . . . .	25
<b>3 Metodología</b>	<b>27</b>
3.1 Método de Diferencias Finitas . . . . .	27
3.1.1 Aproximaciones en Diferencias Finitas . . . . .	29
3.2 Discretización del Problema . . . . .	30
3.2.1 Características del Modelo Matemático . . . . .	30
3.2.2 Método de Paso Fraccionado . . . . .	31
3.2.3 La Ecuación de Advección . . . . .	31
3.2.4 La Ecuación de Difusión . . . . .	34
3.2.5 Condiciones Iniciales y de Frontera . . . . .	35

<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>38</b>
4.1	Verificación numérica . . . . .	38
4.1.1	Advección . . . . .	38
4.1.2	Difusión . . . . .	39
4.2	Análisis de sensibilidad . . . . .	40
4.2.1	Dispersión Longitudinal y Transversal . . . . .	40
4.2.2	Dispersión - Difusión . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>46</b>
	<b>Apéndice</b>	<b>49</b>
	<b>Apéndice A Advection-Diffusion Equation Solver (ADES)</b>	<b>50</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>52</b>

# Índice de figuras

2.1	Medio poroso formado por solido, $S$ , y agua, $w$ . . . . .	10
3.1	Aproximaciones de $u'(\tilde{x})$ , interpretadas como la pendiente de las rectas secantes. (Tomada de (Leveque 2007)) . . . . .	28
3.2	Ejemplo de una discretización del dominio para un problema en dos dimensiones como un espaciamiento entre nodos igual en ambas direcciones ( $\Delta x = \Delta z$ ). . . . .	29
3.3	Advección en dos dimensiones, con velocidades constantes en direcciones X y Z iguales a 0.5. Fuente puntual ubicada a 0.25 y 0 de profundidad, constante e igual a 1. (a) Esquema de diferencias finitas centradas. (b) Esquema Upwind. . . . .	32
3.4	Advección en dos dimensiones, con velocidades constantes en direcciones X y Z iguales a 0.5. Fuente puntual ubicada a 0.25 y 0 de profundidad, constante e igual a 1, resuelto mediante el Método de Lax-Wendroff 2D. . . . .	34
3.5	Acuífero confinado, con velocidad de partícula en dirección del eje $x$ , fuente de soluto $g_S$ en $z = 0$ . . . . .	36
4.1	Verificación numérica del Método de Lax-Wendroff. Los parámetros de la simulación son: Velocidad de partícula igual a $u = 0,5[km/día]$ , flujo laminar, fuente de soluto constante e igual a 1, los pasos de discretización espacial y temporal son: $h = 0,01$ y $k = 0,015$ (por lo que el número de Courant es $\nu = 0,75$ ). . . . .	39
4.2	Verificación numérica del esquema completamente implícito. Los parámetros de la simulación son: Coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal $D_L = 1$ y transversal $D_T = 0$ , velocidad de partícula $v = 0$ . Los pasos de discretización espacial y temporal son $h = 0,01$ y $k = 0,0001$ y 100 pasos en tiempo. . . . .	40
4.3	Efecto del cociente de dispersividades sobre la forma de la pluma contaminante. Los parámetros de la simulación son: Velocidad de partícula $v = 0,5 [km/día]$ flujo laminar, coeficiente de dispersividad dinámica longitudinal $\alpha_L = 0,009144[Km]$ , fuente de soluto $g_s = 1$ constante y tiempo $t = 0,8[días]$ . Valores de dispersividad tomados de (Fetter 1999) . . . . .	41

4.4	Coefficiente de dispersión longitudinal en arenas no consolidadas. Los puntos de izquierda a derecha corresponden con números de Peclet iguales a 0,004, 4 y 40, respectivamente (basada en (Perkins y Johnston 1963)).	43
4.5	Concentración relativa para distintos números de Peclet de la forma $p = v_x L / D_L$ variando únicamente el coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal. La línea continua representa la solución numérica para $D_L = 0$ . Los parámetros de la simulación son: velocidad de partícula $v_x = 0,1$ [km/día], flujo laminar, fuente constante e igual a 1, $D_L = 5, 0,005$ y $0,0005$ [ $km^2$ /día], respectivamente. . . . .	43
4.6	Coefficiente de dispersión hidrodinámica transversal para arenas no consolidadas. Los puntos de izquierda a derecha corresponden con números de Peclet iguales a 0,4, 40 y 4000 (basada en (Perkins y Johnston 1963)).	44
4.7	Concentración relativa para distintos números de Peclet de la forma $p = v_x L / D_T$ variando únicamente el coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal. La línea continua representa la solución numérica para $D_T = 0$ . Los parámetros de la simulación son: velocidad de partícula $v_x = 0,1$ [km/día], flujo laminar, fuente constante e igual a 1, $D_T = 0,05, 0,0005$ y $0,000005$ , respectivamente. . . . .	45

# Capítulo 1

## Introducción

Anteriormente, se creía que el agua era abundante y las investigaciones en aguas subterráneas estaban enfocadas principalmente en determinar el potencial de suministro de los acuíferos (Konikow 2008). Hoy en día se reconoce la escasez de los recursos naturales, provocada en gran medida por la sobre-explotación y destrucción del medio ambiente.

El estudio de acuíferos ha adquirido una gran importancia durante los últimos años por la insuficiencia del recurso, como consecuencia de su continua creciente demanda. Aunado a lo anterior, la actividad industrial es la principal causa de contaminación en aguas subterráneas, que trae como consecuencia una disminución de la calidad de la misma. La migración de un contaminante en un acuífero suele ser un proceso lento, y en ocasiones, puede tomar décadas para ser detectado. Ésta migración es llevada a cabo por mecanismos de transporte de soluto que ocurren por el movimiento molecular y el tránsito del agua a través del medio poroso, conocidos como *difusión molecular* y *dispersión mecánica*, respectivamente.

Debido a que la contaminación en acuíferos representa un serio problema a largo plazo, la necesidad de predecir la distribución espacial y temporal de la concentración de un contaminante en medios porosos, se ha vuelto indispensable para la planeación e implementación de procesos de remediación, con el fin de evitar riesgos a la salud y al medio ambiente.

Una herramienta adecuada para resolver este problema es la *Modelación Matemática y Computacional*, que permite la predicción del comportamiento de un sistema. Ésta requiere la construcción de un modelo del sistema que imita el comportamiento del mismo (Herrera y Pinder 2012).

Los modelos matemáticos son los más usados en la actualidad debido a su versatilidad y eficiencia. Éstos son producto de la integración del conocimiento científico y tecnológico, en términos de ecuaciones constitutivas (Herrera y Pinder 2012). Los

modelos matemáticos son ecuaciones diferenciales parciales que se obtienen de balances de propiedades extensivas con propiedades intensivas asociadas. Éstos modelos son resueltos en la mayoría de los casos empleando métodos numéricos como *Diferencias finitas*, *Elemento finito* ó *Volumen finito*.

La modelación de aguas subterráneas empieza con el entendimiento conceptual del problema, y prosigue con la traducción del sistema físico en términos matemáticos, que conduce a las ecuaciones de flujo y de transporte en medios porosos. Éstas ecuaciones, sin embargo, son a menudo simplificadas mediante suposiciones válidas para formar una variedad de ecuaciones derivadas más sencillas. El entendimiento de las ecuaciones y sus condiciones, tanto iniciales como de frontera, es un requisito previo a la formulación de cualquier problema de modelado en hidrogeología (Mercer y Faust 1980).

Este trabajo de tesis tiene por objetivos generales: (1) revisar los conceptos básicos de la teoría de la modelación matemática y computacional para el desarrollo de modelos de sistemas macroscópicos, (2) describir el procedimiento para el desarrollo de los modelos de flujo y transporte en medios porosos empleando las ecuaciones de balance, y (3) desarrollar un software en lenguaje *Fortran 2008* para la resolución de la ecuación diferencial de transporte de soluto en medios porosos mediante el método de Diferencias Finitas. Se realizaron simulaciones sobre acuíferos confinados, homogéneos e isótropos, considerando conocidas las velocidades de partícula del fluido, para analizar los mecanismos de transporte en la distribución espacio-temporal de la concentración de soluto.

La teoría de la modelación de acuíferos presentada en esta tesis se basa en la formulación axiomática introducida en el libro "*Mathematical Modeling in Science and Engineering. An Axiomatic Approach*" (Herrera y Pinder 2012).

# Capítulo 2

## Marco teórico

### 2.1 Modelación Matemática

El estudio de sistemas macroscópicos, como el transporte de contaminantes en un acuífero, se lleva a cabo con los fundamentos teóricos de la *Mecánica Del Medio Continuo*, en donde se considera que el sistema es continuo; es decir abarca todo el espacio que ocupa (Herrera y Pinder 2012).

#### 2.1.1 Descripción Material y Espacial de Sistemas Continuos

Definimos a un cuerpo,  $\mathcal{B}$ , como un conjunto de partículas que, en un tiempo dado  $t \in (-\infty, \infty)$ , ocupa un dominio del espacio  $B(t)$ . Considerando además un sistema continuo de una fase, se parte de la suposición de que para cualquier punto  $\underline{x} \in B(t)$ , existe una y solo una partícula identificada con dicho punto en el cuerpo  $\mathcal{B}$ .

La identificación de cualquier partícula para cualquier tiempo, es a través de su posición en un tiempo de referencia  $t_0$ . Por lo tanto, si  $\underline{p}(\underline{X}, t)$  es el vector de posición de la partícula  $\underline{X}$  del cuerpo para un tiempo inicial como referencia  $t = 0$ , se satisface la siguiente identidad:

$$\underline{p}(\underline{X}, 0) \equiv \underline{X}. \quad (2.1.1)$$

Las coordenadas del vector  $\underline{X} \equiv (X_1, X_2, X_3)$  se conocen como *coordenadas materiales* y describen la posición, en un tiempo de referencia, de cada una de las partículas que integran al medio continuo. Mientras que la función  $\underline{p}(\underline{X}, t)$  recibe el nombre de *función de posición*. Las coordenadas de la posición de la partícula en el espacio físico reciben el nombre de *coordenadas espaciales*, y se denotan como  $\underline{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$ .

La relación que existe entre las coordenadas materiales y las coordenadas espaciales está dada por:

$$\underline{x} = \underline{p}(\underline{X}, t), \quad (2.1.2)$$

y

$$\underline{X} = \underline{p}^{-1}(\underline{x}, t). \quad (2.1.3)$$

De esta manera, manteniendo fija una partícula  $\underline{X}$  mientras transcurre el tiempo, la función de posición  $\underline{p}(\underline{X}, t)$  representa la trayectoria de la partícula, y su derivada con respecto al tiempo define la velocidad de partícula:

$$\underline{V}(\underline{X}, t) \equiv \frac{\partial \underline{p}}{\partial t}(\underline{X}, t). \quad (2.1.4)$$

La ecuación (2.1.4) permite conocer el valor de la velocidad de la partícula  $\underline{X}$  en un tiempo  $t$ , y se dice que es la *representación Lagrangiana* de la velocidad. Por otro lado, el valor de la velocidad en un punto  $\underline{x}$  del espacio físico, en un tiempo  $t$ , será igual a la velocidad de la partícula que pasa por dicho punto en el instante  $t$  (Herrera, Carrillo y Yates 2008), por lo tanto:

$$\underline{v}(\underline{x}, t) = \underline{V}(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t). \quad (2.1.5)$$

La ecuación (2.1.5) es llamada *representación Euleriana* de la velocidad.

## 2.1.2 Propiedades Intensivas y Extensivas

### Propiedades Intensivas

Las *propiedades intensivas* son funciones, ya sean escalares (como la temperatura) o vectoriales (como la velocidad de partícula en la ecuación (2.1.4)), que son definidas en cada tiempo, para cada partícula del cuerpo.

En general, esta clase de funciones puede ser expresada usando una *representación Lagrangiana*,  $\phi(\underline{X}, t)$  que se evalúa para la partícula  $\underline{X}$  en un tiempo  $t$ , o una *representación Euleriana*,  $\psi(\underline{x}, t)$  que se evalúa en la coordenada espacial  $\underline{x}$  al tiempo  $t$ .

La representación Lagrangiana y Euleriana de una misma propiedad debe satisfacer la siguiente condición, que se deriva de la ecuación (2.1.2):

$$\phi(\underline{X}, t) \equiv \psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t) = \psi(\underline{x}, t). \quad (2.1.6)$$

Por su parte, la ecuación (2.1.6) implica que:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \phi(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t). \quad (2.1.7)$$

La derivada parcial con respecto al tiempo de una propiedad intensiva en su representación Lagrangiana,  $\partial\phi(\underline{X}, t)/\partial t$ , es la tasa de cambio del valor de la propiedad intensiva con respecto al tiempo de la partícula  $\underline{X}$ ; mientras que la derivada parcial con respecto al tiempo de la representación Euleriana,  $\partial\psi(\underline{x}, t)/\partial t$ , de esa misma propiedad, es su tasa de cambio con respecto al tiempo, que ocurre en un punto fijo del

espacio  $\underline{x}$  (Herrera, Carrillo y Yates 2008).

Es útil obtener una expresión para evaluar  $\partial\phi(\underline{X}, t)/\partial t$  en términos de  $\psi(\underline{x}, t)$  de una propiedad, que se obtiene al diferenciar con respecto al tiempo la ecuación (2.1.6):

$$\frac{\partial\phi(\underline{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \frac{\partial\psi}{\partial \underline{p}}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \frac{\partial \underline{p}}{\partial t}(\underline{X}, t).$$

Usando la ecuación (2.1.2), en forma de componente:

$$\frac{\partial\phi(\underline{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\psi}{\partial x_i}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \frac{\partial p_i}{\partial t}(\underline{X}, t),$$

o bien, por la ecuación (2.1.4):

$$\frac{\partial\phi(\underline{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\psi}{\partial x_i}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) V_i(\underline{X}, t).$$

Ahora, empleando nuevamente la ecuación (2.1.6), se tiene:

$$\frac{\partial\phi(\underline{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\psi}{\partial x_i}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) v_i(\underline{p}(\underline{X}, t), t),$$

que se puede reescribir como:

$$\frac{\partial\phi(\underline{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{x}, t) + \nabla\psi \cdot \underline{v}(\underline{x}, t).$$

Finalmente, se define la *derivada material*  $D\psi/Dt$  como la derivada temporal de la representación Lagrangiana de una propiedad, en términos de su representación Euleriana, como:

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla\psi. \quad (2.1.8)$$

### Propiedades Extensivas

Las propiedades extensivas, denotadas como  $E(\mathcal{B}, t)$ , son funciones que están definidas para todo cuerpo  $\mathcal{B}$  de un sistema continuo. Éstas se pueden expresar como una integral sobre todo el dominio de  $\mathcal{B}$  como,

$$E(\mathcal{B}, t) \equiv \int_{\mathcal{B}(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.1.9)$$

donde  $\psi(\underline{x}, t)$  es una propiedad intensiva en representación Euleriana. La ecuación (2.1.9) establece una relación biunívoca entre las propiedades intensivas y extensivas.

Comúnmente, las propiedades intensivas están definidas por unidad de masa, pero al definir éstas por unidad de volumen, se logra mayor consistencia teórica, al permitir una correspondencia más directa entre las propiedades intensivas y extensivas (Herrera, Carrillo y Yates 2008; Herrera y Pinder 2012). Además, se puede obtener la propiedad intensiva a partir de la propiedad extensiva asociada como:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{E(t)}{V} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\int_{B(t)} \psi(\underline{\xi}, t) d\underline{\xi}}{V}. \quad (2.1.10)$$

### 2.1.3 Ecuaciones de Balance Global

Como se ha mencionado anteriormente, los modelos matemáticos se basan en balances de propiedades extensivas, de tal manera que la variación neta de una propiedad extensiva con respecto al tiempo, se debe al flujo de entrada menos el flujo de salida de la propiedad extensiva. En mecánica del medio continuo, estas variaciones se deben a diversos procesos que se pueden dividir en dos grupos (Herrera, Carrillo y Yates 2008):

- Por producción en el interior del cuerpo, y
- Por transporte a través de la frontera.

Con éstas consideraciones, se puede formular una expresión para el balance de propiedades extensivas:

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} q(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.1.11)$$

donde  $g(\underline{x}, t)$  es la fuente externa, y representa la cantidad de propiedad extensiva que entra al cuerpo por unidad de volumen; mientras que  $q(\underline{x}, t)$  representa la cantidad de propiedad extensiva que entra al cuerpo a través de su frontera  $\partial B(t)$  por unidad de área.

Bajo condiciones muy generales, se puede demostrar que:

$$q(\underline{x}, t) \equiv \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t), \quad (2.1.12)$$

donde  $\underline{n}(\underline{x}, t)$  es un vector normal en  $\partial B(t)$  hacia el exterior del cuerpo y  $\underline{\tau}$  es el flujo de la propiedad extensiva. Por lo tanto, la ecuación (2.1.11) puede reescribirse como:

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x}. \quad (2.1.13)$$

La ecuación (2.1.13) se conoce como *Ecuación General de Balance Global*.

Es posible que las propiedades intensivas presenten discontinuidades a través de una superficie  $\Sigma(t)$  denominada *choque* (o *shock* en inglés); estas discontinuidades son

de tipo “salto” exclusivamente, en las que los límites de la función existen a cada lado de  $\Sigma(t)$ , pero son distintos.

Debido a la presencia de discontinuidades de salto en  $\Sigma(t)$ , también pueden existir fuentes concentradas en dicha superficie, por este motivo, Herrera ha introducido una forma más general de la ecuación de balance global (Herrera y Pinder 2012):

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.1.14)$$

donde  $g_{\Sigma}(\underline{x}, t)$  es la fuente externa en  $\Sigma(t)$ .

### 2.1.4 Ecuaciones de Balance Local

La formulación de modelos matemáticos se lleva a cabo mediante ecuaciones diferenciales de balance local y las condiciones de salto, que se expresan en términos de las propiedades intensivas asociadas a las propiedades extensivas que caracterizan al sistema estudiado. Las ecuaciones diferenciales de balance local son ecuaciones diferenciales parciales, que se deben cumplir en cada punto del dominio  $B(t)$ , mientras que las condiciones de salto se satisfacen para cada punto de  $\Sigma(t)$ .

Los siguientes resultados serán usados posteriormente (refiérase a Herrera y Pinder 2012, págs. 11-13)

**Lema 1.** *La ecuación de balance global, (2.1.14), es igual a:*

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} \{g(\underline{x}, t) + \nabla \cdot \underline{\tau}(\underline{x}, t)\} d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} \{[\underline{\tau}] \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) + g_{\Sigma}(\underline{x}, t)\} d\underline{x}. \quad (2.1.15)$$

*Demostración.* La ecuación (2.1.15) se deriva del teorema de Gauss Generalizado (Herrera y Pinder 2012)  $\square$

**Teorema 1.** *Sea  $B(t) \subset R^3$  un dominio que contiene a un cuerpo. Sea  $\psi(\underline{x}, t)$  una propiedad intensiva continua a trozos, tipo  $C^1$ , excepto en  $\Sigma(t)$ . Sean  $\underline{v}(\underline{x}, t)$  y  $\underline{v}_{\Sigma}(\underline{x}, t)$  la velocidad de partícula y la velocidad de la superficie  $\Sigma(t)$ , respectivamente, entonces:*

$$\frac{d}{dt} \int_{B(t)} \psi d\underline{x} \equiv \int_{B(t)} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) \right\} d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} [(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})\psi] \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (2.1.16)$$

*Demostración.* (Ver apéndice C de Herrera y Pinder 2012, págs. 221 - 223)  $\square$

**Corolario 1.** *Sea  $\psi(\underline{x}, t)$  una propiedad intensiva asociada a una propiedad extensiva  $E(t)$ , entonces:*

$$\frac{dE}{dt} \equiv \int_{B(t)} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) \right\} d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} [(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})\psi] \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (2.1.17)$$

*Demostración.* La ecuación (2.1.17) se deriva de las ecuaciones (2.1.9) y (2.1.16)  $\square$

**Corolario 2.** *La ecuación de balance global (2.1.14) es cierta si, y solo si, para cada cuerpo  $B(t)$  se cumple que:*

$$\begin{aligned} & \int_{B(t)} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) - \nabla \cdot \underline{\tau}(\underline{x}, t) - g(\underline{x}, t) \right\} d\underline{x} + \\ & \int_{\Sigma(t)} \left\{ \llbracket (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)\psi - \underline{\tau} \rrbracket \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) - g_\Sigma(\underline{x}, t) \right\} d\underline{x} = 0. \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

*Demostración.* La ecuación (2.1.18) se deriva de las ecuaciones (2.1.15) y (2.1.17)  $\square$

**Teorema 2.** *Sea  $B(t)$  un cuerpo. La ecuación de balance global (2.1.14) se satisface para cada sub-cuerpo de  $B(t)$  si, y solo si, se satisfacen las siguientes condiciones:*

- *La ecuación diferencial:*

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\tau} + g; \quad \forall \underline{x} \in B(t) - \Sigma(t). \quad (2.1.19)$$

- *La condición de salto:*

$$\llbracket (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)\psi - \underline{\tau} \rrbracket \cdot \underline{n} = g_\Sigma; \quad \forall \underline{x} \in \Sigma(t). \quad (2.1.20)$$

*Demostración.* Las ecuaciones (2.1.19) y (2.1.20) se obtienen a partir de la ecuación (2.1.18) considerando que ésta última se debe cumplir para todo sub-cuerpo de  $B(t)$ .  $\square$

La ecuación (2.1.19) se conoce como *Ecuación Diferencial de Balance Local*, mientras que la ecuación (2.1.20) se conoce como *Condición de Salto*.

Tratándose de sistemas continuos de una fase, el procedimiento para la construcción de modelos matemáticos básicos consiste en la identificación de todas las propiedades extensivas características del sistema, y posteriormente la aplicación de las condiciones de balance (ecuaciones (2.1.19) y (2.1.20)) a cada una de dichas propiedades, de manera que, si  $N$  es el número de propiedades extensivas del sistema, entonces, las ecuaciones diferenciales se expresan como:

$$\frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi^\alpha) = \nabla \cdot \underline{\tau}^\alpha + g^\alpha; \quad \forall \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.1.21)$$

y las condiciones de salto:

$$\llbracket (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)\psi^\alpha - \underline{\tau}^\alpha \rrbracket \cdot \underline{n} = g_\Sigma^\alpha; \quad \forall \alpha = 1, \dots, N. \quad (2.1.22)$$

Obteniéndose así un sistema de ecuaciones diferenciales y de condiciones de salto (una ecuación diferencial y una condición de salto por cada propiedad extensiva).

### Sistemas multifásicos

Los sistemas multifásicos se caracterizan porque cada fase se mueve a una velocidad distinta de las demás, es decir, en cada punto del dominio ocupado por el sistema multifásico, se definen distintas velocidades de partícula, una para cada fase (Herrera y Pinder 2012).

El procedimiento para la construcción de modelos básicos para sistemas multifásicos difiere solo un poco de aquel para sistemas monofásicos:

1. Se identifica la familia de propiedades extensivas características del sistema.
2. Cada propiedad extensiva se asocia a cada una de las fases del sistema.
3. Se aplican las condiciones de balance a cada propiedad extensiva, usando la velocidad de partícula de la fase correspondiente.

De esta forma, se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales parciales:

$$\frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^\alpha \psi^\alpha) = \nabla \cdot \underline{\tau}^\alpha + g^\alpha; \quad \forall \alpha = 1, \dots, N. \quad (2.1.23)$$

Y las condiciones de salto:

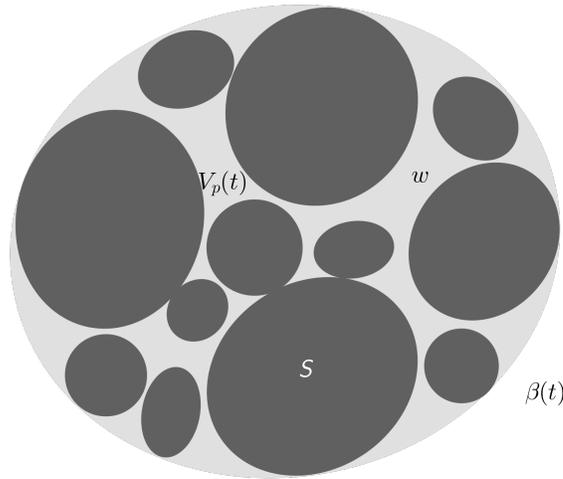
$$\llbracket (\underline{v}^\alpha - \underline{v}_\Sigma) \psi^\alpha - \underline{\tau}^\alpha \rrbracket \cdot \underline{n} = g_\Sigma^\alpha; \quad \forall \alpha = 1, \dots, N. \quad (2.1.24)$$

Finalmente, tanto para sistemas multifásicos como sistemas monofásicos, se incorporan ecuaciones constitutivas y se imponen condiciones de frontera adecuados para obtener *modelos completos*, capaces de predecir el comportamiento del sistema en cuestión.

## 2.2 Flujo de fluidos en medios porosos.

Los modelos de flujo en medios porosos son ampliamente usados en hidrogeología para la descripción y predicción del comportamiento de acuíferos, generalmente con el fin de diseñar procedimientos adecuados de perforación, inyección, remediación, recarga y extracción del recurso.

Un medio poroso es un material sólido que contiene espacios vacíos interconectados entre sí, que permiten el paso de fluidos a través de ellos. El material sólido se conoce como *matriz sólida*, los espacios vacíos como *poros*,  $V_p(t)$ , y la fracción de volumen que ocupan dichos poros del espacio físico como *porosidad*,  $\varepsilon$ . En sistemas continuos de una fase, se asume que el medio poroso se encuentra totalmente saturado por el fluido, o dicho de otra forma, el volumen de los poros es igual al volumen del fluido, como se muestra en la Figura 2.1.



**Figura 2.1:** Medio poroso formado por solido,  $S$ , y agua,  $w$ .

El volumen de los poros,  $V_p$ , es una propiedad extensiva, ya que se puede escribir como una integral sobre el dominio del medio poroso de una propiedad intensiva asociada, la porosidad:

$$V_p(t) = \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) d\underline{x}. \quad (2.2.1)$$

Por su parte, la porosidad,  $\varepsilon$ , considerando la ecuación (2.1.10) está definida como:

$$\varepsilon(\underline{x}, t) \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) d\underline{x}}{V} = \frac{V_p}{V}. \quad (2.2.2)$$

Si el material es heterogéneo,  $\varepsilon$  varía con la posición, además, si el material es elástico, también varía con el tiempo.

Los modelos de flujo se basan en los siguientes postulados (Herrera y Pinder 2012):

- La matriz del medio poroso se encuentra totalmente saturada.
- La matriz sólida se encuentra siempre en reposo a lo largo del proceso de flujo.
- La matriz sólida es elástica.
- El fluido es compresible.
- La velocidad de partícula cumple con la Ley de Darcy.
- El fluido no está sujeto a procesos de difusión ( $\tau = 0$ ).

Al respecto, la densidad del fluido generalmente se describe como una ecuación de estado que involucra presión y temperatura, sin embargo para el modelo de flujo, se considera que la densidad es función de la presión exclusivamente.

### 2.2.1 El modelo básico de flujo de fluidos en medios porosos

A pesar de que el sistema de flujo es un sistema bifásico (formado por la matriz sólida y el fluido contenido en los poros), el hecho de que la matriz sólida se encuentre en reposo, permite lidiar únicamente con el fluido y, por lo tanto, considerar al sistema como un sistema monofásico de un solo componente, el fluido. En consecuencia, la familia de propiedades extensivas esta compuesta de una sola propiedad: la *masa del fluido*. Recordando que la matriz sólida se encuentra completamente saturada, la masa de fluido contenida en el dominio  $B(t)$  del sistema está dada por (Herrera y Pinder 2012):

$$M_f(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t) \rho(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.2.3)$$

donde  $\rho(\underline{x}, t)$  es la densidad del fluido, que depende de la posición y del tiempo.

El interés se centra en el movimiento del fluido y por lo tanto,  $B(t)$  se mueve con la velocidad de fluido.

La ecuación (2.2.3) implica que la propiedad intensiva asociada a la masa de fluido es  $\varepsilon(\underline{x}, t) \rho(\underline{x}, t)$ , por lo tanto, la ecuación diferencial de balance local es:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho \underline{v}) = g, \quad (2.2.4)$$

mientras que la condición de salto es:

$$\llbracket (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) \varepsilon \rho \rrbracket \cdot \underline{n} = 0. \quad (2.2.5)$$

### 2.2.2 Compresibilidad del fluido y elasticidad de la matriz sólida

Recordando los postulados en los que se basa el modelo de flujo en medios porosos, el producto  $\varepsilon \rho$  es función de la presión exclusivamente. En consecuencia, es necesario establecer explícitamente dicha dependencia, en otras palabras, obtener una expresión para la derivada temporal de  $\varepsilon \rho$  en términos de la derivada temporal de la presión. Desarrollando la derivada temporal de la ecuación (2.2.4) se tiene:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}. \quad (2.2.6)$$

El termino  $\partial \rho / \partial t$  se asocia a la contribución de la compresibilidad del fluido, mientras que el termino  $\partial \varepsilon / \partial t$  se asocia a la elasticidad de la matriz solida.

#### Compresibilidad del fluido

Bajo las consideraciones de que la densidad es función de la presión,  $\rho(p)$ , que la presión, a su vez, es función de la posición  $\underline{x}$  y del tiempo  $t$ , y que el fluido es homogéneo,

entonces la densidad está dada por:  $\rho(p(\underline{x}, t))$ , por lo tanto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{d\rho}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} \equiv \beta \rho \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (2.2.7)$$

donde  $\beta$  es la *compresibilidad del fluido*, definida como:

$$\beta \equiv \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dp}. \quad (2.2.8)$$

Aquí,  $V$  es el volumen específico, definido como el inverso de la densidad; es decir, el volumen específico es el volumen por unidad de masa:

$$V \equiv \rho^{-1}.$$

### Compresibilidad de poros

Debido a que el sistema sólido-fluido está conformado por la matriz sólida y el fluido, la presión total,  $p_{tot}$ , atribuible a todo el sistema está dada por:

$$p_{tot} = p_{ef} + p, \quad (2.2.9)$$

donde  $p_{ef}$  es la *presión efectiva*, referida al soporte que provee la matriz sólida al sistema.

Considerando que los alrededores del sistema poroso no cambian, y por lo tanto  $p_{tot}$  no cambia en el intervalo de tiempo del análisis, cualquier cambio en la presión del fluido está acompañada por un cambio en la presión efectiva, es decir:

$$\Delta p_{ef} + \Delta p = \Delta p_{tot} = 0, \quad (2.2.10)$$

donde la  $\Delta$  implica *cambio*. Se observa que cuando la presión de poro aumenta, la presión efectiva decrece y, en consecuencia, los poros se expanden.

A partir de la ecuación (2.2.8), se define la *compresibilidad de la matriz sólida*,  $\beta_{tot}$ , y la *compresibilidad de los granos sólidos*,  $\beta_s$  como:

$$\beta_{tot} \equiv -\frac{1}{V_{tot}} \frac{dV_{tot}}{dp_{ef}}, \quad (2.2.11)$$

y

$$\beta_s \equiv -\frac{1}{V_s} \frac{dV_s}{dp_{ef}} = \frac{1}{\rho_s} \frac{d\rho_s}{dp_{ef}}, \quad (2.2.12)$$

donde  $V_{tot}$  es el volumen específico de la matriz sólida,  $V_s$  es el volumen específico del material sólido y  $\rho_s$  la densidad del material sólido.

La relación que existe entre  $V_{tot}$  y  $\rho_s$  está dada por:

$$V_{tot} = \frac{1}{(1 - \varepsilon)\rho_s},$$

por lo que, la densidad de la matriz sólida es:

$$\rho_{tot} = (1 - \varepsilon)\rho_s,$$

en consecuencia, la porosidad  $\varepsilon$  satisface la siguiente identidad:

$$\varepsilon = 1 - \frac{V_s}{V_{tot}}. \quad (2.2.13)$$

Tomando la derivada de  $\varepsilon$  con respecto a  $p_{ef}$ , se obtiene:

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

que se puede reescribir como:

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

expresión que, al considerar las ecuaciones (2.2.11) y (2.2.12), es igual a:

$$\frac{d\varepsilon}{dp_{ef}} = (\beta_s - \beta_{tot}) \frac{V_s}{V_{tot}} = (\beta_s - \beta_{tot})(1 - \varepsilon). \quad (2.2.14)$$

Entonces, por la ecuación (2.2.10) se tiene:

$$\frac{d\varepsilon}{dp} = -\frac{d\varepsilon}{dp_{ef}} = (\beta_{tot} - \beta_s)(1 - \varepsilon),$$

por lo tanto:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{d\varepsilon}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} = (\beta_{tot} - \beta_s)(1 - \varepsilon) \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (2.2.15)$$

### El coeficiente de almacenaje específico

Sustituyendo las ecuaciones (2.2.7) y (2.2.15) en la ecuación (2.2.6) se obtiene:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho}{\partial t} = \rho \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon)(\beta_{tot} - \beta_s) \} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (2.2.16)$$

El *coeficiente de almacenamiento específico*,  $S_S$  se define como:

$$S_S \equiv \rho \hat{g} \{ \varepsilon \beta + (1 - \varepsilon)(\beta_{tot} - \beta_s) \}, \quad (2.2.17)$$

donde  $\hat{g}$  es la aceleración de la gravedad. Por lo tanto, la ecuación diferencial (2.2.4) se puede ahora reescribir como:

$$S_S \frac{\partial p}{\partial t} + \hat{g} \nabla \cdot (\varepsilon \rho \underline{v}) = -\hat{g} \rho q, \quad (2.2.18)$$

donde  $g = -\rho q$ . En hidrogeología,  $q$  representa la tasa de extracción de fluido, por unidad de volumen.

### 2.2.3 La Ley de Darcy

La ley de Darcy es una ecuación constitutiva empírica, establecida por el ingeniero francés Henry Darcy, que relaciona la velocidad del fluido con la distribución espacial de su presión y está definida para medios porosos anisótropos como (Herrera y Pinder 2012):

$$\underline{U} \equiv \varepsilon \underline{v} = -\frac{1}{\underline{\mu}} \underline{k} \cdot (\nabla p - \rho \hat{g}), \quad (2.2.19)$$

donde:

- $\underline{U}$  es la velocidad de Darcy.
- $\hat{g}$  es el vector de aceleración de gravedad.
- $\mu$  es la viscosidad dinámica del fluido.
- $\underline{k}$  es el tensor de permeabilidad intrínseca, definido positivo y simétrico.

La presión en los flujos donde se aplica la ley de Darcy debe ser continua, de lo contrario el gradiente de la presión sería de magnitud infinita y por lo tanto también la velocidad del fluido.

Cuando la matriz sólida es isótropa, no hay direcciones preferenciales de flujo, y en consecuencia el tensor de permeabilidad intrínseca  $\underline{k}$  es:

$$\underline{k} = k \underline{I}, \quad (2.2.20)$$

donde  $k$  es un escalar mayor que cero.

Sea un punto  $\underline{x}$  del espacio físico, y sea  $z(\underline{x})$  su elevación con respecto a un nivel de referencia. La aceleración debida a la gravedad está dada por:

$$\hat{g} = -\hat{g} \nabla z. \quad (2.2.21)$$

Sustituyendo en la ecuación (2.2.19):

$$\underline{U} = -\frac{1}{\underline{\mu}} \underline{k} \cdot (\nabla p + \rho \hat{g} \nabla z), \quad (2.2.22)$$

y cuando la matriz sólida es isótropa:

$$\underline{U} = -\frac{1}{\mu} k \cdot (\nabla p + \rho \hat{g} \nabla z). \quad (2.2.23)$$

### El nivel piezométrico

El nivel piezométrico es un concepto muy usado en hidrogeología. Para definirlo, usamos la siguiente función auxiliar:

$$H(p, z) \equiv \frac{1}{\hat{g}} \int_{p_0}^p \frac{d\xi}{\rho(\xi)} + z. \quad (2.2.24)$$

Para todo tiempo  $t$  y punto  $\underline{x}$  de un medio poroso saturado, se define el *nivel piezométrico*  $h(\underline{x}, t)$  como:

$$h(\underline{x}, t) \equiv H(p(\underline{x}, t), z(\underline{x})) \equiv \frac{1}{\hat{g}} \int_{p_0}^{p(\underline{x}, t)} \frac{d\xi}{\rho(\xi)} + z(\underline{x}). \quad (2.2.25)$$

Si el fluido es incompresible,  $\rho(\xi)$  es una constante independiente de  $\xi$ , entonces:

$$h(\underline{x}, t) \equiv \frac{p(\underline{x}, t) - p_0}{\hat{g}\rho} + z(\underline{x}). \quad (2.2.26)$$

La ecuación (2.2.26) implica que:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho\hat{g} \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (2.2.27)$$

y también que:

$$\nabla p + \rho\hat{g}\nabla z = \rho\hat{g}\nabla h. \quad (2.2.28)$$

Por lo tanto, la ecuación (2.2.23) se puede reescribir como:

$$\underline{U} = -\underline{K} \cdot \nabla h, \quad (2.2.29)$$

donde  $\underline{K}$  es el *tensor de conductividad hidráulica*, definido como:

$$\underline{K} \equiv \frac{\rho\hat{g}}{\mu} \underline{k}. \quad (2.2.30)$$

Cuando la matriz sólida es isótropa, la *conductividad hidráulica* es:

$$K \equiv \frac{\rho\hat{g}}{\mu} k, \quad (2.2.31)$$

de modo que para el caso isótropo se tiene:

$$\underline{U} = -K \cdot \nabla h. \quad (2.2.32)$$

Los tensores  $\underline{k}$  y  $\underline{K}$  son simétricos y definidos positivos, ésta última es una condición que deben cumplir para que el fluido fluya de regiones donde el nivel piezométrico es mayor a regiones donde es menor. Estos tensores están definidos a partir de las propiedades del material que constituyen los estratos del subsuelo; dicho material es

generado y depositado por procesos sedimentarios en donde la gravedad juega un papel importante. En consecuencia, los tensores de *permeabilidad intrínseca* y *conductividad hidráulica* suelen tener la dirección vertical como eje de simetría (Herrera y Pinder 2012).

Cualquier matriz  $\underline{\underline{M}}$  con un eje de simetría, puede escribirse como:

$$\underline{\underline{M}} = M_T \underline{\underline{I}} + (M_L - M_T) \underline{e} \otimes \underline{e}, \quad (2.2.33)$$

donde  $\underline{e}$  y  $M_L$  son el vector unitario y el valor propio o *eigenvalor* en la dirección del eje de simetría, respectivamente, mientras que  $M_T$  es el valor propio o “*eigenvalor*” en la dirección transversal. El símbolo  $\otimes$  denota multiplicación tensorial.

Por lo tanto, aplicando la ecuación (2.2.33) a los tensores de *permeabilidad intrínseca* y *conductividad hidráulica* cuando presentan el eje vertical como eje de simetría, se tiene:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{k}} &= k_H \underline{\underline{I}} + (k_V - k_H) \underline{e}_z \otimes \underline{e}_z, \\ \underline{\underline{K}} &= K_H \underline{\underline{I}} + (K_V - K_H) \underline{e}_z \otimes \underline{e}_z, \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

donde  $k_H$  y  $k_V$  son las permeabilidades horizontales y verticales respectivamente, de manera análoga,  $K_H$  y  $K_V$  son las conductividades horizontales y verticales, mientras que  $\underline{e}_z$  es el vector unitario en dirección vertical.

## 2.2.4 Ecuaciones Generales de Flujo de Fluidos en Medios Porosos

Haciendo uso de las ecuaciones (2.2.27), (2.2.18) y (2.2.19) se tiene:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} + \rho^{-1} \nabla \cdot (\rho \underline{U}) = -q, \quad (2.2.35)$$

que se puede reescribir como:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{U} + \underline{U} \cdot \nabla (\ln \rho) = -q. \quad (2.2.36)$$

Cuando el fluido es poco compresible y la velocidad de Darcy es moderada, el término  $\underline{U} \cdot \nabla \ln \rho \ll 1$ , y por lo tanto puede descartarse, obteniéndose:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{U} = -q.$$

Sustituyendo la ecuación (2.2.29):

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{\underline{K}} \cdot \nabla h) = -q. \quad (2.2.37)$$

La ecuación (2.2.37) es la ecuación diferencial básica para el modelado de flujo de fluidos en medios porosos, usada extensamente en aplicaciones de hidrogeología. Dicha ecuación es lineal cuando el coeficiente de almacenamiento específico  $S_S$  y la conductividad hidráulica  $\underline{\underline{K}}$  son independientes del nivel piezométrico  $h$ .

### Formas especiales de la ecuación diferencial general

Cuando el medio poroso es isótropo, por la ecuación (2.2.32), la ecuación (2.2.37) se reduce a:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (K \nabla h) = -q. \quad (2.2.38)$$

Si además, la matriz sólida es homogénea, sus propiedades son independientes de la posición, y por lo tanto:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} - K \nabla^2 h = -q, \quad (2.2.39)$$

que se puede escribir como:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla^2 h = -\frac{q}{K}, \quad (2.2.40)$$

donde  $\alpha \equiv K/S_S$ . La ecuación (2.2.40) es de interés por su similitud con la *ecuación de calor*, ya que con un simple cambio de variable  $\alpha t \rightarrow t$  y cuando  $q = 0$  se tiene:

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla^2 h = 0. \quad (2.2.41)$$

Por otro lado, cuando la matriz porosa y el fluido son incompresibles,  $S_S = 0$ , por lo tanto las ecuaciones (2.2.37), (2.2.38) y (2.2.39) se reducen a:

$$\nabla \cdot (\underline{\underline{K}} \cdot \nabla h) = q, \quad (2.2.42)$$

y

$$\nabla \cdot (K \nabla h) = q, \quad (2.2.43)$$

y

$$\nabla^2 h = \frac{q}{K}, \quad (2.2.44)$$

respectivamente. Para estados estacionarios, la derivada temporal de las ecuaciones (2.2.37), (2.2.38) y (2.2.39) se desvanece, por lo que se observa que las ecuaciones (2.2.42), (2.2.43) y (2.2.44) también describen el estado estacionario.

### 2.2.5 Las Condiciones de Salto

Las discontinuidades a considerar en modelos de flujo en medios porosos se deben en la mayoría de los casos a la litología del acuífero. Dos estratos de distinto origen geológico presentan porosidades y permeabilidades distintas. Cuando éstos se encuentran en contacto, definen una superficie en donde las propiedades presentan discontinuidades de salto. Para este caso, las condiciones de salto están dadas por la ecuación (2.2.5) que, haciendo uso de la Ley de Darcy (ecuación (2.2.19)), puede escribirse como:

$$\llbracket \rho(\underline{U} - \varepsilon \underline{v}_S) \rrbracket \cdot \underline{n} = 0. \quad (2.2.45)$$

El contacto entre los estratos usualmente se mantiene fijo en el espacio, por lo que  $\underline{v}_\Sigma = 0$ , obteniéndose:

$$[[\rho \underline{U}]] \cdot \underline{n} = 0. \quad (2.2.46)$$

La Ley de Darcy implica que la presión es continua, y por lo tanto, la densidad del fluido también es continua, por lo que:

$$[[\underline{U}]] \cdot \underline{n} = 0. \quad (2.2.47)$$

La ecuación (2.2.47) implica que el componente normal de la velocidad de Darcy es continua a través de la superficie de discontinuidad entre dos estratos con propiedades distintas; sin embargo, dicha ecuación también implica que:

$$\varepsilon_+ \underline{v}_+ \cdot \underline{n} = \varepsilon_- \underline{v}_- \cdot \underline{n}. \quad (2.2.48)$$

Debido a que  $\varepsilon_+ \neq \varepsilon_-$ , entonces  $\underline{v}_+ \cdot \underline{n} \neq \underline{v}_- \cdot \underline{n}$ , y por lo tanto, la componente normal de la velocidad de partícula es discontinua en dicha superficie.

## 2.3 Transporte de Solute en Medios Porosos

La contaminación de acuíferos representa un enorme problema tanto en la protección del medio ambiente como en la disponibilidad del agua para uso y consumo humano. La administración del recurso requiere, entre otras, la capacidad para predecir cualitativamente los cambios de la calidad del agua en un intervalo de tiempo dado. Los modelos matemáticos de transporte de soluto proveen una solución a este problema, describiendo los efectos de los tipos de transporte predominantes del acuífero en la distribución espacio-temporal de la concentración de soluto.

### 2.3.1 El Modelo Básico de Transporte de Solute en Medios Porosos

De manera similar a la sección 2.3, se considera que el medio poroso se encuentra completamente saturado, sin embargo, ahora se toma en cuenta que el fluido contiene un soluto, de esta manera, la *masa de soluto*,  $M_S(t)$ , es la propiedad extensiva del modelo de transporte:

$$M_S(t) \equiv \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x},$$

donde  $\psi(\underline{x}, t)$  es la propiedad intensiva asociada a la masa de soluto. Recordando que dicha propiedad intensiva es definida por unidad de volumen, por la ecuación (2.1.10) se tiene:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \frac{M_S}{V_{total}}.$$

La masa de soluto por unidad de volumen de fluido,  $M_S/V_f$ , define la *concentración*  $c(\underline{x}, t)$ , incorporando ésta se obtiene:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \frac{M_S}{V_{total}} = \frac{V_f}{V_{total}} \frac{M_S}{V_f} = \varepsilon(\underline{x}, t)c(\underline{x}, t). \quad (2.3.1)$$

De manera que, la propiedad intensiva asociada a la masa de soluto es la porosidad multiplicada por la concentración, es decir:

$$M_S(t) \equiv \int_{B(t)} \varepsilon(\underline{x}, t)c(\underline{x}, t)d\underline{x}, \quad (2.3.2)$$

en consecuencia, la ecuación de balance global es:

$$\frac{dM_S}{dt}(t) = \int_{B(t)} g_S(\underline{x}, t)d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}_S(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t)d\underline{x}, \quad (2.3.3)$$

donde  $g_S(\underline{x}, t)$  es la fuente de soluto y  $\underline{\tau}_S(\underline{x}, t)$  es el flujo de masa de soluto. De acuerdo al Teorema 2 de la Sección 2.2.4, dicha ecuación se satisface si, y solo si se satisface la ecuación diferencial de balance local:

$$\frac{\partial \varepsilon c}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) = g_S + \nabla \cdot \underline{\tau}_S, \quad (2.3.4)$$

junto con la condición de salto:

$$\llbracket \varepsilon c(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}_S \rrbracket \cdot \underline{n} = 0, \quad (2.3.5)$$

obteniéndose así el modelo matemático básico de transporte de soluto en medios porosos.

### 2.3.2 Procesos de Transporte

Es necesario incorporar a la ecuación (2.3.4) información científica y tecnológica de los procesos de transporte que ocurren en el sistema, éstos son: *advección*, *generación de masa (procesos no conservativos)*, y *dispersión-difusión*.

#### Advección

Siempre que un fluido se encuentra en movimiento, ocurre *advección*. Cuando la velocidad de partícula  $\underline{v}$  es distinta de cero (no debe confundirse con la velocidad de Darcy  $\underline{U}$ ), las sustancias disueltas en el fluido son transportadas por las partículas del fluido. La intensidad de este proceso está caracterizada por la velocidad del fluido, la cual es considerada como dato.

### Procesos no conservativos

La tasa con la que ocurre generación de masa queda determinada por la fuente externa  $g_S(\underline{x}, t)$ , cuando  $g_S = 0$ , se dice que el proceso de transporte es conservativo, ya que el fluido conserva la masa de soluto que contiene (excepto por la masa de soluto que entra a través de las fronteras).

Cuando  $g_S > 0$ , se dice que existe una fuente de masa, por el contrario, si  $g_S < 0$ , se dice que existe un sumidero de masa. Los procesos que permiten que  $g_S$  sea distinta de cero son: *reacciones químicas y decaimiento radiactivo (procesos irreversibles de primer orden) y adsorción*.

- **Procesos irreversibles de primer orden**

La fuente de masa, cuando el fluido está contenido en un medio poroso, se puede expresar de la siguiente forma:

$$g_S \equiv \varepsilon \check{g}_S, \quad (2.3.6)$$

donde  $g_S$  representa la fuente de masa por unidad de tiempo, por unidad de volumen del espacio físico que ocupa el sistema sólido-fluido, mientras que  $\check{g}_S$  es la fuente de masa por unidad de tiempo, por unidad de volumen del fluido. En este sentido, para procesos irreversibles de primer orden,  $\check{g}_S$  está dada por (Herrera y Pinder 2012):

$$g_S \equiv \varepsilon \check{g}_S = -\lambda \varepsilon c. \quad (2.3.7)$$

- **Adsorción**

La adsorción es una reacción química en la cual el soluto interactúa con la fase sólida del medio poroso, el soluto se acumula en la superficie de los granos sólidos que conforman la matriz porosa, provocando un retardo en el proceso de advección.

Para el estudio del proceso de adsorción se requiere considerar al sistema como un sistema de dos fases y dos componentes; las fases son la matriz sólida y el fluido contenido en ella, mientras que las componentes son el soluto disuelto en el fluido y el soluto adsorbido por los granos de la matriz sólida. Por lo tanto es necesario construir un modelo que involucre las fases y las componentes descritas (Herrera y Pinder 2012).

Para el siguiente desarrollo, se utilizará la siguiente notación (Herrera y Pinder 2012)

- $g_S^f$ : Fuente de masa de soluto que pasa de la fase sólida a la fase líquida. Se trata de la única fuente de soluto en el fluido que ocurre por adsorción.

- $g_f^S$ : Fuente de masa de soluto que pasa de la fase fluida a la fase sólida.
- $\rho_s$ : Densidad de la fase sólida (masa de sólido sobre volumen del sólido).
- $\rho_b$ : Densidad volumétrica de la fase sólida (masa de sólido sobre el volumen total del medio poroso).  $\rho_b \equiv (1 - \varepsilon)\rho_s$
- $\varpi$ : Fracción de masa de soluto en fase sólida (masa de soluto sobre masa de sólido).

El modelo matemático de adsorción involucra tres propiedades extensivas: la masa de soluto  $M_S(t)$ , expresada por la ecuación (2.3.2), la masa de la matriz sólida  $M_M(t)$  y la masa de soluto adsorbida por la matriz sólida  $M_{S_S}$ ; éstas dos últimas dadas por:

$$M_M(t) \equiv \int_{B(t)} \rho_b d\underline{x} = \int_{B(t)} (1 - \varepsilon)\rho_s d\underline{x}, \quad (2.3.8)$$

y

$$M_{S_S} \equiv \int_{B(t)} \rho_b \varpi d\underline{x} = \int_{B(t)} (1 - \varepsilon)\rho_s \varpi d\underline{x}. \quad (2.3.9)$$

Las ecuaciones de balance global son:

$$\frac{dM_S}{dt}(t) = \int_{B(t)} g_S^f(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}_S(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.3.10)$$

$$\frac{dM_M}{dt}(t) = 0, \quad (2.3.11)$$

y

$$\frac{dM_{S_S}}{dt}(t) = \int_{B(t)} g_f^S(\underline{x}, t) d\underline{x}. \quad (2.3.12)$$

Es necesario considerar en este punto el principio de conservación de masa; la ecuación (2.3.11) establece que la masa de la matriz sólida permanece constante en todo momento, sin embargo para que la masa de soluto se conserve en todo el sistema es necesario que  $g_f^S + g_S^f = 0$ .

La ecuación diferencial de balance local de la ecuación (2.3.10) está dada por la ecuación (2.3.4) con  $g_S = g_S^f$ , mientras que para las ecuaciones (2.3.11) y (2.3.12) son respectivamente:

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^s \rho_b) = 0, \quad (2.3.13)$$

y

$$\frac{\partial \varpi \rho_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^s \varpi \rho_b) = g_f^S. \quad (2.3.14)$$

Desarrollando la ecuación (2.3.14), agrupando a  $\rho_b$  y  $\underline{v}^s$  se obtiene:

$$\rho_b \left( \frac{\partial \varpi}{\partial t} + \underline{v}^s \cdot \nabla \varpi \right) + \varpi \left[ \frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}^s \rho_b) \right] = g_f^S,$$

por lo tanto, considerando a la ecuación (2.3.13), la ecuación (2.3.14) puede reescribirse como:

$$\rho_b \left( \frac{\partial \varpi}{\partial t} + \underline{v}^s \cdot \nabla \varpi \right) = g_f^S. \quad (2.3.15)$$

Ahora bien, la matriz sólida se encuentra en reposo, por lo que  $\underline{v}^s = 0$ , además, haciendo uso del principio de conservación de masa se tiene:

$$g_S^f = -g_f^S = -\rho_b \frac{\partial \varpi}{\partial t}. \quad (2.3.16)$$

Cuando la fracción de masa de soluto en la fase sólida es función de la concentración, es decir  $\varpi \equiv \varpi(c(\underline{x}, t))$ , la ecuación (2.3.16) es:

$$g_S^f = -\rho_b \frac{d\varpi}{dc} \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (2.3.17)$$

definiéndose así el *coeficiente de distribución*:

$$K_d \equiv \frac{d\varpi}{dc}. \quad (2.3.18)$$

Si  $\varpi(c)$  es una función lineal, entonces el coeficiente de distribución es independiente de la concentración del soluto. Sustituyendo las ecuaciones (2.3.17) y (2.3.18) en la ecuación (2.3.4) con  $g_S = g_S^f$  se obtiene:

$$\frac{\partial \varepsilon c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v} \varepsilon c) = -\rho_b K_d \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{\tau}_S, \quad (2.3.19)$$

desarrollando la derivada temporal de la ecuación anterior:

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v} \varepsilon c) + \rho_b K_d \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \underline{\tau}_S - c \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}.$$

Ahora, multiplicando la expresión anterior por  $\varepsilon^{-1}$ , y con un poco de manipulación algebraica sencilla se obtiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} (1 + \varepsilon^{-1} \rho_b K_d) + \varepsilon^{-1} \nabla \cdot (\underline{v} \varepsilon c) = \varepsilon^{-1} \nabla \cdot \underline{\tau}_S - c \frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial t},$$

expresión de donde se obtiene el *coeficiente de retardación*, definido como:

$$R \equiv 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial \varpi}{\partial c} = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} K_d, \quad (2.3.20)$$

por lo que, finalmente se obtiene:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} + \varepsilon^{-1} \nabla \cdot (\underline{v} \varepsilon c) = \varepsilon^{-1} \nabla \cdot \underline{\tau}_S - c \frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial t}, \quad (2.3.21)$$

ecuación que es muy utilizada en diversas aplicaciones en hidrogeología. Cuando el medio poroso es homogéneo e incompresible, la ecuación (2.3.21) es igual a:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \underline{v}) = \varepsilon^{-1} \nabla \cdot \underline{\tau}_S, \quad (2.3.22)$$

que se puede reescribir como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c R^{-1} \underline{v}) = (R \varepsilon)^{-1} \nabla \cdot \underline{\tau}_S, \quad (2.3.23)$$

donde se observa claramente que: *cuando ocurre adsorción, el proceso de advección es retardado por un factor igual a R.*

### Dispersión-Difusión

Aún cuando a nivel macroscópico un fluido se encuentre en reposo, a nivel microscópico, las moléculas, átomos o iones que lo constituyen se encuentran en constante agitación. Ésto produce un movimiento aleatorio en las partículas de soluto que se encuentran disueltas en el fluido que se denomina *Movimiento Browniano*. Este movimiento microscópico produce un desbalance entre la masa de soluto que entra a un cuerpo de fluido y la masa de soluto que sale de él, provocando un flujo de masa en la frontera del cuerpo conocido como *Difusión* (Herrera y Pinder 2012).

Los procesos de difusión son modelados mediante una ecuación constitutiva denominada: *Primera Ley de Fick*, la cual establece que el flujo de masa de soluto es una función lineal del gradiente de la concentración, es decir:

$$\underline{\tau}_S(\underline{x}, t) = \underline{\underline{D}}^m \cdot \nabla c, \quad (2.3.24)$$

donde  $\underline{\underline{D}}^m$  es el *tensor de difusión molecular*, el cual es simétrico y no negativo. La ecuación (2.3.24) es aplicable para fluidos libres, sin embargo, para el caso de transporte de soluto en medios porosos, la *Primera Ley de Fick* puede escribirse como:

$$\underline{\tau}_S(\underline{x}, t) = \varepsilon \underline{\underline{D}}^m \cdot \nabla c. \quad (2.3.25)$$

A diferencia de los procesos difusos en fluidos libres, en fluidos contenidos en medios porosos coexisten dos fenómenos distintos:

- *Difusión Molecular*: Debida al movimiento Browniano ocurrente a nivel microscópico.
- *Dispersión Mecánica*: Debido a la tortuosidad del medio poroso, consecuencia de la aleatoriedad de la estructura de la matriz sólida. Se observa que la dispersión mecánica no ocurre si el fluido se encuentra en reposo.

Estos dos fenómenos contribuyen al proceso de dispersión-difusión de manera aditiva, es decir:

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}^m + \underline{\underline{D}}^M, \quad (2.3.26)$$

donde  $\underline{\underline{D}}$  es el *tensor de dispersión hidrodinámica* y  $\underline{\underline{D}}^M$  es el *tensor de dispersión mecánica*.

El tensor de difusión molecular,  $\underline{\underline{D}}^m$ , es isótropo y está definido como:

$$\underline{\underline{D}}^m = D_d \theta \delta_{ij}, \quad (2.3.27)$$

donde  $\theta$  es la tortuosidad del medio poroso (también se utiliza la notación  $\omega$  como en Fetter 1999), asumida como isótropa y siempre menor que 1, y  $D_d$  es el coeficiente de difusión del soluto.

Por su parte, el tensor de dispersión mecánica,  $\underline{\underline{D}}^M$ , es anisótropo, con la dirección de la velocidad de partícula del fluido como eje de simetría, y cuyos valores propios son proporcionales a  $|\underline{v}|$  (Herrera y Pinder 2012). Considerando lo anterior y por la ecuación (2.2.33), el tensor de dispersión mecánica es:

$$D_{ij}^M = \alpha_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|}, \quad (2.3.28)$$

donde  $\alpha_L$  y  $\alpha_T$  son los *coeficientes longitudinal y transversal de dispersividad dinámica*, respectivamente (Fetter 1999). Generalmente  $\alpha_L > \alpha_T > 0$ . Los eigenvectores de  $\underline{\underline{D}}^M$  son las direcciones de la velocidad de partícula del fluido y cualquier dirección transversal, con eigenvalores  $\alpha_L |\underline{v}|$  y  $\alpha_T |\underline{v}|$ , respectivamente (Herrera y Pinder 2012).

Empleando la ley de Darcy, se puede expresar a  $\underline{\underline{D}}^M$  como:

$$\varepsilon D_{ij}^M = \alpha_T |\underline{U}| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_i U_j}{|\underline{U}|}. \quad (2.3.29)$$

Se observa que cuando el gradiente de la concentración lleva la misma dirección que la velocidad, se tiene:

$$\underline{\underline{D}}^M \nabla c = \alpha_L |\underline{v}| \nabla c, \quad (2.3.30)$$

de donde se define el *coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal* como:

$$D_L = \alpha_L |\underline{v}| + \underline{\underline{D}}^m. \quad (2.3.31)$$

De manera similar, cuando el gradiente de la concentración tiene una dirección transversa a la velocidad de fluido:

$$\underline{\underline{D}}^M \nabla c = \alpha_T |\underline{v}| \nabla c, \quad (2.3.32)$$

obteniéndose el *coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal*:

$$D_T = \alpha_T |\underline{v}| + \underline{\underline{D}}^m. \quad (2.3.33)$$

Ahora, analizando el flujo de masa a través de la frontera de un cuerpo, por dispersión mecánica, se identifican dos casos:

- La velocidad de fluido es perpendicular a la frontera, entonces el vector normal unitario en la frontera es paralelo a la velocidad de fluido, por lo tanto:

$$\underline{\tau}_{mec} \cdot \underline{n} = \underline{n} \cdot \varepsilon \underline{D}^M \nabla c = \varepsilon \alpha_L |\underline{v}| \frac{\partial c}{\partial n}. \quad (2.3.34)$$

- La velocidad de fluido es paralela a la frontera, entonces el vector normal unitario en la frontera es perpendicular a la velocidad de fluido, en consecuencia:

$$\underline{\tau}_{mec} \cdot \underline{n} = \underline{n} \cdot \varepsilon \underline{D}^M \nabla c = \varepsilon \alpha_T |\underline{v}| \frac{\partial c}{\partial n}. \quad (2.3.35)$$

Finalmente, cuando el fluido esta en reposo, se tiene:

$$D_{ij} = D_{ij}^m = \theta D_d \delta_{ij}. \quad (2.3.36)$$

### 2.3.3 Ecuación General de Transporte de Soluta en Medios Porosos

La ecuación diferencial general que gobierna el transporte de soluto en medios porosos, se obtiene al sustituir la ecuación (2.3.25) en la ecuación (2.3.4):

$$\frac{\partial \varepsilon c}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon c \underline{v}) = \nabla \cdot (\varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c) + g_S, \quad (2.3.37)$$

desarrollando esta ecuación se obtiene:

$$\varepsilon c \left( \frac{D \ln c}{Dt} + \frac{D \ln \varepsilon}{Dt} + \nabla \cdot \underline{v} \right) = \nabla \cdot (\varepsilon \underline{D} \cdot \nabla c) + g_S, \quad (2.3.38)$$

que se puede reescribir como:

$$\frac{Dc}{Dt} + c \left( \frac{D \ln \varepsilon}{Dt} + \nabla \cdot \underline{v} \right) = \nabla \cdot (\underline{D} \nabla c) + (\nabla \ln \varepsilon) \cdot \underline{D} \nabla c + \varepsilon^{-1} g_S. \quad (2.3.39)$$

La ecuación (2.3.39) es la ecuación diferencial general de transporte de soluto en medios porosos.

#### Formas especiales de la ecuación diferencial general

Si el fluido es incompresible, implica que:

$$\frac{D \ln \varepsilon}{Dt} + \nabla \cdot \underline{v} = 0, \quad (2.3.40)$$

y por lo tanto:

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (\underline{D}\nabla c) + (\nabla \ln \varepsilon) \cdot \underline{D}\nabla c + \varepsilon^{-1}g_S. \quad (2.3.41)$$

Si la matriz sólida es homogénea:

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (\underline{D}\nabla c) + \varepsilon^{-1}g_S. \quad (2.3.42)$$

Cuando el fluido se encuentra en reposo:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta D\nabla c) + \varepsilon^{-1}g_S, \quad (2.3.43)$$

y, para transporte no difuso:

$$\frac{Dc}{Dt} = \varepsilon^{-1}g_S. \quad (2.3.44)$$

Finalmente, para estado estacionario, las ecuaciones (2.3.42), (2.3.43) y (2.3.44) son respectivamente:

$$\underline{v} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\underline{D}\nabla c) + \varepsilon^{-1}g_S, \quad (2.3.45)$$

$$\nabla \cdot (\theta D\nabla c) = -\varepsilon^{-1}g_S, \quad (2.3.46)$$

y

$$\underline{v} \cdot \nabla c = \varepsilon^{-1}g_S. \quad (2.3.47)$$

# Capítulo 3

## Metodología

En el capítulo anterior se obtuvieron los modelos de transporte de soluto en medios porosos, para el caso de transporte advectivo y difuso. A continuación, se describe un procedimiento para su solución numérica utilizando el *Método de Diferencias Finitas*.

### 3.1 Método de Diferencias Finitas

La solución de una ecuación diferencial parcial es una función que satisface la relación que existe entre sus derivadas sobre una región de espacio y tiempo, junto con algunas condiciones de frontera y condiciones iniciales. El método de Diferencias Finitas consiste en reemplazar las derivadas en la ecuación diferencial con aproximaciones en diferencias finitas, a partir del valor de la función en puntos discretos (Leveque 2007).

Sea  $u(x)$  una función suave de una variable, cuyas derivadas son funciones definidas en una región que contiene un punto de interés  $\tilde{x}$ . Supongamos que se desea obtener una aproximación de  $u'(\tilde{x})$ . Siguiendo la definición de *derivada*, una opción sería emplear:

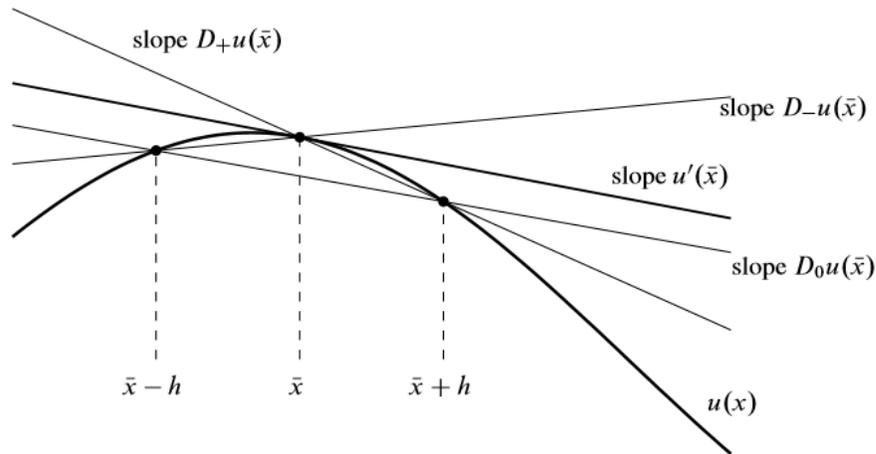
$$D_+u(\tilde{x}) \equiv \frac{u(\tilde{x} + h) - u(\tilde{x})}{h}, \quad (3.1.1)$$

para un valor pequeño de  $h$ . La ecuación (3.1.1) es una aproximación de un solo lado de  $u'(\tilde{x})$ , y define la pendiente de la recta que interpola a  $u$  en los puntos  $\tilde{x}$  y  $\tilde{x} + h$ , como se muestra en la Figura 3.1.

Otra opción puede ser emplear:

$$D_-u(\tilde{x}) \equiv \frac{u(\tilde{x}) - u(\tilde{x} - h)}{h}. \quad (3.1.2)$$

Las ecuaciones (3.1.1) y (3.1.2) son aproximaciones de primer orden, es decir, el error de aproximación es proporcional al valor de  $h$ .



**Figura 3.1:** Aproximaciones de  $u'(\tilde{x})$ , interpretadas como la pendiente de las rectas secantes. (Tomada de (Leveque 2007))

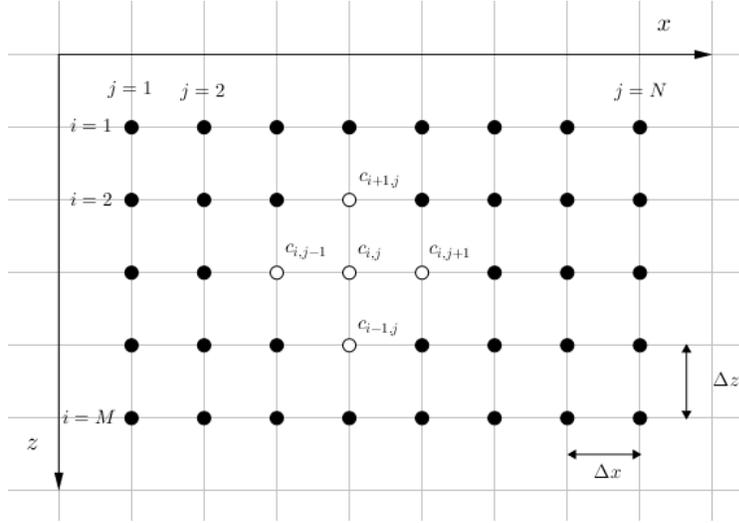
También es posible utilizar una aproximación centrada:

$$D_0(\tilde{x}) \equiv \frac{u(\tilde{x} + h) - u(\tilde{x} - h)}{2h}, \quad (3.1.3)$$

la cual, es una aproximación de segundo orden, el error es proporcional a  $h^2$  y, por lo tanto, es menor que el error de las aproximaciones de un solo lado, cuando  $h$  tiene un valor pequeño.

Las aproximaciones en diferencias finitas pueden realizarse tanto en derivadas espaciales como en derivadas temporales. El orden y el tipo de aproximación a elegir depende del tipo de ecuación y la precisión deseada, lo cual conlleva a distintos esquemas de diferencias finitas, ya sean explícitos, implícitos o una combinación de ambos (por ejemplo, el método de *Crank-Nicolson*).

Para utilizar este método, es necesario discretizar el dominio del problema; usualmente esta discretización se lleva a cabo mediante una malla uniforme, como se muestra en la Figura 3.2. Para un problema en dos dimensiones, el valor de la función se guarda en cada uno de los nodos que identificados por los índices  $i$  y  $j$ .



**Figura 3.2:** Ejemplo de una discretización del dominio para un problema en dos dimensiones como un espaciamiento entre nodos igual en ambas direcciones ( $\Delta x = \Delta z$ ).

Entonces, la aproximación en diferencias finitas centradas de  $\nabla \cdot c$  en dos dimensiones, considerando  $\Delta x = \Delta z$ , como se muestra en la Figura 3.2 es:

$$\nabla \cdot c = \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j-1}}{2\Delta x} + \frac{c_{i+1,j} - c_{i-1,j}}{2\Delta x}. \quad (3.1.4)$$

De aquí en adelante, se considerará a  $\Delta x = h$  y  $\Delta t = k$ .

### 3.1.1 Aproximaciones en Diferencias Finitas

Existen diversos métodos para obtener formulas de aproximaciones en diferencias finitas para derivadas de cualquier orden. En la presente tesis se utiliza el *Método de los Coeficientes Indeterminados*.

Suponiendo que se desea encontrar la aproximación en diferencias finitas de la segunda derivada de una función suave  $u(x)$  en un punto de interés  $\tilde{x}$ , considerando los puntos  $u(\tilde{x})$ ,  $u(\tilde{x} + h)$ , y  $u(\tilde{x} - h)$ , de la forma:

$$u''(\tilde{x}) = a[u(\tilde{x} - h)] + b[u(\tilde{x})] + c[u(\tilde{x} + h)], \quad (3.1.5)$$

es posible determinar los coeficientes  $a$ ,  $b$  y  $c$  mediante la expansión en series de Taylor centrada en el punto de interés  $\tilde{x}$ , de cada uno de los puntos considerados en la aproximación, es decir:

$$u(\tilde{x} + h) = u(\tilde{x}) + hu'(\tilde{x}) + \frac{1}{2}h^2u''(\tilde{x}) + \frac{1}{6}h^3u'''(\tilde{x}) + O(h^4), \quad (3.1.6)$$

y

$$u(\tilde{x} - h) = u(\tilde{x}) - hu'(\tilde{x}) + \frac{1}{2}h^2u''(\tilde{x}) - \frac{1}{6}h^3u'''(\tilde{x}) + O(h^4). \quad (3.1.7)$$

Sustituyendo éstas expresiones en la ecuación (3.1.5) se obtiene:

$$u''(\tilde{x}) = a[u(\tilde{x}) - hu'(\tilde{x}) + \frac{1}{2}h^2u''(\tilde{x}) - \frac{1}{6}h^3u'''(\tilde{x}) + O(h^4)] \\ + b[u(\tilde{x})] + c[u(\tilde{x}) + hu'(\tilde{x}) + \frac{1}{2}h^2u''(\tilde{x}) + \frac{1}{6}h^3u'''(\tilde{x}) + O(h^4)].$$

Agrupando términos y resolviendo para  $u''(\tilde{x})$ , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0, \\ -a + c &= 0, \\ a + c &= \frac{2}{h^2}. \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema se obtiene:  $a = c = 1/h^2$ , y  $b = -2/h^2$ , por lo que la aproximación en diferencias finitas para  $u''(\tilde{x})$  es:

$$u''(\tilde{x}) = \frac{1}{h^2}[u(\tilde{x} - h) - 2u(\tilde{x}) + u(\tilde{x} + h)]. \quad (3.1.8)$$

## 3.2 Discretización del Problema

La elección de la aproximación por diferencias finitas debe realizarse en función de las características del problema. A continuación se analiza la ecuación diferencial de transporte y se explica el esquema numérico elegido para resolverla.

### 3.2.1 Características del Modelo Matemático

En el capítulo anterior, se llegó a la ecuación diferencial de transporte de soluto en medios porosos, cuando la matriz sólida es homogénea y el fluido es incompresible:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\underline{D} \nabla c) + \varepsilon^{-1} g_S, \quad (3.2.1)$$

que involucra tanto al transporte por dispersión mecánica como por difusión molecular. Cuando no existen procesos de difusión y dispersión, la ecuación (3.2.1) se convierte en:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla c = \varepsilon^{-1} g_S, \quad (3.2.2)$$

que es una ecuación diferencial parcial hiperbólica de primer orden, conocida como la *Ecuación de Advección*. Por otro lado, cuando no existe transporte por advección ( $\underline{v} = 0$ ), se tiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{D} \nabla c) + \varepsilon^{-1} g_S, \quad (3.2.3)$$

que es una ecuación diferencial parcial parabólica, por lo que la ecuación (3.2.1) involucra ambos tipos de ecuaciones, y tiene la forma de:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = A(c) + B(c) \quad (3.2.4)$$

donde  $A(c)$  y  $B(c)$  son los términos correspondientes a la advección y a la difusión, respectivamente.

La resolución de esta clase de modelos requiere de métodos y enfoques numéricos distintos a aquellos empleados para ecuaciones puramente elípticas, parabólicas o hiperbólicas. De estos métodos, se ha elegido el *Método de Paso Fraccionado*, debido a que el término parabólico de la ecuación (3.2.1) es *rígido* (Leveque 2007), es decir, todo el dominio es sensible a una perturbación local, siendo adecuado el uso de un esquema implícito para evitar inestabilidades. Por otro lado, para el término hiperbólico resulta computacionalmente más eficiente un esquema totalmente explícito.

### 3.2.2 Método de Paso Fraccionado

La idea detrás de este método es dividir la ecuación y alternar el cómputo de sus partes conforme se integra en el tiempo. La forma más simple de división de una ecuación con dos términos como la ecuación (3.2.4) es (Leveque 2007):

$$\begin{aligned} C^* &= \mathcal{N}_A(C^n, k), \\ C^{n+1} &= \mathcal{N}_B(C^*, k), \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

donde  $\mathcal{N}_A(C^n, k)$  es un método numérico de un paso que resuelve  $\partial c/\partial t = A(c)$ , sobre un paso de tiempo  $k$ , a partir de los valores de la función  $C^n$ . Posteriormente, se aplica  $\mathcal{N}_B(C^*, k)$ , que resuelve  $\partial c/\partial t = B(c)$ , sobre un paso de tiempo  $k$ , a partir de los valores de la función  $C^*$ .

La ventaja de este método radica en que es posible aplicar métodos numéricos distintos para cada parte, pudiendo ser uno explícito y el otro implícito. Inclusive, permite extender un problema de una dimensión a dos o tres dimensiones. Sin embargo, una desventaja del método es que las aproximaciones obtenidas siempre serán de primer orden, sin importar la calidad de los métodos empleados (Leveque 2007).

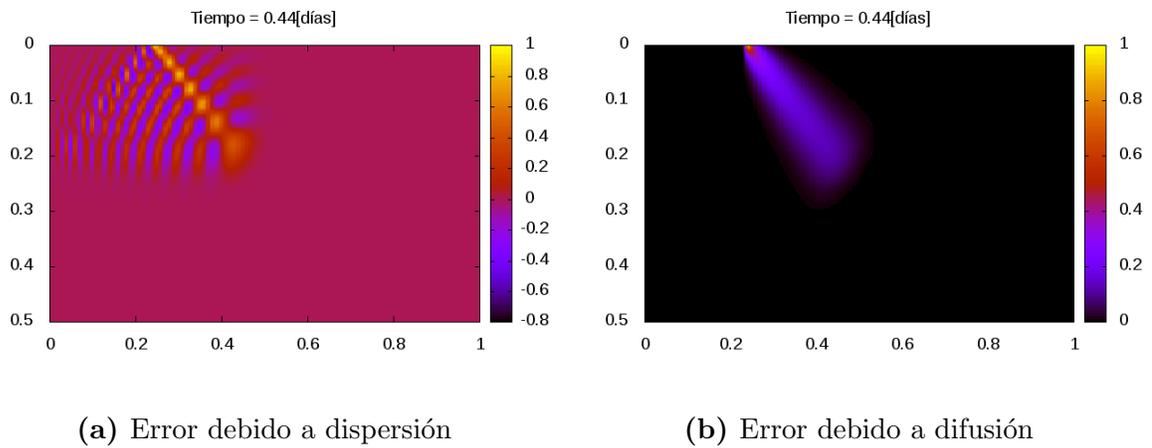
Otra posible desventaja del método es la estabilidad. Aún cuando los métodos  $\mathcal{N}_A$  y  $\mathcal{N}_B$  sean estables, no siempre es claro si al alternarlos se tenga un proceso estable.

### 3.2.3 La Ecuación de Advección

Para resolver la parte advectiva de la ecuación, es necesario identificar los posibles errores que pueden ocurrir para elegir el mejor esquema de diferencias finitas. Cuando

se aproximan las derivadas de la ecuación de advección con diferencias finitas, se introducen errores al sistema, que, en general, pueden ser dispersivos o difusivos (Rood 1987).

Los errores dispersivos se observan cuando pequeñas oscilaciones aparecen en la solución, debido a la propagación de los componentes de Fourier a distintas velocidades de fase. Esta clase de errores se observan comúnmente en esquemas de diferencias finitas centradas. Los esquemas de diferencias finitas hacia delante, como el *Upwind*, sufren de errores de difusión (e.g., una distribución rectangular se suaviza rápidamente, hasta que el campo es constante en todo el dominio.). En la Figura 3.3a y 3.3b se muestra un ejemplo de errores dispersivos y difusivos, respectivamente.



**Figura 3.3:** Advección en dos dimensiones, con velocidades constantes en direcciones X y Z iguales a 0.5. Fuente puntual ubicada a 0.25 y 0 de profundidad, constante e igual a 1. (a) Esquema de diferencias finitas centradas. (b) Esquema Upwind.

La elección del esquema apropiado depende de la aplicación, pudiéndose dar preferencia a la minimización de algún tipo de error, su adaptabilidad en más de una dimensión o la eficiencia computacional, entre otras opciones. En esta tesis se ha elegido un esquema explícito de tres puntos y de aproximación de segundo orden, conocido como el *Método de Lax-Wendroff*, debido a que ha demostrado disminuir tanto errores difusivos como dispersivos.

### Método de Lax-Wendroff

Para obtener la formula de este método en una dimensión, partimos de la ecuación de advección, con  $g_S = 0$ :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \cdot \nabla c = 0. \quad (3.2.6)$$

Se expande la concentración en series de Taylor, para obtener:

$$c(x, t + k) = c(x, t) + k \frac{\partial c}{\partial t}(x, t) + \frac{1}{2} k^2 \frac{\partial^2 c}{\partial t^2}(x, t) + \dots \quad (3.2.7)$$

Considerando la ecuación (3.2.6), se reemplaza  $c_t$  por  $-vc_x$  y  $c_{tt}$  por  $v^2 c_{xx}$ , obteniéndose:

$$c(x, t + k) = c(x, t) - kv \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{1}{2} k^2 v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \dots \quad (3.2.8)$$

Finalmente, se sustituyen las aproximaciones centradas para  $c_x$  y  $c_{xx}$ , es decir:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_{j+1} - c_{j-1}}{2h},$$

y

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{c_{j-1} - 2c_j + c_{j+1}}{h^2},$$

para obtener:

$$c_j^{n+1} = c_j^n + \frac{kv}{2h}(c_{j-1}^n - c_{j+1}^n) + \frac{k^2 v^2}{2h^2}(c_{j-1}^n - 2c_j^n + c_{j+1}^n). \quad (3.2.9)$$

La ecuación (3.2.9) se conoce como el *Método Estándar de Lax-Wendroff* en una dimensión, la cual se puede reordenar como:

$$c_j^{n+1} = c_j^n + \frac{1}{2} \nu (c_{j-1}^n - c_{j+1}^n) + \frac{1}{2} \nu^2 (c_{j-1}^n - 2c_j^n + c_{j+1}^n), \quad (3.2.10)$$

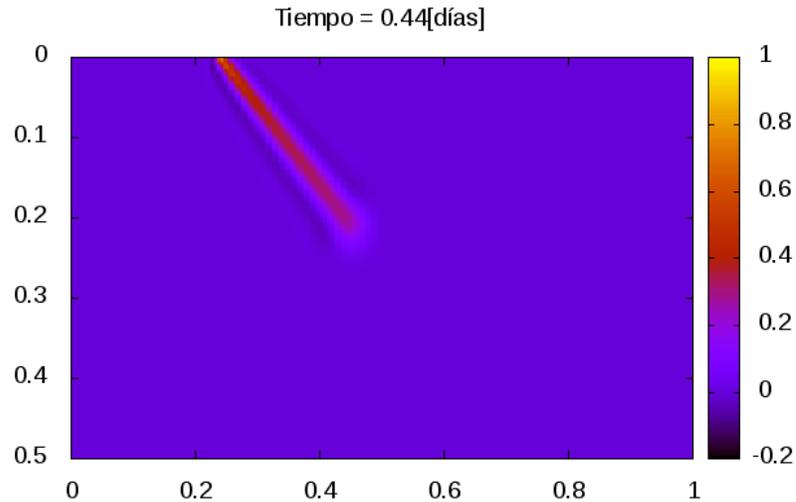
donde  $\nu$  es el *Número de Courant*, definido como:

$$\nu \equiv \frac{kv}{h}. \quad (3.2.11)$$

La extensión directa de este método a dos dimensiones es problemática, debido a que el esquema se vuelve completamente inestable, como consecuencia de la omisión de ciertos términos cruzados (Winter 2011). Una forma de aplicar el método en dos dimensiones es, nuevamente, mediante el *Método de Paso Fraccionado*, resolviendo primero en la dirección  $x$ , y después en la dirección  $y$  para un mismo paso de tiempo  $k$ , es decir:

$$\begin{aligned} (c_{i,j}^{n+1})^* &= c_{i,j}^n + \frac{1}{2} \nu_x (c_{i,j-1}^n - c_{i,j+1}^n) + \frac{1}{2} \nu_x^2 (c_{i,j-1}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i,j+1}^n), \\ c_{i,j}^{n+1} &= (c_{i,j}^{n+1})^* + \frac{1}{2} \nu_z ((c_{i-1,j}^{n+1})^* - (c_{i+1,j}^{n+1})^*) + \frac{1}{2} \nu_z^2 ((c_{i-1,j}^{n+1})^* - 2(c_{i,j}^{n+1})^* + (c_{i+1,j}^{n+1})^*), \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

donde  $\nu_x$  y  $\nu_z$  son los Números de Courant en dirección  $x$  y  $z$ , respectivamente. La Figura 3.4 muestra el resultado de la aplicación de éste método al mismo problema de advección de la Figura 3.3.



**Figura 3.4:** Advección en dos dimensiones, con velocidades constantes en direcciones X y Z iguales a 0.5. Fuente puntual ubicada a 0.25 y 0 de profundidad, constante e igual a 1, resuelto mediante el Método de Lax-Wendroff 2D.

Ésta forma de extender el método de Lax-Wendroff hereda las condiciones de estabilidad del Número de Courant en una dimensión, es decir, el método es estable mientras se cumpla que  $-1 \leq \nu \leq 1$ , condición que resulta mucho menos severa en comparación con los esquemas completos en dos dimensiones. Sin embargo, una fuerte desventaja es que la ecuación (3.2.12) solo puede aplicarse en mallas ortogonales, restringiendo la geometría del problema (Winter 2011).

### 3.2.4 La Ecuación de Difusión

La elección del esquema adecuado para la parte difusa de la ecuación es sencilla, basta con reconocer que la solución advectiva determina los valores de  $h$  y  $k$ . Para obtener soluciones incondicionalmente estables se optó por un esquema implícito de diferencias finitas.

Este tipo de esquemas, sin embargo, son más costosos computacionalmente, debido a que se requiere resolver un sistema de ecuaciones de dimensión proporcional al cuadrado del número de nodos, que se traduce en requerimientos de memoria altos.

### Método Completamente Implícito

Se parte de la ecuación (3.2.3), considerando  $g_S = 0$ :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla c). \quad (3.2.13)$$

Debido a que el tensor de dispersión hidrodinámica es función de la dirección de flujo (Fetter 1999); en un medio homogéneo en dos dimensiones, con velocidad de flujo principal uniforme, éste toma la forma:

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{bmatrix}. \quad (3.2.14)$$

Sustituyendo  $\underline{\underline{D}}$  en la ecuación (3.2.13) y desarrollando la divergencia se obtiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \quad (3.2.15)$$

Ahora, sustituyendo las aproximaciones centradas para  $c_{xx}$  y  $c_{zz}$ , y hacia delante para  $c_t$ :

$$\frac{c_{i,j}^{n+1} - c_{i,j}^n}{k} = D_L \left( \frac{c_{i,j-1}^{n+1} - 2c_{i,j}^{n+1} + c_{i,j+1}^{n+1}}{h^2} \right) + D_T \left( \frac{c_{i-1,j}^{n+1} - 2c_{i,j}^{n+1} + c_{i+1,j}^{n+1}}{h^2} \right), \quad (3.2.16)$$

para  $\Delta x = \Delta z = h$ . Si se considera que  $r_x = D_L k / h^2$  y  $r_z = D_T k / h^2$  y reordenando la ecuación anterior, se obtiene:

$$c_{i,j}^{n+1} (1 + 2r_x + 2r_z) - r_x c_{i,j-1}^{n+1} - r_x c_{i,j+1}^{n+1} - r_z c_{i-1,j}^{n+1} - r_z c_{i+1,j}^{n+1} = c_{i,j}^n. \quad (3.2.17)$$

La ecuación (3.2.17) es el *Método Completamente Implícito*, el cual es incondicionalmente estable, y representa una combinación lineal de los valores de la concentración en cada nodo de la malla, por lo que es posible expresar el método como un sistema de ecuaciones de la forma:

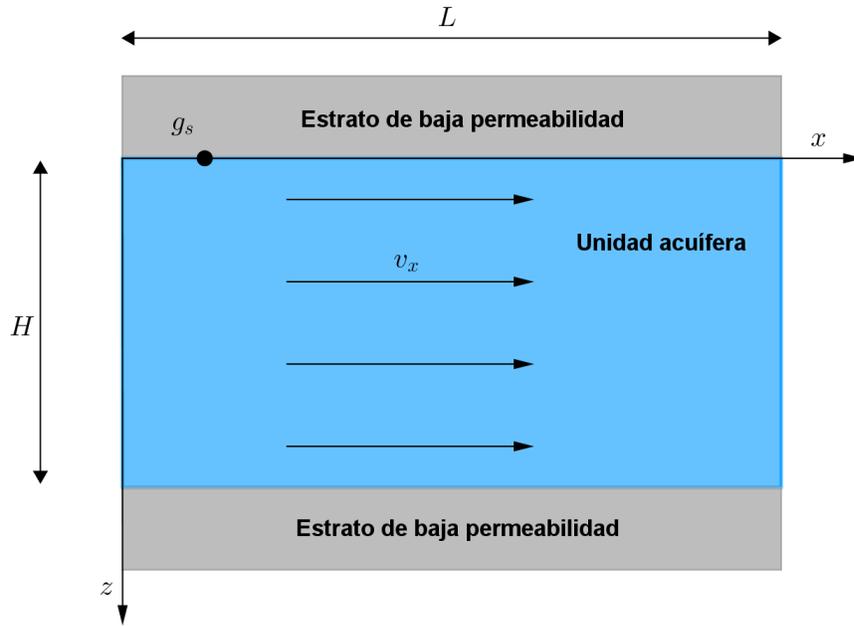
$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{x}} = \underline{\underline{b}}, \quad (3.2.18)$$

donde  $\underline{\underline{A}}$  es la matriz de coeficientes, la cual es pentadiagonal,  $\underline{\underline{x}}$  son los valores de la concentración en el tiempo  $n + 1$ , y  $\underline{\underline{b}}$  son los valores conocidos de la concentración en el tiempo  $n$ . El sistema de ecuaciones tiene dimensión  $(n_x \times n_z)^2$ , donde  $n_x$  y  $n_z$  son el número de nodos en dirección  $x$  y  $z$ , respectivamente, el cual se resuelve para las incógnitas  $c^{n+1}$  con cada paso en tiempo.

### 3.2.5 Condiciones Iniciales y de Frontera

Un problema bien planteado es aquel en el que, según Hadamard, la solución existe, es única, y ésta, depende continuamente de los datos (Tveito y Winther 2005). La unicidad de la solución, implica establecer condiciones iniciales y de frontera adecuadas.

De acuerdo con los objetivos planteados en la presente tesis, el modelo matemático de transporte de soluto en medios porosos, ecuación (3.2.2), se resuelve en un acuífero confinado, ideal, homogéneo e isótropo, cuya velocidad de partícula es conocida y cumple con la Ley de Darcy (ver Figura 3.5). El medio se discretiza con una malla equi-espaciado y se requieren imponer condiciones iniciales y de frontera pertinentes.



**Figura 3.5:** Acuífero confinado, con velocidad de partícula en dirección del eje  $x$ , fuente de soluto  $g_s$  en  $z = 0$ .

Al tratarse de un acuífero confinado, los estratos superior e inferior son formaciones geológicas de baja porosidad que, si bien son capaces de almacenar grandes cantidades de agua, no tienen la capacidad de transmitirla, al menos, bajo condiciones normales. Es por esto que, en las fronteras superior e inferior del acuífero, se imponen condiciones tipo *Neumann* de flujo nulo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial n} &= 0; & \forall z = 0, t > 0, \\ \frac{\partial c}{\partial n} &= 0; & \forall z = H, t > 0. \end{aligned} \tag{3.2.19}$$

La incorporación de las condiciones tipo Neumann a los esquemas numéricos anteriormente vistos, se realiza mediante nodos ficticios. Considerando la geometría mostrada en la Figura 3.5, se desarrolla la ecuación (3.2.19) para obtener:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial c}{\partial z} &= 0; & \forall z = 0, \\ \frac{\partial c}{\partial z} &= 0; & \forall z = H, \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

después, aproximando en diferencias finitas centradas:

$$\begin{aligned} -\frac{c_{2,j} - c_{0,j}}{2h} &= 0; & \forall z = 0, \\ \frac{c_{n+1,j} - c_{n-1,j}}{2h} &= 0; & \forall z = H, \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

donde  $n$  es el número de nodos en dirección  $z$ . Finalmente, se obtienen los valores de los nodos ficticios  $c_{0,j}$  y  $c_{n+1,j}$ :

$$\begin{aligned} c_{0,j} &= -c_{2,j}; & \forall z = 0, \\ c_{n+1,j} &= c_{n-1,j}; & \forall z = H, \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

los cuales, se incorporan al esquema numérico de diferencias finitas.

Por otro lado, considerando la dirección de velocidad de partícula, no se espera que exista concentración en la frontera  $x = 0$  debido a la posición de la fuente de soluto  $g_S$ , por lo que se establece la siguiente condición tipo *Dirichlet*:

$$c(x = 0, z, t > 0) = 0. \quad (3.2.23)$$

Como condición inicial se estableció que el acuífero está libre de soluto, es decir:

$$c(0 < x < L, 0 < z < H, t = 0) = 0. \quad (3.2.24)$$

En la frontera  $x = L$ , se desconoce el tiempo en el que el frente de soluto llega a ésta, por lo que no es posible establecer condiciones de frontera. Sin embargo, se espera que la masa de soluto salga del dominio en  $x = L$ . La manera en la que se trabaja es extendiendo esta frontera hasta  $x \rightarrow \infty$ , en donde se tiene que  $c(\infty, z, t) = 0$ . Numéricamente, esto significa extender el número de nodos en dirección  $x$ , imponer condiciones Dirichlet nulas y mostrar solo la parte de interés.

# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1 Verificación numérica

La verificación numérica de la parte advectiva y difusiva del modelo computacional se realizó de forma independiente. Ésta consistió en la comparación de una solución analítica con la solución numérica obtenida con el esquema desarrollado en el Capítulo anterior (ver apéndice A).

#### 4.1.1 Advección

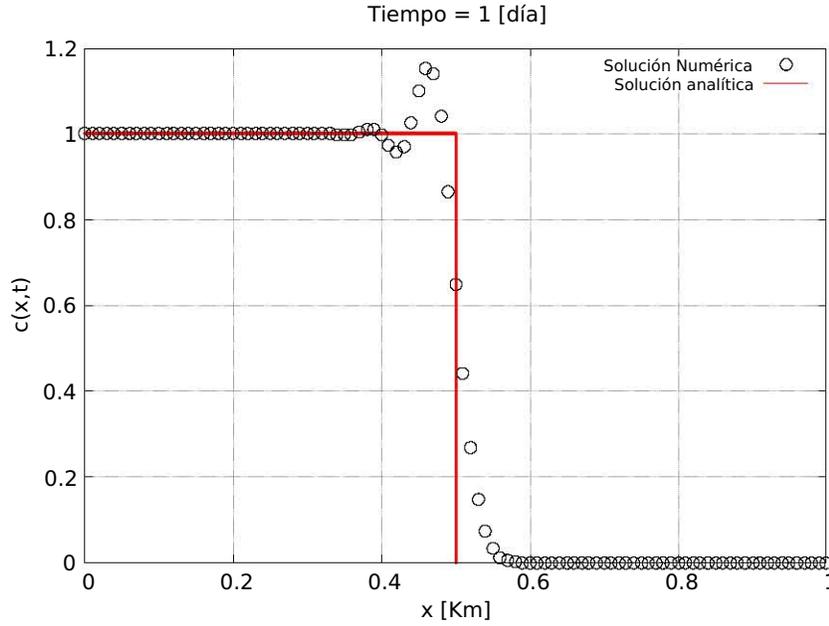
Para su verificación numérica se consideró un acuífero con dimensiones  $0 \leq x \leq 1$  y  $0 \leq z \leq 0,5[km]$ , con velocidad de partícula de fluido igual a  $0,5 [km/día]$  en dirección  $x$  únicamente (flujo laminar). Se considero a la superficie  $x = 0$  como fuente de soluto, constante e igual a 1, y concentración nula en el resto del dominio como condición inicial.

La solución analítica de la ecuación (3.2.7) en una dimensión es:

$$c(x, t) = c_0(x - ut), \quad (4.1.1)$$

para una condición inicial  $c_0(x, 0)$ . La solución anterior puede obtenerse siguiendo el principio de d'Alembert (Tveito y Winther 2005).

Debido a los errores dispersivos y difusivos del método de Lax-Wendroff, la evaluación del error se realizó para un día simulado y se evaluó con el punto medio del salto de la concentración que se comparó con la distancia analítica recorrida por la pluma contaminante, obteniéndose un error de  $9,999 \times 10^{-3}$  (ver Figura 4.1).



**Figura 4.1:** Verificación numérica del Método de Lax-Wendroff. Los parámetros de la simulación son: Velocidad de partícula igual a  $u = 0,5[km/día]$ , flujo laminar, fuente de soluto constante e igual a 1, los pasos de discretización espacial y temporal son:  $h = 0,01$  y  $k = 0,015$  (por lo que el número de Courant es  $\nu = 0,75$ ).

Conforme aumenta el intervalo de tiempo de estudio, los errores de dispersión y de difusión aumentan en la solución numérica, como consecuencia del truncamiento de algunos términos de la expansión en series de Taylor (Abdulkadir Y 2015). Una forma de solventar esto, es reduciendo la discretización espacial y temporal, aumentando el número de nodos y los pasos en tiempo. El número de nodos por longitud de onda máxima recomendado para obtener una buena aproximación es de diez (Zingg, Lomax y Jurgens 1996).

### 4.1.2 Difusión

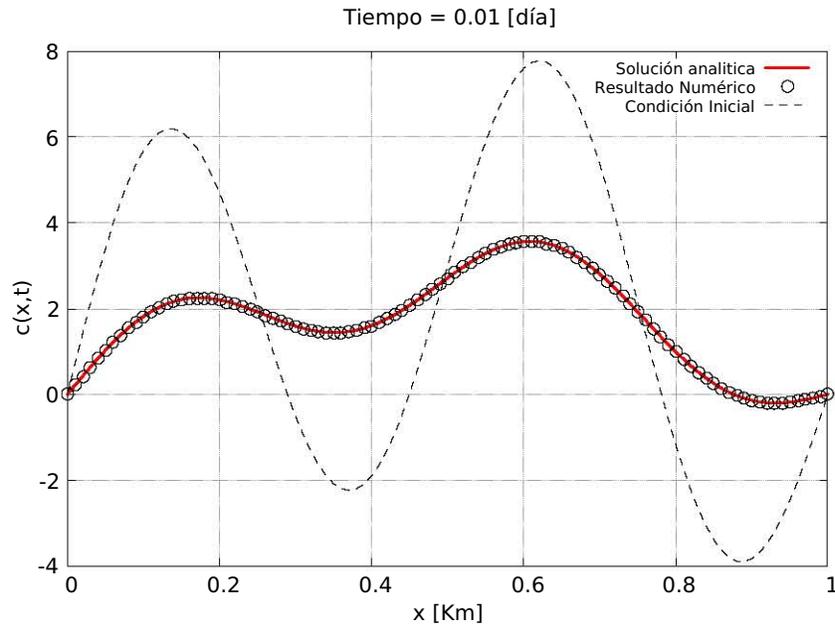
Para la verificación numérica de la parte difusa se consideró un acuífero con las mismas dimensiones que el anterior, con coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal,  $D_L$  igual a 1 y transversal,  $D_T$  igual a 0 y velocidad de partícula nula. En la frontera  $X = 1$  se establecieron condiciones tipo Dirichlet nulas. Como condición inicial se tomó la función (Tveito y Winther 2005):

$$c(x) = 3\sin(\pi x) + 5\sin(4\pi x). \quad (4.1.2)$$

La solución analítica de la Ecuación (3.2.13) en una dimensión para las condiciones mencionadas es:

$$c(x, t) = 3e^{-\pi^2 t} \sin(\pi x) + 5e^{-16\pi^2 t} \sin(4\pi x). \quad (4.1.3)$$

Dicha solución puede obtenerse a partir del *método de separación de variables* (Tveito y Winther 2005). La solución analítica se comparó con la numérica, arrojando un error de  $1,992493 \times 10^{-2}$  (Ver Figura 4.2)



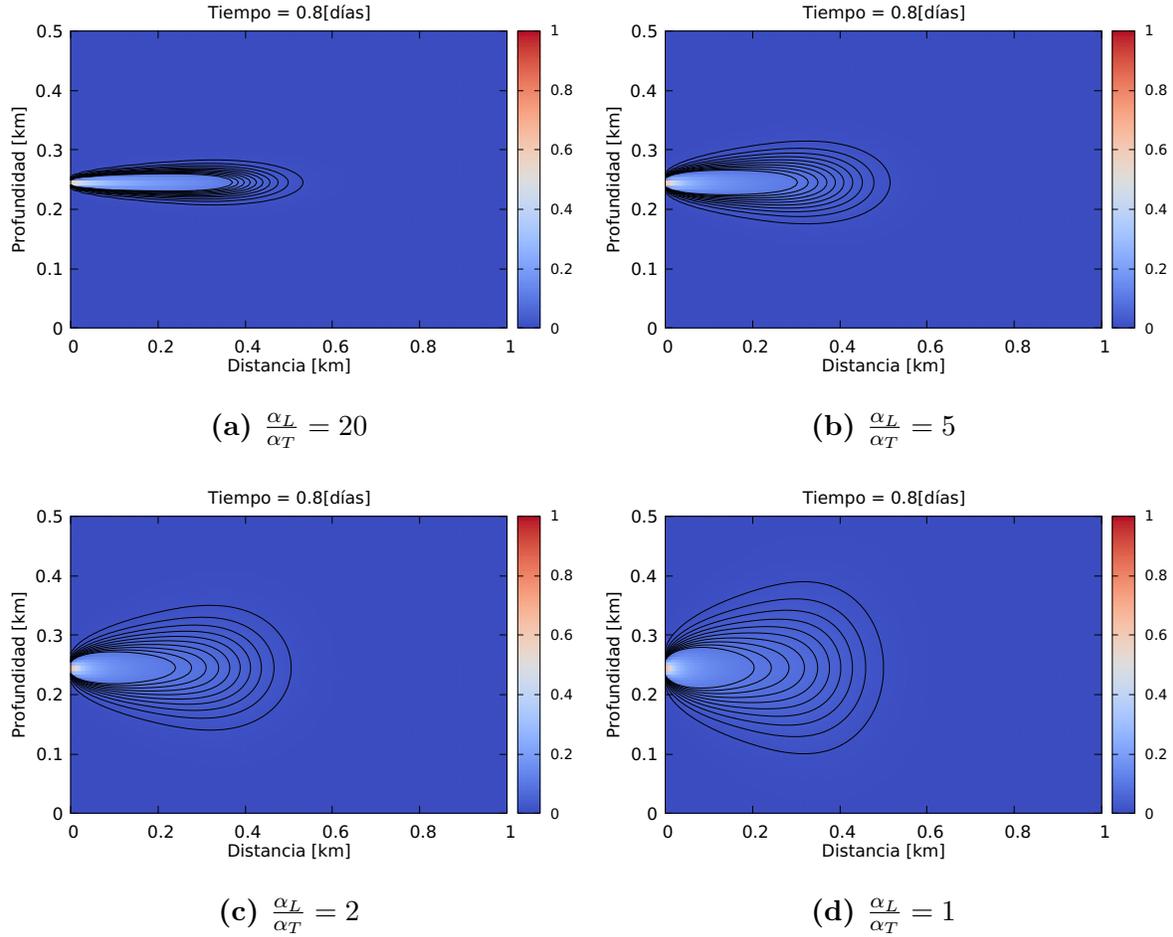
**Figura 4.2:** Verificación numérica del esquema completamente implícito. Los parámetros de la simulación son: Coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal  $D_L = 1$  y transversal  $D_T = 0$ , velocidad de partícula  $v = 0$ . Los pasos de discretización espacial y temporal son  $h = 0,01$  y  $k = 0,0001$  y 100 pasos en tiempo.

## 4.2 Análisis de sensibilidad

El programa desarrollado se utilizó para realizar un estudio de sensibilidad de distintos parámetros que controlan la forma de la pluma contaminante y la contribución de la difusión y dispersión mecánica en el transporte de soluto.

### 4.2.1 Dispersión Longitudinal y Transversal

El cociente entre los coeficientes longitudinal y transversal de dispersividad dinámica ( $\alpha_L/\alpha_T$ ) en un acuífero, controla la forma de la pluma contaminante durante el transporte de soluto en dos dimensiones (Fetter 1999). En la Figura 4.3 se muestran distintas formas de plumas contaminantes para distintos valores del cociente entre las dispersividades dinámicas. Se observa que mientras más elevado sea el valor del cociente  $\alpha_L/\alpha_T$ , la forma de la pluma es más delgada.



**Figura 4.3:** Efecto del cociente de dispersividades sobre la forma de la pluma contaminante. Los parámetros de la simulación son: Velocidad de partícula  $v = 0,5$  [km/día] flujo laminar, coeficiente de dispersividad dinámica longitudinal  $\alpha_L = 0,009144$ [Km], fuente de soluto  $g_s = 1$  constante y tiempo  $t = 0,8$ [días]. Valores de dispersividad tomados de (Fetter 1999)

## 4.2.2 Dispersión - Difusión

Como se ha mencionado anteriormente, la dispersión hidrodinámica involucra tanto a la dispersión mecánica como a la difusión. Para evaluar bajo qué condiciones predomina una u otra, se utiliza el *Número de Peclet*.

El Número de Peclet es un número adimensional que relaciona la contribución del transporte por advección con la contribución del transporte por difusión o dispersión (Fetter 1999), definido como:

$$p = \frac{v_x d}{D_d}, \quad (4.2.1)$$

o bien:

$$p = \frac{v_x L}{D_L}, \quad (4.2.2)$$

donde  $d$  y  $L$  son las longitudes características de flujo.

De acuerdo a diversas investigaciones, la difusión en medios porosos está relacionada con el factor de resistividad de formación por la ecuación (Perkins y Johnston 1963):

$$\frac{D}{D_d} = \frac{1}{F\phi}, \quad (4.2.3)$$

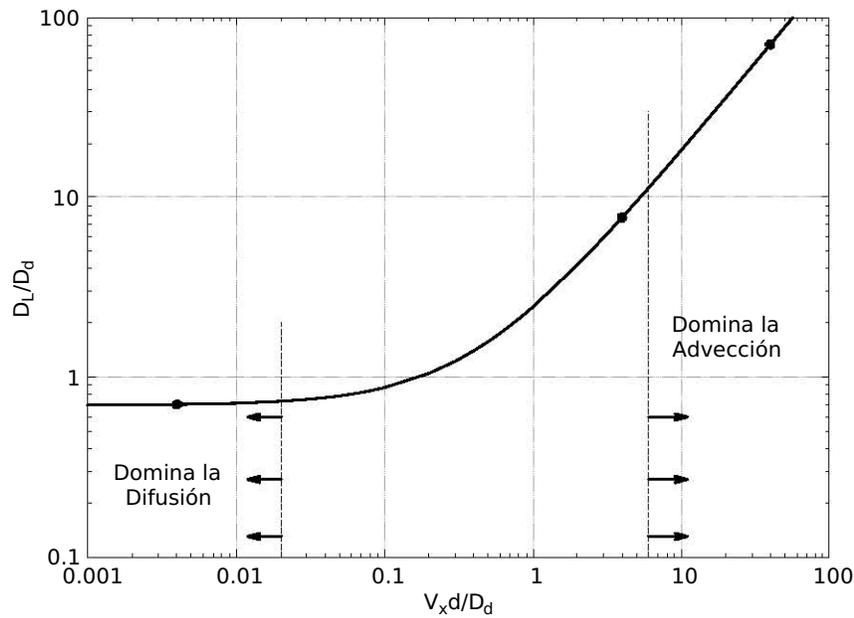
donde  $D$  es el coeficiente de difusión aparente (basado en el área susceptible a difusión) y  $\phi$  es la porosidad efectiva. Por otro lado, casi todos los datos de coeficientes de dispersión longitudinal en arenas no consolidadas reportados en la literatura, pueden ser representados por la ecuación (Perkins y Johnston 1963):

$$\frac{E}{D_d} = 1,75p, \quad (4.2.4)$$

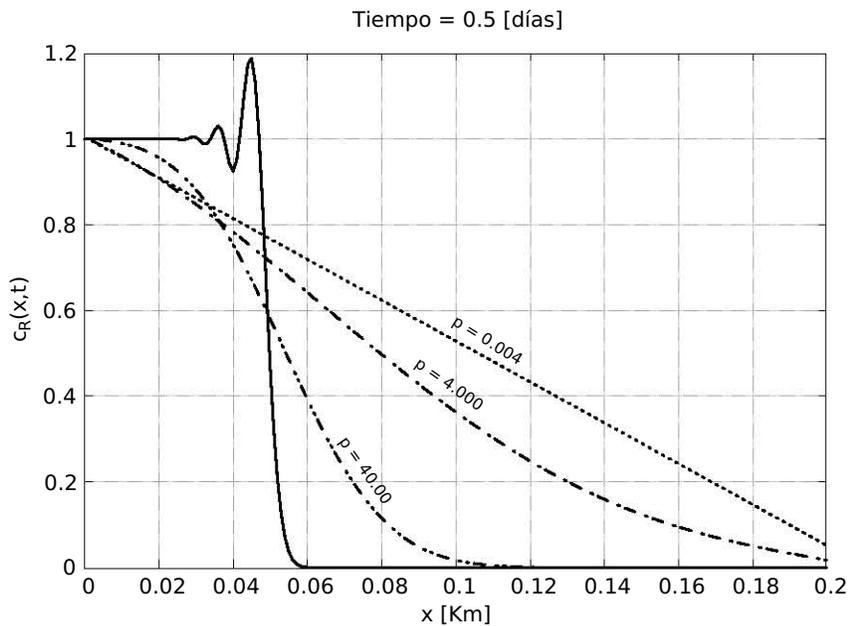
donde  $E$  es el coeficiente de dispersión longitudinal convectivo y  $p$  se calcula con la ecuación (4.2.1) con  $d$  como el diámetro de grano. Por lo tanto, en la región donde tanto la contribución de la difusión como de la dispersión es importante, el coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal es la suma de las ecuaciones (4.2.3) y (4.2.4):

$$\frac{D_L}{D_d} = \frac{1}{F\phi} + 1,75 \frac{v_x d}{D_d}. \quad (4.2.5)$$

La Figura 4.4 muestra la gráfica de la ecuación (4.2.5). Para números de Peclet bajos (menores a 0,02), el cociente  $D_L/D_d$  es constante e igual a 0,7; bajo éstas condiciones, la difusión es dominante, y se puede despreciar a la dispersión. Para números de Peclet entre 0,02 y 6, existe una zona de transición, en donde tanto la difusión como la dispersión influyen por igual en el transporte de soluto. Finalmente, para números de Peclet mayores a 6 el transporte de soluto es advectivo dominante. Los puntos sobre la gráfica, son los números de Peclet elegidos para la simulación en una dimensión mediante el uso del software desarrollado, cuyos resultados se muestran en la Figura 4.5. En ésta se observa la contribución gradual de la dispersión mecánica conforme aumenta el número de Peclet.



**Figura 4.4:** Coeficiente de dispersión longitudinal en arenas no consolidadas. Los puntos de izquierda a derecha corresponden con números de Peclet iguales a 0,004, 4 y 40, respectivamente (basada en (Perkins y Johnston 1963)).

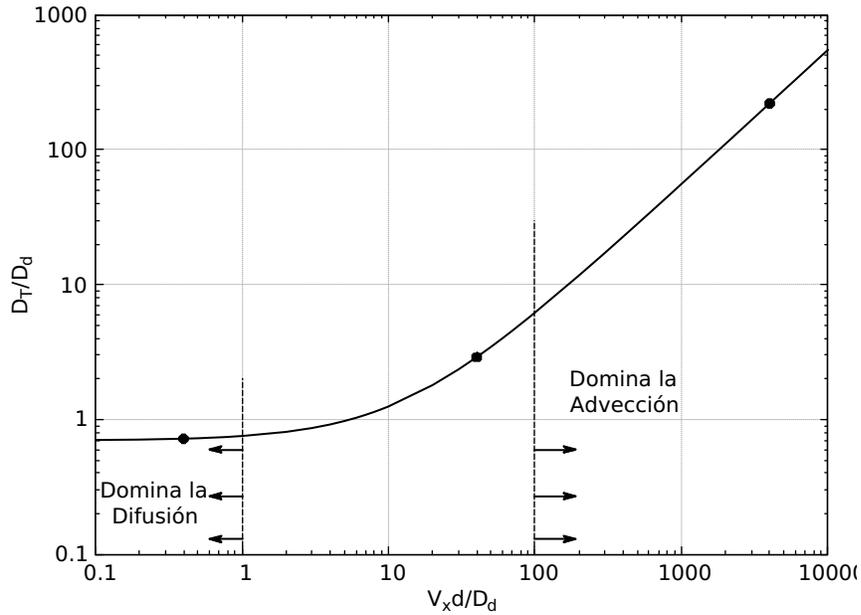


**Figura 4.5:** Concentración relativa para distintos números de Peclet de la forma  $p = v_x L / D_L$  variando únicamente el coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal. La línea continua representa la solución numérica para  $D_L = 0$ . Los parámetros de la simulación son: velocidad de partícula  $v_x = 0,1$  [km/día], flujo laminar, fuente constante e igual a 1,  $D_L = 5, 0,005$  y  $0,0005$  [ $km^2$ /día], respectivamente.

Por su parte, el coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal es igual a la suma del coeficiente de difusión en el medio poroso (ecuación (4.2.3)) y el coeficiente transversal de dispersión convectiva, por lo que la expresión final para flujo laminar en arenas no consolidadas es (Perkins y Johnston 1963):

$$\frac{D_T}{D_d} = \frac{1}{F\phi} + 0,055 \frac{v_x d}{D_d}, \quad (4.2.6)$$

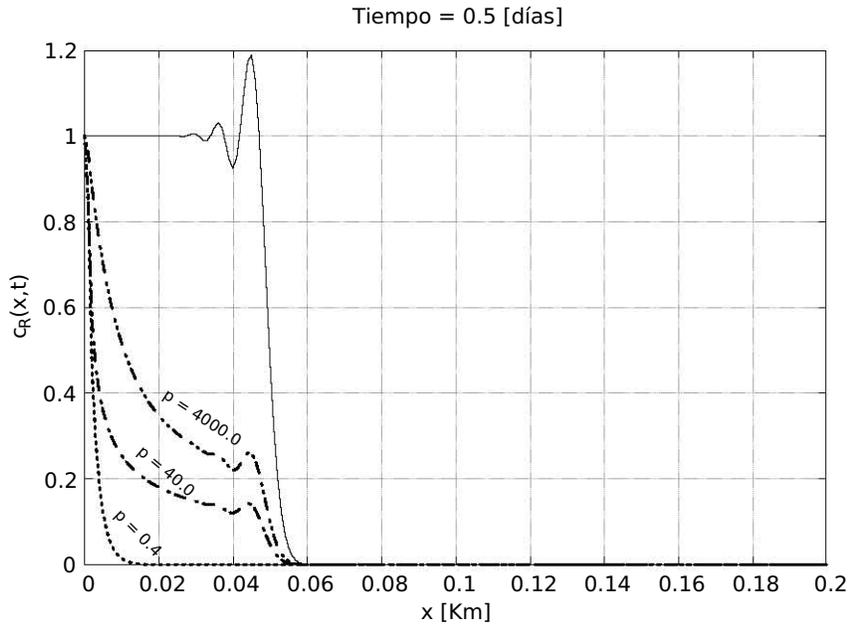
cuya gráfica se muestra en la Figura 4.6. Los puntos mostrados corresponden con los números de Peclet elegidos para la simulación en una dimensión.



**Figura 4.6:** Coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal para arenas no consolidadas. Los puntos de izquierda a derecha corresponden con números de Peclet iguales a 0,4, 40 y 4000 (basada en (Perkins y Johnston 1963)).

En la Figura 4.6, se observa que la dispersión transversal es mayor que la difusión transversal para números de Peclet mayores a 100. La curva tiene la misma forma que la mostrada en la Figura 4.4, sin embargo la advección dominante ocurre a números de Peclet mucho más grandes (por un factor de 10). Ésto significa que la difusión tiene más control sobre la dispersión transversal que sobre la longitudinal para números de Peclet altos (Fetter 1999).

Los números de Peclet grandes se tienen a velocidades de partícula o a longitudes de flujo característico grandes también. Al aumentar la velocidad de partícula, el número de Peclet pasa de una región de difusión transversal dominante, a otra donde el transporte de soluto comienza a ser significativo (Perkins y Johnston 1963). Dicho comportamiento puede observarse en la Figura 4.7.



**Figura 4.7:** Concentración relativa para distintos números de Peclet de la forma  $p = v_x L / D_T$  variando únicamente el coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal. La línea continua representa la solución numérica para  $D_T = 0$ . Los parámetros de la simulación son: velocidad de partícula  $v_x = 0,1$  [km/día], flujo laminar, fuente constante e igual a 1,  $D_T = 0,05, 0,0005$  y  $0,000005$ , respectivamente.

Cuando se tienen número de Peclet elevados, la advección y la dispersión mecánica influyen más en el transporte de la pluma contaminante y los efectos de la difusión molecular pueden ignorarse; bajo éstas condiciones,  $D_i$  puede reemplazarse por  $\alpha_i v_i$  en la ecuación de advección - dispersión (Fetter 1999)

# Capítulo 5

## Conclusiones

En hidrogeología, la modelación matemática y computacional juega un papel importante para la predicción y gestión del limitado recurso hídrico a través de estudios de balances hidrológico. Los modelos matemáticos de aguas subterráneas son usados principalmente para la determinación, predicción e interpretación del nivel piezométrico, ubicación de pozos de extracción y recarga, diseño de redes de monitoreo, balance de masa de contaminantes y diseño e implementación de técnicas de remediación. Los modelos matemáticos permiten realizar estudios de sensibilidad de parámetros y condiciones para poder predecir efectivamente el comportamiento del sistema; sin necesidad de recurrir a complejos experimentos de campo, los cuales toman mucho tiempo y resultan muy costosos, en buena medida por la lentitud de los procesos en un acuífero.

El proceso de formulación de los modelos matemáticos comienza con el entendimiento del sistema físico y de los procesos involucrados. En hidrogeología, éstos procesos son: flujo de fluidos y transporte de soluto en medios porosos.

El flujo de fluido suele ser modelado sin tomar en cuenta el transporte de soluto, siendo el nivel piezométrico la variable independiente del sistema. Dicho modelo por sí solo, tiene importantes aplicaciones en ingeniería, por ejemplo predecir el comportamiento de obras civiles construidas sobre acuíferos. Por otro lado, en la práctica, el modelo de transporte de soluto debe ser resuelto simultáneamente con el modelo de flujo, pues el movimiento de un contaminante en un acuífero depende de la velocidad de partícula del fluido. En la presente tesis se consideró el nivel piezométrico conocido y por ende la velocidad de partícula del fluido en el medio poroso.

La formulación de los modelos se basa en la traducción de los principios de conservación (o balance) de la energía, masa y momento a expresiones matemáticas (Mercer y Faust 1980). Una vez que el modelo básico es formulado, es necesario establecer relaciones entre las variables involucradas a través de la incorporación de ecuaciones constitutivas. De ésta manera, el modelo de flujo en medios porosos se obtiene con el balance de masa y momento del fluido incorporando la Ley de Darcy. Mientras que

el modelo de transporte en medios porosos, sin considerar reacciones químicas, utiliza los balances de la masa de soluto y del momento del fluido, utilizando como ecuación constitutiva la ley de Fick.

El Método de Diferencias Finitas tiene la ventaja de ser un método intuitivo y fácil de implementar, cuyo error se debe a la elección del stencil espacial y temporal. Elevar el orden de aproximación es sencillo y resulta un esquema muy eficiente computacionalmente. Sin embargo, una severa desventaja del método es la restricción del tipo de mallado, ya que es muy difícil (y a veces imposible) trabajar con geometrías complejas.

La elección de los esquemas numéricos de Diferencias Finitas depende de las características del problema, de la precisión deseada, de la carga computacional y de la complejidad para extenderlo a dos o tres dimensiones. En esta tesis se dió preferencia a las características del problema, ya que el modelo de transporte de soluto en medios porosos, matemáticamente involucra dos tipos ecuaciones diferenciales parciales, con un término hiperbólico y otro parabólico. Se eligió el Método de Paso Fraccionado, el cual permite utilizar dos esquemas numéricos distintos para la integración, uno explícito y el otro implícito.

Los esquemas explícitos son generalmente muy restrictivos en cuanto a la discretización espacial y temporal debido a cuestiones de estabilidad, las cuales se agravan si éstos son extendidos directamente a dos dimensiones. Además, introducen errores de dispersión y difusión. El método de Lax-Wendroff elegido para el término hiperbólico de la ecuación, disminuye sustancialmente estos errores y extendido a dos dimensiones usando de nuevo el Método de Paso Fraccionado, conserva las condiciones de estabilidad de una dimensión que son menos severas. Debido a que el método explícito determina las discretización espacial y temporal, y considerando la rigidez de las ecuaciones de tipo parabólico, se optó por un esquema completamente implícito para la integración del término parabólico de la ecuación.

El Método de Paso Fraccionado demostró ser una buena elección tanto en la adaptación del método de Lax-Wendroff a dos dimensiones, como en la integración numérica separando el término hiperbólico del parabólico. La desventaja del método es que la solución es una aproximación de primer orden, sin importar la calidad de los esquemas involucrados. Queda pendiente demostrar la estabilidad del esquema numérico propuesto.

El software desarrollado en esta tesis permitió realizar un análisis de sensibilidad de los coeficientes de dispersividad longitudinal y transversal, así como de las condiciones bajo las cuales domina la dispersión mecánica y la difusión molecular mediante el uso del Número de Peclet. Las dispersividades longitudinal y transversal controlan la forma de la pluma contaminante, aumentando su área de propagación conforme el cociente  $\alpha_L/\alpha_T$  disminuye. Por otro lado, el Número de Peclet permite predecir la rele-

vancia de la dispersión mecánica con respecto a la difusión molecular en el transporte de contaminante. El Número de Peclet es directamente proporcional a la velocidad de partícula del fluido y a la longitud de flujo característico, por lo que si el Número de Peclet es alto (mayores a 10 en la longitudinal y 100 en la transversal), la advección y dispersión mecánica dominan en el transporte de soluto, mientras que si el Número de Peclet es bajo (menores a 0,01 en la longitudinal y 1 en la transversal), domina la difusión molecular, influyendo más sobre la dispersión transversal que sobre la longitudinal.

El resultado de este análisis demuestra la importancia de determinar previamente los parámetros que dominan para poder realizar simulaciones realistas, que permitan conocer la distribución espacio-temporal de la concentración.

# Apéndice

# Apéndice A

## Advection-Diffusion Equation Solver (ADES)

El programa ADES, desarrollado en esta tesis, está escrito en lenguaje Fortran 2008 y consta de 4 módulos y un programa principal, contenidos en la carpeta *ADES*:

- **finite.f08**: Contiene las definiciones de variables, funciones y subrutinas necesarias para el cálculo de  $\Delta x$  y  $\Delta t$  (subrutina “steps”) y para el cálculo de matrices de diferencias finitas del método de Lax-Wendroff en dos direcciones (funciones “lwxdm” y “lwydm” ) y el método completamente implícito (función “fifdm”).
- **geometry.f08**: Contiene las definiciones de variables, funciones y subrutinas necesarias para la discretización espacial (subrutina “geo”) y para la discretización temporal (subrutina “time\_vector”).
- **linear.f08**: Contiene las definiciones de variables y funciones necesarias para el uso de la librería de álgebra lineal LAPACK y para el cálculo del arreglo “AB” en forma de *band storage* (función “ab\_array”).
- **utilities.f08**: Contiene las definiciones de variables y subrutinas para la generación de scripts utilizados para presentar gráficamente los datos obtenidos durante la ejecución del programa mediante el software *Gnuplot*.
- **ades.f08**: Es el programa principal que hace uso de los módulos anteriormente mencionados y en donde se llevan a cabo todos los procesos necesarios para la integración numérica.

La carpeta *ADES* contiene además un archivo *makefile*, con el cual se lleva a cabo la compilación del programa. Este archivo hace uso del compilador *Gfortran* que podría cambiarse por el predilecto del usuario. Para compilar el programa y generar el ejecutable, se abre una terminal ubicada en la carpeta y se ejecuta el comando **make**. Los archivos generados en el proceso de compilación (archivos *.o* y *.mod*) son guardados en la carpeta *objects*. En la carpeta *exe* se guarda el ejecutable **exec**, que además contiene

el archivo de texto *input.txt* y una carpeta *figures*.

En el archivo *input.txt* se especifican las características del problema mediante el uso de variables de Fortran en una sola columna y tiene el siguiente formato:

real	!	Distancia horizontal del acuífero [km]
real	!	Espesor del acuífero [km]
real	!	Conductividad hidráulica [km/día]
real	!	Porosidad efectiva
real	!	Coefficiente de dispersión longitudinal [km]
real	!	Coefficiente de dispersión transversal [km]
real	!	Coefficiente de retardación
real	!	Coefficiente de difusión [km/día]
logical	!	.FALSE. flujo laminar. .TRUE. flujo sinusoidal
real	!	Tiempo inicial
real	!	Tiempo final
real	!	Valor de la fuente
logical	!	.FALSE. Fuente constante .TRUE. variable
real	!	Ubicación de la fuente en Z=0

Una vez configurado el archivo *input.txt*, se puede ejecutar el programa. Para ello, se ubica la terminal en la carpeta *exe*, y se escribe el siguiente comando: `./exec`. A continuación, el programa despliega en pantalla información detallada de las especificaciones del problema.

El programa ADES genera *snapshots* para cada paso de tiempo del transporte del contaminante y los almacena al término de la ejecución en la carpeta *figures*. El programa también genera un archivo llamado `concentration.dat` que contiene la distribución espacial de la concentración en el tiempo final; dicho archivo tiene el siguiente formato, que resulta conveniente para extraer secciones horizontales de información (1D),:

distancia	profundidad	concentración
$x_0$	$z_0$	$c_0$
$x_1$	$z_0$	$c_1$
$x_2$	$z_0$	$c_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_n$	$z_0$	$c_n$
$x_0$	$z_1$	$c_{n+1}$
$x_1$	$z_1$	$c_{n+2}$
$x_2$	$z_1$	$c_{n+3}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

## Bibliografía

1. Abdulkadir Y, A. (2015). “Comparison of Finite Difference Schemes for the Wave Equation Based on Dispersion. Journal of Applied Mathematics and Physics”. En: *Applied Mathematics and Physics* 3.11. University of Gondar, Gondar, Ethiopia, págs. 1544-1562.
2. Fetter, C. (1999). *Contaminant Hydrogeology*. Second. Waveland Press, Inc.
3. Herrera, I. y Pinder, G. (2012). *Mathematical Modeling in Science and Engineering. An Axiomatic Approach*. First. John Wiley & Sons, Inc.
4. Herrera, I., Carrillo, A. y Yates, R. (2008). *Método de Elementos Finitos*. URL: <http://www.mmc.igeofcu.unam.mx/>.
5. Konikow, L. (2008). “Use of Numerical Models to Simulate Groundwater Flow and Transport”. En: *Environmental Isotopes in the Hydrological Cycle: Principles and Applications* 42.36. International Atomic Energy Agency (IAEA), págs. 557-588.
6. Leveque, J. R. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. Steady-State and Time Dependent Problems*. Before 2010. Society for Industrial y Applied Mathematics.
7. Mercer, J. W. y Faust, C. R. (1980). “Ground-Water Modeling: Mathematical Models”. En: *Ground Water* 18.3, págs. 212-222.
8. Perkins, T. y Johnston, O. (1963). “A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media”. En: *Society of Petroleum Engineers Journal* 3.1, págs. 70-84.
9. Rood, R. (1987). “Numerical Advection Algorithms and Their Role in Atmospheric Transport and Chemistry Models.” En: *Review of Geophysics* 25.1, págs. 71-100.
10. Tveito, A. y Winther, R. (2005). *Introduction to Partial Differential Equations. A Computational Approach*. First. Texts in Applied Mathematics 29. Springer-Verlag.
11. Winter, H. (2011). “Numerical Advection Schemes in Two Dimensions”. En: *ECMM713: Modeling Applications and Case Studies*. University of Exeter.
12. Zingg, D. W., Lomax, H. y Jurgens, H. (1996). “High-Accuracy Finite-Difference Schemes for Linear Wave Propagation”. En: *SIAM Journal on Scientific Computing* 17.2. Society for Industrial and Applied Mathematics, págs. 328-346.