

**MODELADO Y SIMULACIÓN DEL FLUJO
UNIDIMENSIONAL DE FLUIDOS EN MEDIOS POROSOS**



JHABRIEL DANIEL VARELA ESTIGARRIBIA

T E S I S

Presentada a la Facultad de Ciencias Químicas de la
Universidad Nacional de Asunción, como requisito para la obtención
del grado de INGENIERO QUÍMICO

San Lorenzo - Paraguay

Febrero - 2014

MODELADO Y SIMULACIÓN DEL FLUJO UNIDIMENSIONAL DE FLUIDOS EN MEDIOS POROSOS

JHABRIEL DANIEL VARELA ESTIGARRIBIA

Orientadores:

- Ph.D. **JUAN PABLO NOGUES**
- D.Sc. **CHRISTIAN SCHAERER**

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Químicas de la
Universidad Nacional de Asunción, como requisito para la obtención
del grado de **INGENIERO QUÍMICO**

San Lorenzo - Paraguay

Febrero - 2014

Datos internacionales de Catalogación en la Publicación
DE LA BIBLIOTECA DE LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

Varela Estigarribia, Jhabriel Daniel

Modelado y simulación del flujo unidimensional de fluidos en medios porosos /
Jhabriel Daniel Varela Estigarribia. — San Lorenzo: El autor, 2014.
xii,131 p.:il.; 30 cm

Tesis de Grado (Ingeniería Química) — Facultad de Ciencias Químicas.

1. Simulación. I. Título

CDD 620.8

B 877 o

**MODELADO Y SIMULACIÓN DEL FLUJO UNIDIMENSIONAL DE
FLUIDOS EN MEDIOS POROSOS**

JHABRIEL DANIEL VARELA ESTIGARRIBIA

Aprobado en fecha 17 de febrero de 2014

Tribunal Examinador:

- Ing. Quím. Carlos Domingo Méndez Gaona, M.Sc. FCQ/UNA
- Ing. Quím. Shirley Johanna Magalí Duarte Chávez, M.Sc. FCQ/UNA
- Prof. Ing. Quím. Claudia Lorena María Santiviago Petzoldt, M.Eng. FCQ/UNA

.....
Ph.D. JUAN PABLO NOGUES
Orientador

.....
D.Sc. CHRISTIAN SCHAERER
Orientador

Dedicatoria

A María Elvira Frutos, que me cuida desde arriba.

AGRADECIMIENTOS

A mis padres y hermano, que me dieron todo lo que necesitaba y más en la vida.

A mi familia en general, que me apoyó durante la elaboración de la tesis.

A Puppe Buhk y familia, por toda la hospitalidad, el cariño y la paciencia que tuvieron durante todos estos años.

A mis tutores Christian Schaerer y Juan Pablo Noguez, por la orientación, el apoyo y los conocimientos que me transmitieron.

A Hyun Ho Shin y Pedro Torres, por la predisposición y la gentileza de ayudarme en varias ocasiones.

Al Laboratorio de Computación Científica y Aplicada, por permitirme usufructuar la infraestructura y equipamientos.

A Itaipú Binacional, por el financiamiento de la investigación con la beca de Apoyo a la Producción Científica y Tecnológica.

A Natalia Arbo, por el excelente aporte de escribir el formato de la tesis en \LaTeX y a Diego González por los *tips*.

MODELADO Y SIMULACIÓN DEL FLUJO UNIDIMENSIONAL DE FLUIDOS EN MEDIOS POROSOS

Autor: JHABRIEL DANIEL VARELA ESTIGARRIBIA

Orientadores: JUAN PABLO NOGUES y CHRISTIAN SCHAERER

RESUMEN

Este trabajo consta de dos partes, la primera consiste en el modelado y la simulación del flujo monofásico de fluidos en medios porosos. Se presenta la ecuación del flujo subterráneo de agua, deducida a partir del principio de conservación de masa, la ley de Darcy y relaciones constitutivas que contemplan la compresibilidad del medio poroso y del fluido. La ecuación diferencial parcial resultante se discretiza utilizando el método de diferencias finitas, se presentan tres esquemas numéricos distintos; el esquema explícito, el esquema implícito y el esquema de Crank-Nicolson. Se validan los resultados numéricos para un medio poroso homogéneo con la solución analítica y se realiza un análisis del error. Se evalúa la influencia del almacenamiento específico, la conductividad hidráulica y el tamaño del dominio en el tiempo de establecimiento del sistema. Por último, se analizan los perfiles de carga hidráulica en función a la posición y al tiempo para un medio heterogéneo, el cual pretende emular los estratos rocosos presentes en un acuífero. En la segunda parte del trabajo se modela y simula el flujo bifásico de fluidos inmiscibles en un medio poroso. Este tipo de sistemas es común en varios campos, la hidrogeología (contaminación de acuíferos), la ingeniería de yacimientos (recuperación mejorada de petróleo) y la ingeniería química (procesos de absorción en lechos empacados). Este trabajo se enfoca desde el punto de vista hidrogeológico, donde un compuesto inmiscible con el agua (ej: pesticida organoclorado) se infiltra en un acuífero desplazando al agua. El enfoque numérico utilizado para el flujo bifásico es el algoritmo ImPES (*Implicit Pressure Explicit Saturation*), el cual desacopla las ecuaciones del sistema en una ecuación de presión que se resuelve implícitamente y otra de saturación que se resuelve explícitamente. El método numérico utilizado para la discretización de los flujos es el de volúmenes finitos, el cual es ampliamente empleado en la fluidodinámica computacional debido a su capacidad conservativa. Los resultados numéricos son validados con el modelo analítico de Buckley-Leverett, que permite obtener una rápida aproximación al omitir los efectos de la presión capilar. Se evalúa la influencia de distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio en el perfil de saturación del contaminante. Se analiza la influencia de las permeabilidades intrínsecas, del índice de distribución de tamaño de poro, de la presión entrante y de la porosidad en los perfiles de presión y de saturación de contaminante.

Palabras clave: Método de diferencias finitas - Método de volúmenes finitos - Flujo monofásico - Flujo bifásico - ImPES - Buckley-Leverett.

MODELING AND SIMULATION OF ONE-DIMENSIONAL FLOW OF FLUIDS IN POROUS MEDIA

Author: JHABRIEL DANIEL VARELA ESTIGARRIBIA

Advisors: JUAN PABLO NOGUES and CHRISTIAN SCHAERER

SUMMARY

This work consists of two parts, the first consisting of modeling and simulation the single-phase fluid flow in porous media. The groundwater flow equation is presented, deduced from the principle of conservation of mass, the Darcy's law and constitutive relations that include the compressibility of the porous medium and the fluid. The resulting partial differential equation is discretized using the finite difference method, three different numerical schemes are presented, the explicit scheme, the implicit scheme and the Crank- Nicolson scheme. The results are validated for a homogeneous porous medium in contrast to the analytical solution and an error analysis is performed. The influence of the specific storage, the hydraulic conductivity and domain size are evaluated on the settling time of the system. Finally, the hydraulic head profiles are analyzed according to the position and the time for a heterogeneous medium, which aims to emulate the rock strata present in an aquifer. In the second part of the work, a two-phase flow of immiscible fluids in a porous medium is modeled and simulated. This type of system is common in several fields, hydrogeology (groundwater contamination), reservoir engineering (EOR) and chemical engineering (absorption processes in packed beds). This work is focused from the hydrogeological point of view, wherein a water immiscible compound (eg. organochlorine pesticide) infiltrates displacing the water aquifer. The numerical approach used for two-phase flow is the ImPES algorithm (Implicit Pressure Explicit Saturation), which decouples system equations in a pressure equation which is solved implicitly and a saturation equation which is solved explicitly. The numerical method used to perform the discretization is the finite volume method which is widely employed in computational fluid dynamics due to its conservative capacity. The numerical results are validated with the analytical Buckley-Leverett model, which allows a rapid approach bypassing the effects of capillary pressure. It is evaluated the influence of different types of boundary conditions at the end of domain on saturation profile of the contaminant. The influence of permeability, the pore size distribution index, the entry pressure and porosity on the pressure and saturation profiles of contaminant is evaluated.

Key words: Finite difference method - Finite volume method - Single-phase flow - Two-phase flow - ImPES - Buckley-Leverett.

ÍNDICE

	Página
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Objetivos	2
1.1.1 Objetivo General	2
1.1.2 Objetivos Específicos	3
2. REVISIÓN DE LA LITERATURA	4
2.1 Distribución del agua subterránea	4
2.2 Conceptos básicos sobre medios porosos	5
2.3 Carga hidráulica y potencial de fluido	6
2.4 Ecuaciones para el flujo monofásico en medios porosos	7
2.4.1 La experiencia de Darcy	7
2.4.2 La ecuación del flujo subterráneo de agua	11
2.5 Ecuaciones para el flujo bifásico en medios porosos	15
2.5.1 Ecuaciones básicas	16
2.5.2 Permeabilidades relativas	17
2.5.3 Conceptos fundamentales sobre la distribución de fluidos en rocas porosas y su efecto en las curvas de permeabilidad relativa	18
2.5.4 Saturaciones efectivas (normalizadas)	20
2.5.5 Teoría de las permeabilidades relativas para el drenaje bifásico	21
2.5.6 Ajuste de la permeabilidades normalizadas para la saturación residual de la fase mojada	24
2.5.7 Deducción de las ecuaciones gobernantes para el flujo bifásico	26
3. MÉTODOS ANALÍTICOS Y NUMÉRICOS	30
3.1 Flujo monofásico	30
3.1.1 Método Analítico: Expansión en serie de Fourier	30
3.1.2 Método Numérico: Diferencias Finitas	31
3.2 Flujo bifásico	42
3.2.1 Método Analítico: El modelo de Buckley-Leverett	42
3.2.2 Método numérico: Volúmenes Finitos (Algoritmo ImPES)	45

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	53
4.1 Flujo monofásico	53
4.1.1 Caso de estudio #1: Validación de los esquemas numéricos con la solución analítica para medios homogéneos	53
4.1.2 Caso de estudio #2: Análisis de la incidencia de los parámetros físicos del sistema en el tiempo de establecimiento del sistema	54
4.1.3 Caso de estudio #3: Comparación de los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos	57
4.2 Flujo bifásico	60
4.2.1 Caso de estudio #4: Validación de los resultados numéricos obtenidos mediante el algoritmo ImpPES con el modelo de <i>Buckley-Leverett</i> y comparación de resultados numéricos con mallas gruesas y refinadas.	60
4.2.2 Caso de estudio #5: Análisis de la incidencia de adoptar distintos tipos de condiciones de frontera en los perfiles de presión y saturación	64
4.2.3 Caso de estudio #6: Análisis de la incidencia de adoptar celdas con baja permeabilidad en el medio del dominio en los perfiles de presión y saturación de contaminante	68
4.2.4 Caso de estudio #7: Análisis de la incidencia de adoptar celdas con permeabilidades aleatorias en los perfiles de presión y saturación	71
4.2.5 Caso de estudio #8: Análisis de la incidencia de adoptar distintos índices de distribución de tamaño de poros en los perfiles de presión y saturación	75
4.2.6 Caso de estudio #9: Análisis de la incidencia de adoptar distintos valores de presión entrante en los perfiles de presión y saturación	78
4.2.7 Caso de estudio #10: Análisis de la incidencia de adoptar distintos valores porosidad en los perfiles de presión y saturación	81
5. CONCLUSIONES	84
NOMENCLATURA	89
APÉNDICES	89
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	131

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1. Distribución esquemática del agua subterránea.	5
Figura 2. Permeámetro de carga constante, aparato similar al utilizado por Henry Darcy.	8
Figura 3. Ilustración del efecto de la litología en los valores de la conductividad hidráulica para el caso en el que los ejes coordenados coinciden con los ejes principales de estratificación.	10
Figura 4. Ilustración del efecto de la litología en los valores de la conductividad hidráulica para el caso en el que los ejes coordenados no coinciden con los ejes principales de estratificación.	11
Figura 5. Representación esquemática de la filtración de contaminantes de un tanque fracturado en acuíferos.	15
Figura 6. Curvas típicas de permeabilidades relativas para los procesos de drenaje e imbibición.	19
Figura 7. Modelo de red de un medio poroso y curva de distribución de frecuencia para una red de poros.	20
Figura 8. Equivalencia entre saturación poral y saturación efectiva.	21
Figura 9. Permeabilidades efectivas y permeabilidades normalizadas.	22
Figura 10. Curvas de presión capilar y permeabilidades relativas generadas con las correlaciones de Brooks-Corey.	25
Figura 11. Representación esquemática del algoritmo ImpES	29
Figura 12. Molécula computacional para el método explícito.	34
Figura 13. Esquema de diferencias finitas para el modelado de un sistema unidimensional.	35
Figura 14. Molécula computacional para el esquema de diferencias finitas (método implícito) para el flujo de agua subterráneo.	37
Figura 15. Molécula computacional para el Método Crank-Nicolson	39
Figura 16. Volumen de control propuesto para la derivación de la ecuación de Buckley-Leverett.	43

Figura 17. Curva típica del flujo fraccional y su derivada.	44
Figura 18. Distribución de saturación de agua en función al tiempo adimensional y perfil final de saturación de agua	46
Figura 19. Celdas adyacentes, con centros en i y k , compartiendo la cara j	47
Figura 20. Sistema de 5 celdas de igual tamaño, incluyendo el fantasma izquierdo (verde) y el fantasma derecho (naranja).	49
Figura 21. Comparación entre los esquemas numéricos y la solución analítica para las condiciones de simulación de la Tabla 5.	54
Figura 22. Relación entre la conductividad hidráulica y el tiempo de establecimiento.	55
Figura 23. Relación entre el almacenaje específico y el tiempo de establecimiento.	56
Figura 24. Relación entre la longitud del sistema y el tiempo de establecimiento.	56
Figura 25. Distintas disposiciones de estratos rocosos.	57
Figura 26. Perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos.	59
Figura 27. Validación de los resultados numéricos (algoritmo ImPES) con el analítico (modelo de Buckley-Leverett) para distintos valores de presión entrante.	62
Figura 28. Comparación de los resultados obtenidos con mallas gruesas y malla refinada (600 celdas).	63
Figura 29. Perfiles de presión de contaminante para distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio.	66
Figura 30. Perfiles de saturación de contaminante para distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio.	67
Figura 31. Permeabilidades para el caso de estudio #6.	68
Figura 32. Perfiles de presión de contaminante para celdas con baja permeabilidad en el medio del sistema.	69
Figura 33. Perfiles de saturación de contaminante para celdas con baja permeabilidad en el medio del sistema.	70
Figura 34. Permeabilidades para el caso de estudio #7.	72
Figura 35. Perfiles de presión de contaminante para celdas con permeabilidades aleatorias.	73
Figura 36. Perfiles de saturación de contaminante para celdas con permeabilidades aleatorias.	74
Figura 37. Curvas de permeabilidades relativas para distintos valores de τ	75

Figura 38. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores de índice de distribución de tamaño de poros.	76
Figura 39. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de índice de distribución de tamaño de poros.	77
Figura 40. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores presión entrante.	79
Figura 41. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de presión entrante.	80
Figura 42. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores de porosidad.	82
Figura 43. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de porosidad.	83

LISTA DE TABLAS

	Página
Tabla 1. Nomenclatura de variables para el análisis de las curvas de permeabilidades relativas.	21
Tabla 2. Relaciones entre el índice de distribución de tamaño de poros y las permeabilidades normalizadas.	23
Tabla 3. Notación de los operadores de las fórmulas de diferencias finitas.	32
Tabla 4. Comparación entre los métodos de diferencias finitas.	38
Tabla 5. Datos para la validación de esquemas numéricos para flujo monofásico.	54
Tabla 6. Datos para el estudio de los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos porosos.	58
Tabla 7. Datos para la validación de los resultados numéricos con el modelo de Buckley-Leverett.	61
Tabla 8. Datos para el análisis de la incidencia de adoptar distintas condiciones de fronteras al final del dominio.	65
Tabla 9. Datos para el análisis de la incidencia de la presión entrante en los perfiles de presión y saturación.	78

Capítulo 1

1. INTRODUCCIÓN

Los modelos matemáticos para describir el flujo de fluidos en medios porosos han sido utilizados desde hace más de 150 años. Ciertos modelos matemáticos consisten en una serie de ecuaciones diferenciales, que, en conjunto con apropiadas condiciones de frontera y/o iniciales describen un fenómeno físico o químico en particular. La confiabilidad de las predicciones de un modelo matemático depende de la capacidad que posea el modelo para describir el fenómeno en cuestión, sin embargo, mientras más complejo sea un modelo, más difícil será su resolución, es por eso que en general se deben realizar una serie de simplificaciones a la hora de desarrollarlo (Chen et al., 2006).

Las suposiciones para resolver un modelo de manera analítica son muy restrictivas; la mayoría de ellas, por ejemplo, requieren que el medio sea homogéneo e isotrópico. Por dicho motivo es usualmente necesario aproximar las soluciones de los modelos matemáticos empleando métodos numéricos. Desde que los computadores digitales se encontraron ampliamente disponibles, los métodos numéricos han sido utilizados para estudiar, simular y optimizar complejos problemas de flujo de fluidos en medios porosos, como la recuperación mejorada de petróleo, la contaminación de acuíferos y los procesos de adsorción en lechos empacados, sólo por citar algunos (Chen et al., 2006).

Esta tesis de grado contempla dos escenarios bien diferenciados, el flujo unidimensional de una sola fase fluida a través de un medio poroso y el flujo horizontal de dos fluidos inmiscibles a través de un medio poroso.

En el primer escenario se utiliza el método de diferencias finitas para discretizar las ecuaciones diferenciales, se estudia cómo distintos esquemas temporales afectan a la precisión de las soluciones, las cuales son contrastadas con la solución analítica para un medio poroso isotrópico y homogéneo. Se analiza la influencia de ciertos parámetros

físicos en el perfil de carga hidráulica y tiempo de establecimiento del sistema y se provee un modelo que contempla la heterogeneidad en el medio poroso.

En el segundo escenario, el modelo de Buckley-Leverett provee una eficaz solución analítica para simular el flujo bifásico horizontal en medios isotrópicos, homogéneos, y que no consideren la diferencia de presión entre las fases. Sin embargo, al contemplar estos efectos, es necesario recurrir a esquemas numéricos que permitan aproximar las soluciones, el mayor inconveniente para resolver estos esquemas radica en que las ecuaciones que rigen este tipo de sistemas son no lineales y se encuentran altamente acopladas. El algoritmo ImpES (*Implicit Pressure Explicit Saturation*) busca desacoplar estas ecuaciones en una ecuación de presión que es evaluada implícitamente y otra de saturación que es evaluada explícitamente. La discretización temporal se realiza mediante diferencias finitas y la discretización espacial de los flujos se realiza por el método de volúmenes finitos. Se estudia cómo las distintas condiciones de frontera e iniciales afectan a la transmisión de presiones, a los flujos y a la evolución del frente de saturación. Además, se contrastan los resultados del algoritmo ImpES con los del modelo de Buckley-Leverett y se realiza un análisis del error entre los resultados que arrojan mallas gruesas con las de una malla refinada.

En el apéndice se presenta una colección de códigos escritos en lenguaje C++ que contemplan todos los casos anteriormente mencionados. Se ha escogido el lenguaje C++ por sobre otros debido a la alta velocidad de resolución y, por sobre todo a la posibilidad de programar orientado a objetos, atractivo más fuerte de este lenguaje. Si bien, los códigos escritos para esta tesis no están orientados a objetos, se deja la posibilidad de hacerlo en futuras investigaciones.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo General

Simular en estado transiente el flujo de fluidos monofásicos y bifásicos en una dimensión a través de medios porosos.

1.1.2 Objetivos Específicos

Flujo monofásico

- Validar los resultados numéricos obtenidos con distintos esquemas en diferencias finitas (método explícito, método implícito y método de Crank-Nicolson) con la solución analítica para el flujo unidimensional en un medio poroso homogéneo y saturado.
- Evaluar la incidencia de los parámetros físicos (conductividad hidráulica, almacenaje específico y longitud del sistema) en el tiempo de establecimiento para el flujo unidimensional en un medio poroso homogéneo y saturado.
- Comparar los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos para el flujo unidimensional en un medio poroso heterogéneo y saturado.

Flujo bifásico

- Contrastar el modelo analítico de Buckley-Leverett con el algoritmo ImpES en base a su aplicabilidad, flexibilidad e implementabilidad para el flujo horizontal en un medio poroso homogéneo y saturado, y comparar los resultados numéricos obtenidos con mallas gruesas y refinadas.
- Evaluar la influencia de adoptar diferentes condiciones de frontera al final del dominio del sistema en los perfiles de presión y saturación de contaminante para el flujo horizontal en un medio poroso homogéneo y saturado.
- Determinar la incidencia de emplear celdas con baja permeabilidad en distintas regiones del sistema y celdas con permeabilidades aleatorias a lo largo del dominio en la transmisión de presión y velocidad de desplazamiento del frente de saturación del contaminante para el flujo horizontal en un medio poroso heterogéneo y saturado.
- Analizar la influencia de parámetros físicos (índice de distribución de tamaño de poros, presión entrante y porosidad) en la transmisión de presión y velocidad de desplazamiento del frente de saturación del contaminante para el flujo horizontal en un medio poroso homogéneo y saturado.

Capítulo 2

2. REVISIÓN DE LA LITERATURA

En este capítulo se deducen las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos en medios porosos, se presentan las relaciones constitutivas y se definen los parámetros físicos necesarios para obtener la ecuación que describe el flujo unidimensional.

2.1 Distribución del agua subterránea

Para extraer agua del subsuelo para consumo humano, el agua debe fluir hasta un pozo de extracción a flujos relativamente altos, de tal manera a que el volumen producido satisfaga la demanda de la zona. Las formaciones geológicas que proveen agua en estas cantidades son conocidas como *acuíferos*. La habilidad para transmitir agua en grandes cantidades requiere una resistencia relativamente baja al flujo, o lo que es lo mismo, una elevada *permeabilidad* al flujo. Las porciones de rocas que no se encuentran ocupadas por materia sólida se denominan *espacios huecos* (también *poros*, *intersticios* y *fisuras*). Estos espacios pueden contener agua y/o aire, y sólo los intersticios interconectados pueden actuar como medios para conducir el agua (Sánchez, 2013; Bear, 1972).

El agua subterránea puede dividirse en zonas verticales bien diferenciadas dependiendo de la porción relativa de los espacios huecos ocupados por agua: una *zona de saturación*, en la cual todos los poros están completamente llenos de agua, y una zona superior a la de saturación denominada *zona no saturada* (también conocida como *zona de aireación*), en la cual los poros contienen tanto aire como agua. En la Figura 1 se muestran las diferentes zonas ocupadas por el agua subterránea. La zona saturada se encuentra delimitada por la *napa freática* (*water table*). La napa freática es una superficie real en la que la presión del agua iguala a la presión atmosférica. La zona no saturada se extiende desde la superficie freática hasta la superficie del suelo. En esta zona los poros se encuentran sólo parcialmente ocupados por agua (Bear, 1972).

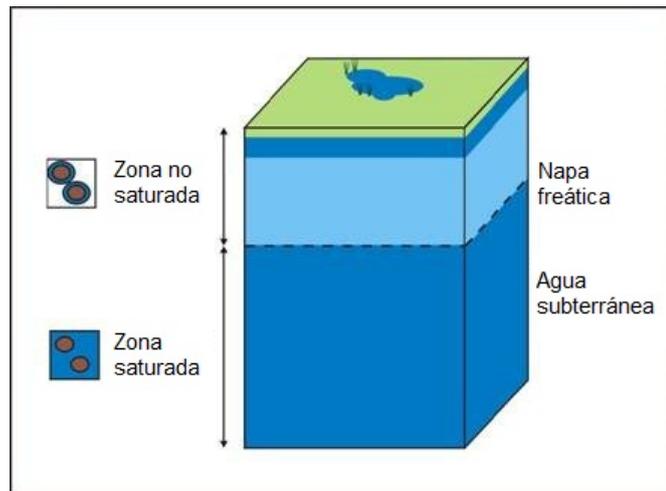


Figura 1. Distribución esquemática del agua subterránea.

Fuente: Adaptado de *Lineamientos para el manejo de las aguas subterráneas a fin de mantener las características ecológicas de los humedales* (p.6), por Ramsar Convention Kampala, 2005.

2.2 Conceptos básicos sobre medios porosos

Un *medio poroso* es un material compuesto por una matriz sólida y un sistema de poros (los cuales pueden estar más o menos interconectados entre sí) por donde circula una o más fases fluidas. La propiedad fundamental que define a un medio poroso es la *porosidad*. Se entiende como porosidad a la relación entre el volumen de espacios huecos y el volumen total del medio poroso:

$$\phi = \frac{V_v}{V_v + V_s} = \frac{V_v}{V}, \quad (1)$$

donde ϕ es la porosidad (o fracción de huecos), V_v es el volumen de espacios vacíos en el medio poroso, V_s es el volumen de sólidos en el medio poroso y V es el volumen total del medio poroso. Un medio poroso frecuentemente consiste en granos sólidos y múltiples fluidos fluyendo en los espacios vacíos. La coexistencia de dos o más fases fluidas, por ejemplo, un contaminante inmisible con el agua (o *NAPL*¹) que invade en la zona saturada de un acuífero, define un *sistema multifásico*. En sistemas multifásicos en medios porosos es común referirse a la *saturación* (o *grado de saturación* de un fluido. La saturación de un fluido se define como la relación entre el volumen de una fase fluida α y el volumen de espacios huecos:

$$S^\alpha = \frac{V_\alpha}{V_v}. \quad (2)$$

¹Del inglés *Non Aqueous Phase Liquid*

Además, como todas las fases fluidas llenan conjuntamente los espacios vacíos se cumple que:

$$\sum_{\beta=1}^N S^{\beta} = 1, \quad (3)$$

donde β es un índice que identifica las fases fluidas presentes, N representa la cantidad de fases fluidas y S^{β} son las saturaciones correspondientes a cada fase fluida.

2.3 Carga hidráulica y potencial de fluido

La teoría fundamental que gobierna el flujo de fluidos en medios porosos establece que los fluidos se mueven respondiendo principalmente a gradientes de energía potencial. El interés de esto radica en que, en vez de utilizar la velocidad como variable primaria, se prefiere expresar la velocidad en términos de una variable primaria más práctica. Un candidato es el *potencial de fluido*, el cual, se encuentra íntimamente relacionado con el concepto de carga hidráulica (Pinder & Celia, 2006). La carga hidráulica o carga total h se define como la suma de la carga de presión ψ y de la carga de elevación ζ :

$$h = \psi + \zeta, \quad (4)$$

donde $\psi = p/(\rho g)$, siendo p la presión del fluido, ρ la densidad del agua y g la aceleración de la gravedad. La carga de presión expresa la presión manométrica (referido a la presión atmosférica p^a) del fluido como cabeza de fluido (en unidades de longitud), por otro lado, la carga de elevación es simplemente la altura desde un punto de referencia.

La energía potencial almacenada en una masa unitaria de fluido en un estado específico es el trabajo requerido para transformar ese fluido desde un estado de referencia arbitrario al estado específico. Por ejemplo, si se quiere transformar una masa unitaria de líquido que se encuentra inicialmente al estado de referencia: elevación $z = 0$, presión $p = p^a$, volumen específico $\nu = \nu(p^a)$ y velocidad $v = 0$ a otro estado: z , p , $\nu(p)$ y v , el *potencial total* por unidad de masa con respecto al estado de referencia, el cual se denota por Ω es:

$$\Omega = gh = g \int_{z_0}^z dz + \int_{p^a}^p \frac{dp}{\rho(p)} + \frac{v^2}{2}. \quad (5)$$

El primer término del lado derecho de la Ecuación (5) representa la energía *potencial gravitacional* adquirida por la masa debido al movimiento desde el punto de referencia $z = 0$ al punto deseado² z , donde g es nuevamente la aceleración debido a la grave-

²Notar que en este análisis, el eje z está orientado como positivo hacia arriba.

dad. El segundo término es el *potencial de presión* en z , donde la presión atmosférica p^a es tomada como referencia, y $1/\rho(p)$ es el volumen específico a la presión p . El tercer término representa la contribución del *potencial cinético* al potencial total. En su clásico artículo *Theory of Groundwater Motion*, Hubbert (1940) presenta, a través de un experimento conceptual, una explicación detallada del significado del potencial de fluido.

Debido a que las velocidades de los flujos subterráneos de agua son bajas (alrededor de 1 a 10 m $a\tilde{n}o^{-1}$), la contribución de la energía cinética al potencial total es despreciable, y es omitida en todas las ecuaciones de flujo subterráneo de agua. Así, existen dos componentes principales que contribuyen al potencial de flujo en el flujo de fluidos en medios porosos: el potencial gravitacional y el potencial de presión. Para exponer la relación entre la carga hidráulica y el potencial de flujo se reescribe la Ecuación (5) en términos de potencial por unidad de peso, esto es Ωg^{-1} . Así, se obtiene:

$$h = \frac{\Omega}{g} = \int_{z_0}^z dz + \int_{p^a}^p \frac{dp}{g\rho(p)}, \quad (6)$$

donde se han dividido ambos miembros por g , y $\rho(p)$ está definida por una relación de compresibilidad. También se observa que esta expresión corresponde a la definición previa de carga total, h (véase Ecuación (4)).

2.4 Ecuaciones para el flujo monofásico en medios porosos

2.4.1 La experiencia de Darcy

En 1856, Henry Darcy fue el primero en estudiar el flujo de fluidos en medios porosos. Realizó una serie de experimentos para determinar los parámetros que afectaban el flujo de agua a través de un filtro de arena. En la Figura 2 se muestra un aparato similar al utilizado por Darcy para llevar a cabo sus experiencias, hoy se lo conoce con el nombre de *permeámetro de carga constante* (Sánchez, 2011).

Sánchez (2011) describe el aparato y su funcionamiento:

Básicamente un permeámetro es un recipiente de sección constante por el que se hace circular agua conectando a uno de sus extremos un depósito elevado de nivel constante. En el otro extremo se regula el caudal de salida mediante un grifo que en cada experimento mantiene el caudal también constante. Finalmente, se mide la altura de la columna de agua en varios puntos, como mínimo en dos (p.1).

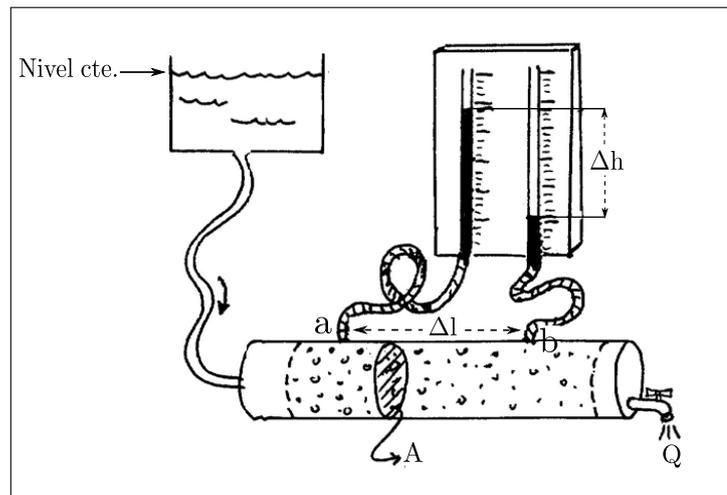


Figura 2. Permeámetro de carga constante. A es el área de sección transversal, Q es el flujo de salida y Δh y Δl son la diferencia de carga hidráulica y longitud entre los puntos a y b , respectivamente.

Fuente: Adaptado de *Ley de Darcy. Conductividad Hidráulica* (p.1), por F. J. Sanchez, 2011.

Darcy verificó en base a sus experimentos que el caudal de agua que atravesaba el permeámetro era linealmente proporcional a la sección de área transversal del permeámetro y al gradiente de carga hidráulica (Sánchez, 2011).

Es decir, al variar el caudal de agua (ya sea cambiando la altura del depósito elevado o regulándolo con la válvula de salida) los niveles de agua en los tubos también lo hacen. Este procedimiento puede repetirse con permeámetros de distintos diámetros y midiendo la diferencia de altura en puntos más o menos próximos (Sánchez, 2011). Empero, siempre que se utilice el mismo medio poroso, se cumple que:

$$Q = KA \frac{\Delta h}{\Delta l}, \quad (7)$$

donde Q es el caudal, A es el área de sección transversal del permeámetro, $\Delta h/\Delta l$ es el gradiente de carga hidráulica medido entre los puntos a y b , y K es la constante de proporcionalidad. Si se utiliza otro tipo de material y realizando nuevamente diferentes experiencias, la Ecuación (7) vuelve a cumplirse, sin embargo, la constante de proporcionalidad K es distinta (Sánchez, 2011). Darcy concluyó que esta constante de proporcionalidad era propia de cada tipo de material y la denominó permeabilidad, aunque hoy en día la denominación correcta es *conductividad hidráulica*. Hubbert & Willis (1957) determinaron que:

$$K \equiv \frac{(ND^2)(\rho/\mu)}{g} = \frac{k\rho g}{\mu}, \quad (8)$$

donde definieron el producto ND^2 como la *permeabilidad* k [L^2] del medio poroso. N es un factor adimensional de forma del grano, D es el diámetro de esferas uniformes aleatoriamente empacadas, ρ es la densidad del fluido, g es la aceleración gravitacional, y μ es la viscosidad dinámica del fluido. Notar que k depende sólo del tipo de material que conforma el medio poroso, sin embargo, K depende tanto del fluido como del tipo de material (Pinder & Celia, 2006). Realizando un análisis dimensional se puede comprobar fácilmente que las unidades de la conductividad hidráulica son [LT^{-1}], siendo común expresar en $m\ a\ ño^{-1}$ para estudios regionales, $m\ día^{-1}$ para estudios de acuíferos locales y $cm\ s^{-1}$ para estudios de laboratorio.

La ley de Darcy puede escribirse en su forma diferencial unidimensional de la siguiente forma:

$$Q = -KA \frac{dh}{dl}. \quad (9)$$

El signo negativo es necesario ya que la carga hidráulica decrece en la dirección del flujo, es decir, el agua siempre fluirá de cargas hidráulicas altas a cargas hidráulicas bajas. La forma más utilizada para expresar la ley de Darcy es la siguiente:

$$u = Q/A = -K \frac{dh}{dl}, \quad (10)$$

donde u es la *velocidad de Darcy* (también conocida como descarga específica o flujo de Darcy). La velocidad de Darcy no representa la velocidad real de fluido en el medio poroso, es solamente el flujo volumétrico Q por unidad de sección transversal del permeámetro A . Debido a que una roca porosa no posee un área de sección transversal “sólida”, la velocidad de Darcy no es la velocidad real del fluido.

A diferencia del permeámetro, en un acuífero el agua fluye en complejos patrones tridimensionales. La ley de Darcy puede extenderse a tres dimensiones de manera análoga a la propuesta en una dimensión. En un sistema cartesiano x, y, z , es comúnmente expresada como:

$$u_x = -K_x \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (11)$$

$$u_y = -K_y \frac{\partial h}{\partial y}, \quad (12)$$

$$u_z = -K_z \frac{\partial h}{\partial z}, \quad (13)$$

donde u_x, u_y y u_z son los tres componentes de la velocidad de Darcy \underline{u} , por otro lado K_x, K_y y K_z son las conductividades hidráulicas en cada dirección del eje coordenado, respectivamente. Para estimar estas conductividades direccionales, el experimento

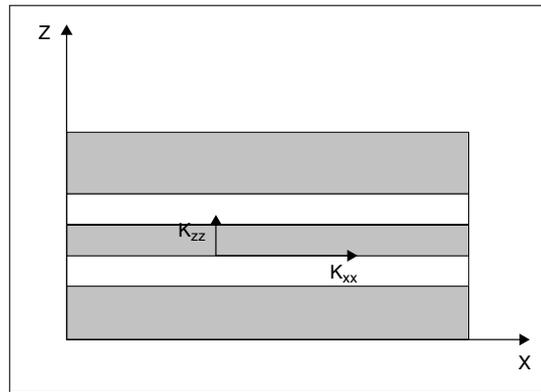


Figura 3. Ilustración del efecto de la litología en los valores de la conductividad hidráulica para el caso en el que los ejes coordenados coinciden con los ejes principales de estratificación.

Fuente: Adaptado de *Subsurface Hydrology* (p.88), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

de Darcy puede realizarse a lo largo de la dirección x , en este caso la conductividad hidráulica horizontal a lo largo de la dirección x , es decir, K_x puede ser determinada. La misma idea se puede aplicar para las conductividades en las direcciones y y z . En general para un medio poroso, K_x , K_y y K_z no son necesariamente iguales, en ese caso el medio es *anisotrópico*. Es común que la magnitud de la componente vertical de la conductividad hidráulica en un suelo o roca con estratificación horizontal pueda ser varios órdenes de magnitud menor que la horizontal (Zhang, 2011). La Figura 3 muestra la situación en la que, debido a la estratificación, la conductividad hidráulica en la dirección x es mayor que la conductividad en la dirección z . Por otro lado, si $K_x = K_y = K_z$ se dice que el medio es *isotrópico*.

En tres dimensiones, los flujos y las velocidades de Darcy (\underline{Q} y \underline{u}) son cantidades vectoriales³, así como el gradiente de carga hidráulica, el cual se denota como \underline{I} , donde $\underline{I} = [I_x, I_y, I_z]$ siendo $I_x = \partial h / \partial x$, $I_y = \partial h / \partial y$, $I_z = \partial h / \partial z$. La carga hidráulica h sigue siendo un escalar, mientras que la conductividad hidráulica es un tensor⁴ de segundo orden:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix}$$

Notar que $\underline{\underline{K}}$ posee más componentes que los mostrados previamente para la Ley de Darcy en tres dimensiones (Ecuaciones (11), (12) y (13)), esto se debe a que estas ecuaciones están sujetas a un especial requerimiento: los tres ejes coordenados coinciden con los ejes principales de estratificación del medio poroso. Sin embargo, el caso

³Las variables denotadas con $\underline{\quad}$ corresponden a cantidades vectoriales.

⁴Los variables denotadas con $\underline{\underline{\quad}}$ corresponden a cantidades tensoriales.

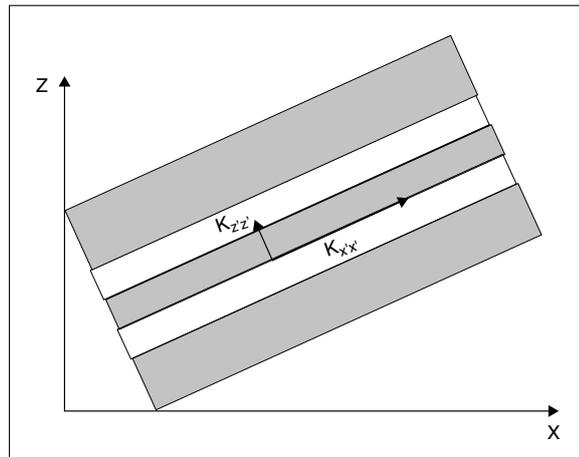


Figura 4. Ilustración del efecto de la litología en los valores de la conductividad hidráulica para el caso en el que los ejes coordenados no coinciden con los ejes principales de estratificación.

Fuente: Adaptado de *Subsurface Hydrology* (p.88), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

más general contempla que la dirección de los ejes coordenados no coincidan con los ejes principales de la conductividad hidráulica del medio poroso, esto implica que el tensor conductividad hidráulica tendrá nueve componentes (Zhang, 2011). La Figura 4 muestra que los máximos valores se encuentran sobre x' y z' , los cuales claramente no coinciden con la dirección de los ejes coordenados.

La práctica habitual es “alinear” los ejes coordenados x , y y z para que coincidan con los ejes de estratificación del medio poroso (Pinder & Celia, 2006). Cuando este requerimiento es satisfecho, $\underline{\underline{K}}$ se convierte en un tensor diagonal:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{bmatrix},$$

donde K_x , K_y y K_z son los autovalores de la matriz $\underline{\underline{K}}$. La ley de Darcy escrita en forma vectorial en tres dimensiones es:

$$\underline{u} = -\underline{\underline{K}}\underline{I}. \quad (14)$$

2.4.2 La ecuación del flujo subterráneo de agua

En este apartado se deduce la ecuación de flujo subterráneo de agua, combinando la ecuación de conservación de masa para medios porosos y relaciones constitutivas. La ecuación de conservación de masa para medios porosos en ausencia de términos de

generación y/o consumo se presenta a continuación:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho\underline{v}) = 0, \quad (15)$$

donde el primer término de la ecuación corresponde al de acumulación y el segundo término contempla los efectos de advección, siendo \underline{v} la velocidad real del fluido a través del medio poroso. La deducción detallada de la ecuación de conservación de masa para medios porosos se presenta en el Apéndice A.2 partiendo de la forma general introducida en el Apéndice A.1.

Examinando la Ecuación (15) se cuenta con una ecuación y cuatro incógnitas ρ y los tres componentes de la velocidad \underline{v} (asumiendo que la porosidad es conocida). Para que el sistema pueda resolverse es necesario añadir más información. Una información es la relación constitutiva de la ley de Darcy. Como se dedujo anteriormente, la ley de Darcy (Ecuación (14)) establece que:

$$\underline{u} = -\underline{K} \cdot \nabla h, \quad (16)$$

Para incluir la velocidad de Darcy en la ecuación de conservación de masa para medios porosos es necesario expresarla en función a la velocidad real del fluido, esto es:

$$\underline{u} = \phi\underline{v}. \quad (17)$$

Combinando las Ecuaciones (A.2.22), (16) y (17) se obtiene:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} - \nabla \cdot \rho(\underline{K} \cdot \nabla h) = 0. \quad (18)$$

Esto permite reemplazar tres incógnitas (los componentes de \underline{v}) con una nueva, la carga hidráulica. Ahora se cuenta con una ecuación y dos incógnitas (o cuatro ecuaciones y cinco incógnitas). Para avanzar en la deducción, se aplica la regla de la cadena para expandir el primer término de la izquierda de la Ecuación (18):

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \phi \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial\phi}{\partial t}. \quad (19)$$

Ahora se introducen dos relaciones constitutivas adicionales. Es sabido a través de experimentos conducidos en varios tipos de suelos que las partículas sólidas se consolidan o se vuelven más compactas cuando la presión del agua decrece. La relación

es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{d\phi}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} = C_v \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (20)$$

donde C_v es el *coeficiente de consolidación*, ampliamente utilizado en la mecánica de sólidos. La segunda relación constitutiva relaciona la presión del fluido con la *compresibilidad del agua*, esto es:

$$\beta \equiv \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp}, \quad (21)$$

donde β es la compresibilidad del agua. Además:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{d\rho}{dp} \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (22)$$

debido a que ρ es función exclusiva de la presión (aparece en forma de derivada total), en cambio la presión depende tanto del tiempo como de las coordenadas espaciales (aparece en forma de derivada parcial). Reemplazando las Ecuaciones (22) y (20) en la Ecuación (19) se obtiene:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \phi \frac{d\rho}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho C_v \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (23)$$

Multiplicando y dividiendo por ρ el primer término de la derecha de la Ecuación (23) se puede escribir:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \phi\rho \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho C_v \frac{\partial p}{\partial t}.$$

Ordenando y aplicando la relación constitutiva de la compresibilidad del agua se obtiene:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \rho(\phi\beta + C_v) \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (24)$$

La carga hidráulica puede expresarse en términos de carga de elevación y carga de presión mediante la siguiente expresión (véase Ecuación (6)):

$$h = \int_{z_0}^z dz + \int_{p^a}^p \frac{d\pi}{g\rho(\pi)}, \quad (25)$$

donde π es simplemente una variable auxiliar para representar la presión.

Aplicando la regla de Leibniz integral se puede obtener una ecuación que relacione la derivada de la carga hidráulica con respecto al tiempo y la derivada de la presión con respecto al tiempo:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_0}^z dz + \frac{\partial}{\partial t} \int_{p_{atm}}^p \frac{d\pi}{g\rho(\pi)}, \quad (26)$$

de este modo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{z_0}^z dz = 0, \quad (27)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{p_{atm}}^p \frac{d\pi}{g\rho(\pi)} = \frac{1}{g\rho(p)} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (28)$$

Reemplazando la Ecuación (27) y (28) en la Ecuación (26) se obtiene:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{g\rho(p)} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (29)$$

Ordenando la Ecuación (29) se puede escribir:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g\rho(p) \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (30)$$

Reemplazando la Ecuación (30) en la Ecuación (24) se obtiene:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \rho^2 g(\phi\beta + C_v) \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (31)$$

Finalmente, reemplazando la Ecuación (31) en la Ecuación (18) se puede escribir:

$$\rho^2 g(\phi\beta + C_v) \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla h) = 0. \quad (32)$$

o bien:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla h) = 0. \quad (33)$$

donde $S_s \equiv g\rho(\phi\beta + C_v)$ es el *almacenaje específico*, definido como el volumen de agua liberada de un volumen unitario de medio poroso debido a un decremento unitario en la carga hidráulica (Bear, 1972). Para derivar la Ecuación (33) a partir de la Ecuación (32) se ha asumido que el gradiente espacial de la densidad es despreciable comparado con otros términos en la ecuación y por lo tanto fue eliminado.

Debido a que el almacenaje específico es una función de ρ , y por ende de h , la Ecuación (33) es no lineal, esto es, implica el producto de un coeficiente que depende de h y la derivada de h en el término $\partial h/\partial t$. Sin embargo, debido a que esta es una no linealidad débil (S_s no cambia mucho cuando ρ cambia) es en general despreciada, S_s es normalmente una constante o una función sólo del espacio. El gradiente espacial de ρ ($\underline{u} \cdot \nabla \rho$) es usualmente mucho menor que la divergencia del flujo ($\rho \nabla \cdot \underline{u}$), lo cual justifica el hecho de despreciar este término (Pinder & Celia, 2006).

2.5 Ecuaciones para el flujo bifásico en medios porosos

El flujo de fluidos multifásicos en medios porosos ha sido foco de interés de varios campos, la simulación de procesos de recuperación de petróleo, la simulación del flujo de agua en la zona de aireación, la contaminación de acuíferos saturados por NAPL (*Non Aqueous Phase Liquid*), la simulación del flujo en reactores de lecho catalítico fijo, los procesos de transferencia de masa en columnas empacadas (procesos de absorción), etc. En esta sección se presentan las ecuaciones que rigen el flujo de dos fluidos inmiscibles en un medio poroso, más adelante se discretizan estas ecuaciones y se simula el proceso de invasión de un contaminante en un acuífero saturado.

El modelo de flujo bifásico propuesto en este trabajo es sólo válido para el proceso de drenaje, que consiste en la invasión de un contaminante no miscible con el agua (como solventes halogenados, pesticidas orgánicos o compuestos derivados del petróleo) en una porción de acuífero, desplazando al agua y ocupando su lugar. En regiones rurales suele ser una práctica corriente enterrar los barriles de defensivos agrícolas vencidos o parcialmente agotados, estos tanques se fracturan y el contaminante se filtra en el acuífero, otra situación probable sería que un tanque de almacenamiento de nafta o diesel de una estación proveedora de combustible sufra una fractura, esto también implicaría la filtración de estos combustibles en el acuífero. Estos tanques se encuentran

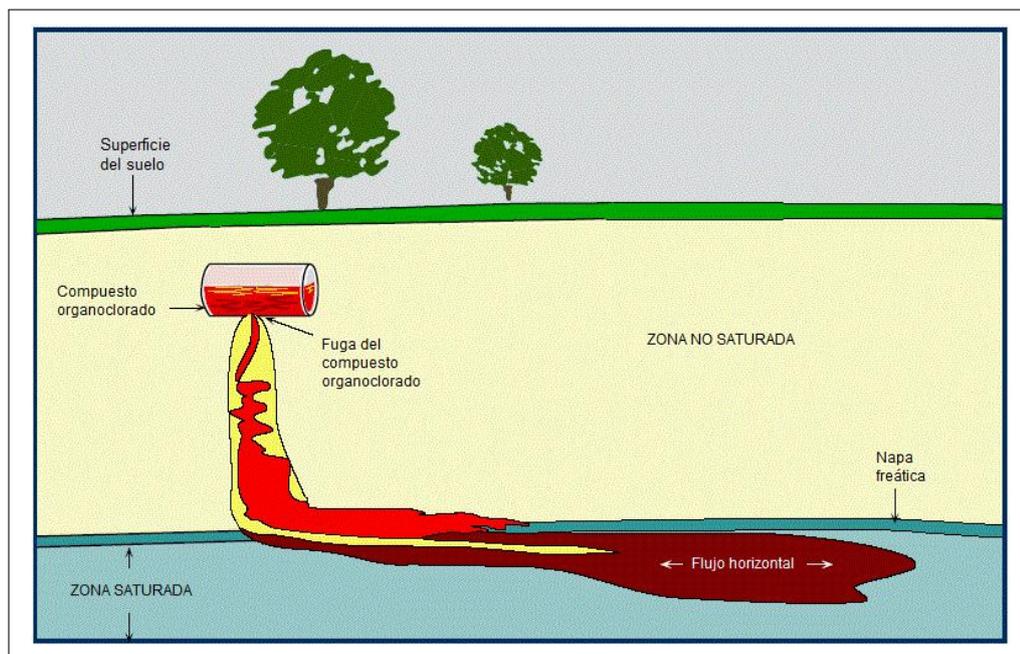


Figura 5. Representación esquemática de la filtración de contaminantes de un tanque fracturado en acuíferos.

Fuente: Adaptado de *Subsurface Hydrology* (p.38), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

generalmente a metros de la superficie, es decir en la zona no saturada de los acuíferos, sin embargo, este modelo es aplicable sólo en la zona saturada de los acuíferos, ya que de aplicarse a la zona no saturada se tendría un sistema trifásico aire-agua-contaminante y este enfoque escapa del alcance de esta tesis. En la Figura 5 se muestra una representación esquemática de la filtración de solvente organo-clorado de un barril de almacenamiento enterrado a metros del suelo, el contaminante se desplaza en una trayectoria vertical en la zona no saturada, sin embargo, al atravesar la napa freática el contaminante se desplaza horizontalmente y el modelo propuesto es válido debido a que los efectos de la gravedad no son contemplados. En el proceso de drenaje, una fase (ej: agua) *moja* los poros de la roca más que la otra (ej: aceite), entonces es llamada *fase mojada* y es indicada por el superíndice w . La otra fase es denominada *fase no mojada* y es indicada por el superíndice n .

2.5.1 Ecuaciones básicas

Para comprender las ecuaciones gobernantes que rigen el flujo bifásico en medios porosos se deben introducir algunos conceptos como *saturación*, *presión capilar* y *permeabilidad relativa*. La saturación (o saturación poral) de una fase (véase Ecuación (2)) es la fracción del volumen de espacio vacío llenada por esa fase. El hecho de que dos fluidos llenen conjuntamente los poros del medio implica la relación (véase Ecuación (3)):

$$S^w + S^n = 1. \quad (34)$$

donde S^w y S^n son las saturaciones de la fase mojada y no mojada, respectivamente. Además, debido a la *curvatura* y la *tensión superficial* de la interfase entre las dos fases, la presión de la fase mojada es menor que la de la fase no mojada. La diferencia de presión que existe se denomina presión capilar:

$$p^c = p^n - p^w. \quad (35)$$

Generalmente suele considerarse a la presión capilar como función de S^w .

La ecuación de conservación de masa en un medio poroso para una sola fase fue presentada anteriormente, para el flujo bifásico la ecuación es básicamente la misma, a diferencia del término de acumulación que es distinto. Ahora se cuenta con dos ecuaciones de conservación, una para cada fase. La acumulación de masa en un volumen

diferencial por unidad de tiempo es:

$$\frac{\partial (\phi \rho^\alpha S^\alpha)}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (36)$$

Asumiendo que no existe transferencia de masa entre las fases, la conservación de masa para cada fase es:

$$\frac{\partial (\phi \rho^\alpha S^\alpha)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho^\alpha \underline{u}^\alpha) + \dot{m}^\alpha, \quad (37)$$

donde cada fase tiene su propia densidad ρ^α , velocidad de Darcy \underline{u}^α y flujo másico \dot{m}^α . La ley de Darcy presentada anteriormente para el flujo monofásico puede extenderse para el flujo multifásico:

$$\underline{u}^\alpha = -\frac{\underline{k}^\alpha}{\mu^\alpha} (\nabla p^\alpha - \rho^\alpha g \nabla z), \quad (38)$$

donde \underline{k}^α , p^α y μ^α son la permeabilidad efectiva, la presión y la viscosidad de la fase α . Debido a que el flujo simultáneo de dos fluidos causa que uno interfiera con el otro, las permeabilidades efectivas no pueden ser mayores que la permeabilidad absoluta \underline{k} del medio poroso. La correcta evaluación de las permeabilidades relativas es vital en el área de flujo multifásico, un análisis detallado se presentará más adelante. Por el momento se define la permeabilidad relativa por medio de la siguiente relación:

$$\underline{k}^\alpha = k_r^\alpha \underline{k}. \quad (39)$$

Así, se cuenta con la relación de saturación, la relación de presión capilar, las ecuaciones de conservación de masa para cada fase y la ley de Darcy extendida para cada fase. Con estas seis ecuaciones se puede modelar cualquier problema de flujo bifásico inmisible en medios porosos (Chen et al., 2006).

2.5.2 Permeabilidades relativas

Todas las ecuaciones utilizadas para resolver sistemas de flujo bifásico en medios porosos requieren de valores de permeabilidad relativa. La *permeabilidad efectiva* expresa la permeabilidad con respecto al fluido que fluye bajo condiciones de saturación existentes en la roca. Se denota la permeabilidad efectiva por la letra \underline{k}^α donde α puede ser la fase mojada (agua) o la fase no mojada. Standing (1975) estableció que las permeabilidades efectivas pueden ser consideradas función de:

1. Distribución del tamaño de poro.
2. Mojabilidad.
3. Saturación.
4. Historia de la saturación.

La *permeabilidad absoluta* de una roca \underline{k} , es definida como la permeabilidad con respecto a un fluido con 100 % de saturación el cual no reacciona con los componentes minerales de la roca. En efecto, la permeabilidad absoluta depende solamente de la distribución del tamaño de poro (Standing, 1975).

Las *permeabilidades relativas* k_r^α son el resultado de expresar la permeabilidad efectiva como una fracción de algún valor base de permeabilidad. Lo más habitual (y recomendable) es utilizar la permeabilidad absoluta como base (Standing, 1975).

La historia de la saturación depende de dos fenómenos: *drenaje e imbibición*. Las curvas de permeabilidades relativas de drenaje, deben ser usadas en procesos en que la saturación de la fase mojada, decrece en magnitud, en tanto las curvas de permeabilidades relativas de imbibición deberán ser aplicadas en los casos en que la saturación de la fase mojada aumenta en magnitud. En la Figura 6a se puede apreciar la curva típica para el proceso de drenaje y en la Figura 6b para el proceso de imbibición. El agua es la fase mojada para ambos casos. S^{iw} denota el valor de la saturación irreducible de agua, es decir, independientemente del volumen de NAPL que desplaza al agua que se encuentra inicialmente en el acuífero, como máximo, el valor de la saturación del NAPL podrá alcanzar $1 - S^{iw}$. Para el caso de imbibición, el agua desplaza, por ejemplo, petróleo, sin embargo, la saturación inicial no es cero, sino S^{iw} . Análogamente al proceso de drenaje existe una saturación residual o irreversible para el petróleo, esto es, S^{or} .

2.5.3 Conceptos fundamentales sobre la distribución de fluidos en rocas porosas y su efecto en las curvas de permeabilidad relativa

El propósito de este apartado es proveer ciertos conceptos básicos acerca de la distribución de fluidos en rocas porosas y su efecto en las curvas de permeabilidades relativas. Para empezar, es conveniente considerar la estructura porosa de un acuífero como un ensamblaje de diferentes tamaños y formas, donde cada poro se encuentra interconectado con muchos otros. En la Figura 7a se presenta el modelo de red propuesto por Fatt & Dykstra (1951) para ilustrar este punto. Un poro individual es representado por

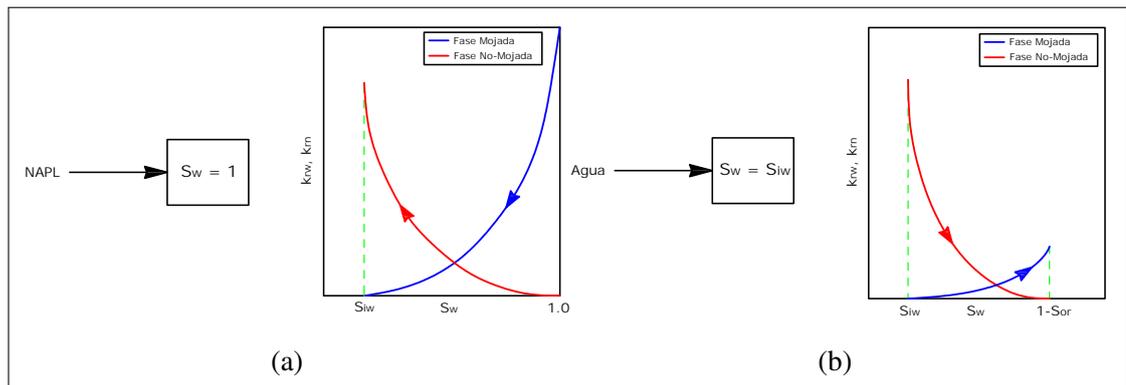


Figura 6. (a) Curvas típicas de permeabilidad relativa - saturación para el proceso de drenaje. (b) Curvas típicas de permeabilidad relativa - saturación para el proceso de imbibición.

Fuente: Adaptado de *Handout note 3: Review of relative permeabilities and capillary pressures* (p.1), por J. Kleppe, 2013.

una línea de segmento entre puntos conectados. Se debe tener en cuenta, que cada poro tiene su propio tamaño, forma y característica de superficie. Lo importante aquí es que existen diferentes rutas por las cuales los fluidos pueden fluir desde un punto a otro del sistema. En la Figura 7b se muestra una curva de distribución de frecuencia hipotética de una red porosa como la ilustrada en la Figura 7a y la ubicación de la fase mojada (agua) y la fase no mojada (NAPL) en la estructura porosa cuando el NAPL desplaza al agua. En el proceso de drenaje, el NAPL ingresa en los poros más grandes primero y progresivamente va ocupando los poros más pequeños. Algo de agua permanece en los poros invadidos por el NAPL pero es inmóvil como consecuencia de estar atrapada en poros individuales o adsorbido en superficies minerales de la pared de los poros. En esencia, la saturación y las condiciones de mojabilidad determinan el tamaño del poro en las que las fases mojadas y no mojadas se ubican (Standing, 1975).

Si se considera que el modelo de red presentado en la Figura 7a se encuentra completamente saturado con agua (fase mojada), una medida de la permeabilidad hecha con agua arrojaría el valor absoluto. Este valor de permeabilidad absoluta puede ser considerado proporcional a alguna función del área de sección transversal de todos los poros e inversamente proporcional a alguna otra función de longitud promedio de la trayectoria de flujo. Notar que la trayectoria de flujo siempre será mayor que la distancia en línea recta que une los dos puntos dentro del sistema, esta característica de los medios porosos se conoce como *tortuosidad*.

Como se mencionó anteriormente, cuando el NAPL invade la estructura porosa, ocupa preferencialmente los poros de mayor tamaño, esto resulta en una disminución en la permeabilidad del agua debido a que el área de sección transversal de los poros que

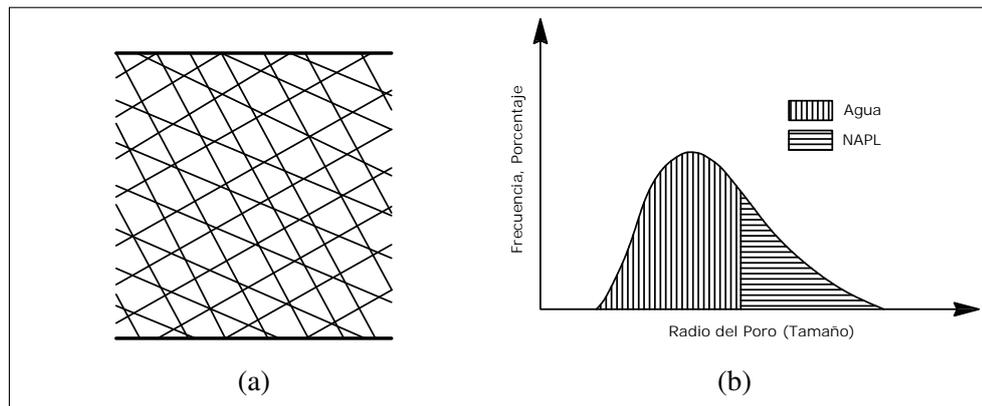


Figura 7. (a) Modelo de red de un medio poroso propuesto por Fatt. (b) Curva de distribución de frecuencia hipotética para una red de poros típica.

Fuente: Adaptado de *Notes on relative permeability relationships* (p.4), por M. Standing, 1975.

conducen agua es menor que antes y la longitud promedio de la trayectoria de flujo es mayor; esto es, el agua fluye ahora alrededor de poros llenos con NAPL. Es este efecto combinado de cambio de área y longitud efectiva de trayectoria de flujo lo que determina una forma específica de la curva de permeabilidad relativa - saturación. Como fue ilustrado en la Figura 6a, la saturación del agua decrece rápidamente al inicio pero eventualmente tiende a cero asintóticamente y se vuelve cero al valor de la saturación irreducible, S_{iw} . Notar, sin embargo, que la curva para el NAPL termina al valor de S_{iw} , esto es de esperarse debido a que aún existe algo de agua en la estructura del poro que impide el flujo del NAPL (Standing, 1975).

Es más fácil discutir el comportamiento de las curvas de permeabilidad relativa - saturación si se utilizan unidades de saturación efectiva en vez de saturación poral.

2.5.4 Saturaciones efectivas (normalizadas)

La *saturación efectiva* o *saturación normalizada* expresa la saturación del fluido como una fracción del rango de movilidad del fluido. Se denota la saturación efectiva con la letra e seguida de la saturación correspondiente a cada fase, así, la saturación efectiva para la fase mojada sería S^{we} . Por definición, las saturaciones efectivas son escritas en términos de la saturación irreversible de la fase mojada. Así, para una roca mojada al agua (roca que posea mayor afinidad al agua) las saturaciones efectivas serían:

$$S^{we} = \frac{S_w - S_{iw}}{1 - S_{iw}} \quad S^{ne} = \frac{S_n}{1 - S_{iw}}$$

En la Figura 8 se muestran las equivalencias entre las saturaciones porales y las saturaciones efectivas.

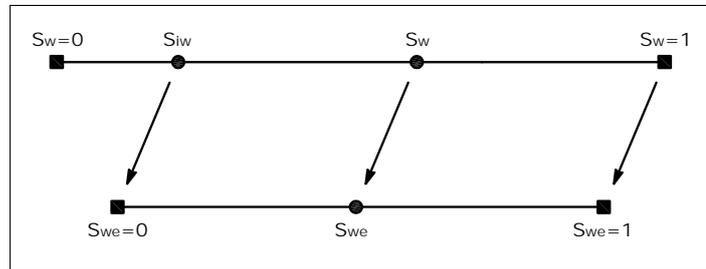


Figura 8. Equivalencia entre saturación poral y saturación efectiva.

2.5.5 Teoría de las permeabilidades relativas para el drenaje bifásico

Anteriormente se estableció que la permeabilidad efectiva de un fluido dado a una condición de saturación en particular es función de la distribución del tamaño de poros de la roca, de la mojabilidad relativa de los fluidos con relación a la superficie de la roca y de la historia de la saturación del sistema roca-fluido. Lo mismo se puede decir de los valores de permeabilidad relativa. A continuación se desarrollan algunas relaciones generales de permeabilidad relativa en términos de la saturación efectiva. En la Tabla 1 se muestran las definiciones de utilidad para el análisis.⁵

Tabla 1. Nomenclatura de variables para el análisis de las curvas de permeabilidades relativas.

Variable	Significado
S^w	saturación de la fase mojada, fracción de volumen poral
S^n	saturación de la fase no mojada, fracción de volumen poral
S^{iw}	saturación irreducible de la fase mojada, fracción de volumen poral
S^{we}	saturación efectiva de la fase mojada
k^w, k^n	permeabilidad efectiva de la fase mojada y no mojada a una saturación de la fase mojada determinada
$k^w _{S^{we}=1}$	permeabilidad efectiva de la fase mojada a la saturación efectiva de la fase mojada igual a 1
$k^n _{S^{we}=0}$	permeabilidad efectiva de la fase no mojada a la saturación efectiva de la fase mojada igual a 0
\ddot{k}^w	permeabilidad normalizada de la fase no mojada = $k^w/k^w _{S^{we}=1}$
\ddot{k}^n	permeabilidad normalizada de la fase no mojada = $k^n/k^n _{S^{we}=0}$
τ	índice de distribución de tamaño de poros

Nota. Fuente: Adaptado de *Notes on relative permeability relationships* (p.8), por M. Standing, 1975.

⁵Con fines de legibilidad se evitará usar la notación tensorial \underline{k}^α

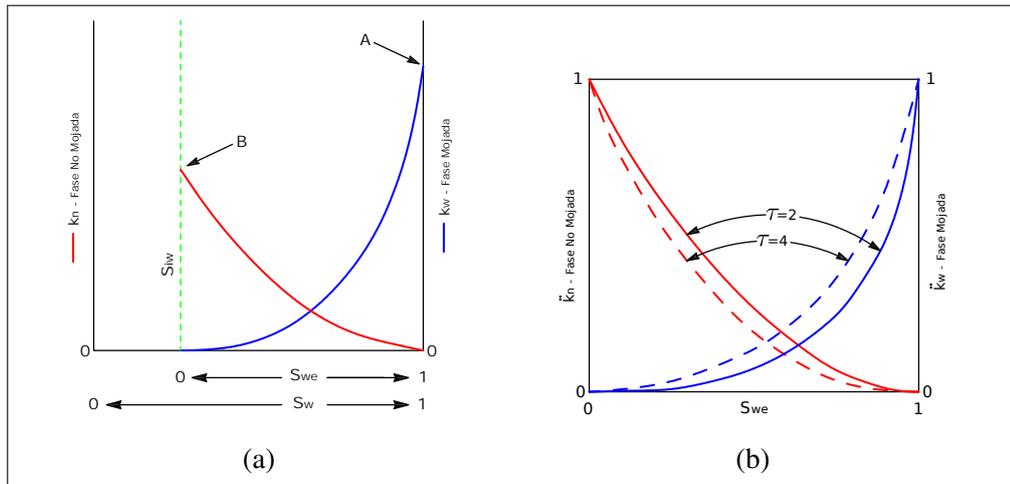


Figura 9. (a) Permeabilidades efectivas para fases mojada y no mojada frente a las saturaciones poral y efectiva. (b) Permeabilidades normalizadas para distintos índices de distribución de tamaño de poros.
 Fuente: Adaptado de *Notes on relative permeability relationships* (p.9), por M. Standing, 1975.

En las Figuras 9a y 9b se ilustran algunas relaciones entre los términos definidos en la Tabla 1. Los puntos A y B de la Figura 9a identifican las permeabilidades efectivas de las fases, utilizadas para obtener los valores de permeabilidades normalizadas representadas en la Figura 9b. Los dos tipos de curvas de la Figura 9b corresponden a diferentes características de tamaños de poros. Las curvas sólidas $\tau = 2$, son características de rocas que poseen un amplio rango de tamaños de poro, mientras que las curvas discontinuas, $\tau = 4$, representan un rango medio de tamaño de poros. Las curvas que adoptan el valor de $\tau = 2$ son frecuentemente llamadas curvas de *Corey* (Corey, 1954). Mientras mayor sea el valor de τ , más uniforme es la distribución del tamaño de poros. Un valor de $\tau = \infty$ representa un único tamaño de poro en todo el sistema.

τ es llamado índice de distribución del tamaño de poros. Puede ser determinado mediante curvas de drenaje de presión capilar. Brooks & Corey (1964) demostraron el cumplimiento de:

$$\left(\frac{p^c}{p_{ent}} \right)^{-\tau} = S^{we}, \tag{40}$$

donde p^c es la *presión capilar* y p_{ent} es la mínima presión requerida para que la fase no mojada ingrese a la red de poros, denominada *presión entrante*.

Burdine (1953) en asociación con la *Gulf Research and Development Company*, deter-

Tabla 2. Relaciones entre el índice de distribución de tamaño de poros y las permeabilidades normalizadas.

Características del medio poroso	τ	\ddot{k}_w	\ddot{k}_n
Muy amplio rango de tamaño de poros	0,5	$(S_{we})^7$	$(1 - S_{we})^2(1 - (S_{we})^5)$
Amplio rango de tamaño de poros	2	$(S_{we})^4$	$(1 - S_{we})^2(1 - (S_{we})^2)$
Rango medio de tamaño de poros	4	$(S_{we})^{3,5}$	$(1 - S_{we})^2(1 - (S_{we})^{1,5})$
Poros de tamaños uniformes	∞	$(S_{we})^3$	$(1 - (S_{we})^3)$

Nota. Fuente: Adaptado de *Notes on relative permeability relationships* (p.12), por M. Standing, 1975.

minó las siguientes relaciones para las permeabilidades normalizadas:

$$\ddot{k}^w = \frac{k^w}{k^w|_{S_{we}=1}} = (S^{we})^2 \frac{\int_0^{S^{we}} (1/p^c)^2 dS^{we}}{\int_0^1 (1/p^c)^2 dS^{we}}, \quad (41)$$

para la fase mojada, y

$$\ddot{k}^n = \frac{k^n}{k^n|_{S_{we}=0}} = (1 - S^{we})^2 \frac{\int_{S^{we}}^1 (1/p^c)^2 dS^{we}}{\int_0^1 (1/p^c)^2 dS^{we}}. \quad (42)$$

para la fase no mojada.

En las Ecuaciones (41) y (42), las porciones que incluyen las relaciones de integrales $(1/p^c)^2 dS^{we}$ representan los cambios en el área de flujo, mientras los otros términos, $(S^{we})^2$ y $(1 - S^{we})^2$, representan los cambios en la longitud de la trayectoria de flujo. Las soluciones de estas ecuaciones pueden ser obtenidas de diversas formas. Cuando el índice de distribución de tamaño de poros, τ , es conocido, la solución es:

$$\ddot{k}^w = (S^{we})^{\frac{2+3\tau}{\tau}}, \quad (43)$$

para la fase mojada, y

$$\ddot{k}^n = (1 - S^{we})^2 \left[1 - (S^{we})^{\frac{2+\tau}{\tau}} \right]. \quad (44)$$

para la fase no mojada. En la Tabla 2 se presentan varias relaciones de permeabilidad normalizada e índice de distribución de tamaño de poros.

2.5.6 Ajuste de la permeabilidades normalizadas para la saturación residual de la fase mojada

Las relaciones presentadas para las permeabilidades normalizadas y las saturaciones efectivas de la fase mojada pueden ser utilizadas directamente para representar las permeabilidades relativas de la fase mojada como una función de la saturación efectiva. Esto es porque la base de la permeabilidad normalizada es $k^w|_{S^{we}=1}$, la cual es también la permeabilidad absoluta del medio poroso, k . Consecuentemente, la siguiente relación puede ser utilizada:

$$\underbrace{\ddot{k}^w}_{\text{Definición}} = \frac{k^w}{k^w|_{S^{we}=1}} = \frac{k^w}{k} = \underbrace{k_r^w}_{\text{Definición}}. \quad (45)$$

Por ende,

$$k_r^w = (S^{we})^{\frac{2+3\tau}{\tau}}. \quad (46)$$

Por otro lado, es necesario descontar la permeabilidad normalizada de la fase no mojada para obtener una permeabilidad relativa correspondiente. Esto se debe a que la base de la permeabilidad normalizada para la fase no mojada es $k^n|_{S^{we}=0}$, la cual es siempre menor que la permeabilidad absoluta en el medio poroso. El factor necesario para descontar es la permeabilidad efectiva de la fase no mojada a la saturación irreversible de la fase mojada, $k^n|_{S^{iw}}$. Esto puede escribirse como:

$$\underbrace{\ddot{k}^n}_{\text{Definición}} = \frac{k^n}{k^n|_{S^{we}=0}} = \frac{k^n}{k^n|_{S^{iw}}}. \quad (47)$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación por $k^n|_{S^{iw}}/k$ se obtiene:

$$\ddot{k}^n \times \frac{k^n|_{S^{iw}}}{k} = \frac{k^n}{k^n|_{S^{iw}}} \times \frac{k^n|_{S^{iw}}}{k} = \frac{k^n}{k}$$

La fracción $k^n|_{S^{iw}}/k$ representa el máximo valor que puede tomar la permeabilidad relativa de la fase no mojada, el cual se denota como k_{rmax}^n . Así se puede escribir:

$$\ddot{k}^n k_{rmax}^n = \frac{k^n}{k} = k_r^n. \quad (48)$$

Haciendo uso de la Ecuación (44) se puede escribir:

$$k_r^n = k_{rmax}^n (1 - S^{we})^2 \left[1 - (S^{we})^{\frac{2+\tau}{\tau}} \right]. \quad (49)$$

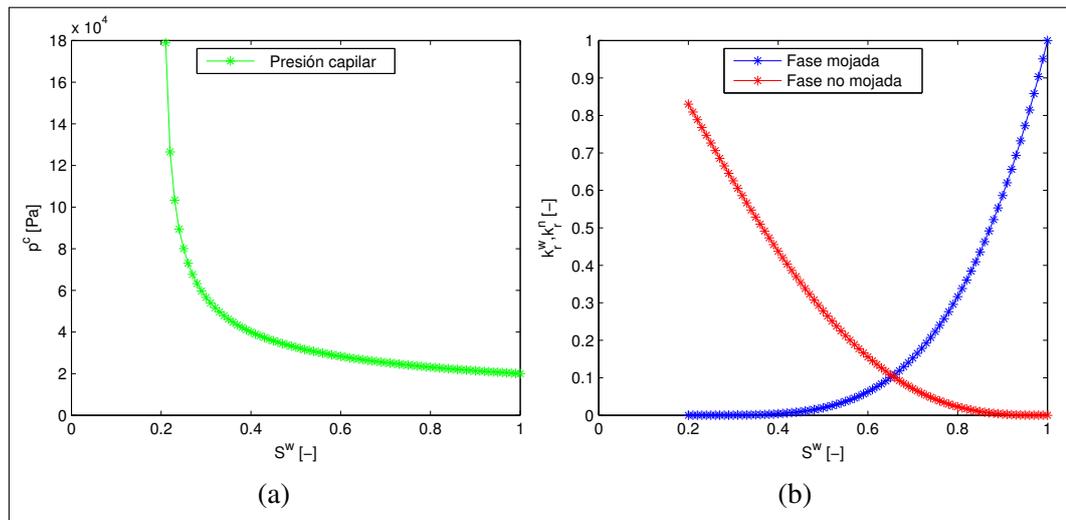


Figura 10. (a) Curva de presión capilar para $p_{ent} = 0,20$ bar, $S^{iw} = 0,20$ y $\tau = 2,0$.
 (b) Curvas de permeabilidades relativas para $S^{iw} = 0,20$ y $\tau = 2,0$.

De tal manera a hacer un uso efectivo de la Ecuación (49), es necesario relacionar de alguna manera k_{rmax}^n con S^{iw} . Es de esperarse que mientras mayor sea el valor de la saturación irreversible de la fase mojada, menor será el valor k_{rmax}^n . Esto se debe a que al aumentar el valor de S^{iw} se reducirá el área de sección transversal para la fase no mojada y se incrementará su longitud de trayectoria de flujo (Standing, 1975).

La saturación irreversible para la fase mojada S^{iw} normalmente varía entre 0,20 y 0,50. Una relación ampliamente utilizada para calcular k_{rmax}^n se obtuvo corrigiendo la permeabilidad del aire a la permeabilidad absoluta y dividiéndola entre el valor medido de $k^n|_{S^{iw}}$. Esto arroja la siguiente expresión:

$$k_{rmax}^n = 1,31 - 2,62S^{iw} + 1,1(S^{iw})^2. \quad (50)$$

Esta relación no debe utilizarse para valores de $S^{iw} > 0,5$. Para valores de $S^{iw} < 0,12$ se puede asumir $k_{rmax}^n = 1$.

Las Ecuaciones (40), (46) y (49) son atribuibles a *Brooks*, *Corey* y *Burdine*, con ellas se pueden generar las curvas para la presión capilar y permeabilidades relativas para el proceso de drenaje. En las Figuras 10a y 10b se presentan las curvas para la presión capilar y permeabilidades relativas de la fase mojada y de la fase no mojada en función de la saturación de la fase mojada, con $p_{ent} = 0,2$ bar, $S^{iw} = 0,2$ y $\tau = 2,0$.

2.5.7 Deducción de las ecuaciones gobernantes para el flujo bifásico

En este apartado se deducen las ecuaciones gobernantes para el flujo bifásico. Las ecuaciones gobernantes son combinaciones de las seis ecuaciones presentadas en la subsección 2.5.1. En la actualidad existen básicamente tres formas de resolver el sistema compuesto por las seis ecuaciones; la *formulación en presiones de fases*, la *formulación en presión de fase y saturación* y la *formulación en presión global* (Chen et al., 2006).

La formulación en presiones de fases utiliza las presiones de las fases, p^w y p^n como incógnitas principales. Este enfoque fue empleado en la *simulación simultánea* (SS) propuesta por Douglas Jr et al. (1959). Las ecuaciones en este sistema son fuertemente no lineales y acopladas, esto hace que este enfoque no sea muy atractivo.

La formulación en presión de fase y saturación utiliza la presión de una fase y la saturación de la otra como incógnitas principales (ej: p^n y S^w). Este enfoque desacopla las ecuaciones en dos, una ecuación de presión y otra de saturación. Si la ecuación de saturación se resuelve explícitamente, se puede utilizar esta información para calcular las nuevas presiones. Este algoritmo es conocido como *ImPES*, por sus siglas en inglés *Implicit Pressure Explicit Saturation* y es el que se utiliza en esta tesis, debido a que no necesita de ningún tipo de linealización y su implementación en un lenguaje de alto nivel (ej: C++, FORTRAN) es relativamente más sencillo.

La formulación en presión global trata de reducir el acoplamiento de las ecuaciones al introducir el concepto de *presión global* propuesto por Leluch (1972); Chavent & Jaffré (1986). La deducción de este método de resolución escapa al alcance de esta tesis, sin embargo, se puede recurrir a las referencias anteriormente citadas para profundizar sobre el tema.

A continuación se deducen las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos utilizando la formulación en presión de fase y saturación, es decir el algoritmo ImPES. Se empieza escribiendo las ecuaciones de conservación de masa para cada fase (Ecuación (37)) en ausencia de términos fuente y para flujo incompresible:

$$\phi \frac{\partial S^w}{\partial t} = -\nabla \cdot \underline{u}^w, \quad (51)$$

para la fase mojada y

$$\phi \frac{\partial S^n}{\partial t} = -\nabla \cdot \underline{u}^n, \quad (52)$$

para la fase no mojada. Las velocidades de Darcy para cada fase considerando un flujo

horizontal⁶ son:

$$\underline{u}^w = -\underline{k}\lambda^w\nabla p^w, \quad (53)$$

para la fase mojada y

$$\underline{u}^n = -\underline{k}\lambda^n\nabla p^n, \quad (54)$$

para la fase no mojada, donde λ^w y λ^n son las movilidades de fases definidas como:

$$\lambda^w = \frac{k_r^w}{\mu_w}, \quad (55)$$

para la fase mojada y

$$\lambda^n = \frac{k_r^n}{\mu_n}, \quad (56)$$

para la fase no mojada. La movilidad total está definida como la suma de las movilidades de cada fase:

$$\lambda^t = \lambda^w + \lambda^n. \quad (57)$$

Si se suman la ecuación de conservación de masa para la fase mojada (Ecuación (51)) y la ecuación de conservación de masa para la fase no mojada (Ecuación (52)) se obtiene:

$$\phi \frac{\partial(S^w + S^n)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\underline{u}^w + \underline{u}^n).$$

El término temporal demanda la evaluación de la derivada de una constante. Así, la ecuación de presión es equivalente a:

$$\nabla \cdot \underline{u}^t = \nabla \cdot (\underline{u}^w + \underline{u}^n) = 0. \quad (58)$$

Sin embargo, para poder resolver el sistema, se debe expresar la velocidad total de Darcy en función de la presión de una de las fases. En este enfoque, se opta por expresarla en función de p^n . Combinando las Ecuaciones (35) y (53) se obtiene la expresión de la velocidad de Darcy para la fase mojada en función del gradiente de la presión de la fase no mojada y la presión capilar:

$$\underline{u}^w = -\underline{k}\lambda^w\nabla p^n + \underline{k}\lambda^w\nabla p^c. \quad (59)$$

Sumando las Ecuaciones (54) y (59) se obtiene una expresión para la velocidad total en función de la incógnita primaria p^n :

$$\underline{u}^t = -\underline{k}\lambda^t\nabla p^n + \underline{k}\lambda^w\nabla p^c. \quad (60)$$

⁶La consideración de los efectos de la gravedad para el flujo bifásico de fluidos en medios porosos escapa del alcance de esta tesis.

La ecuación de presión establece que la divergencia de la velocidad de Darcy total debe ser igual a cero, esto es:

$$\nabla \cdot \underline{u}^t = \nabla \cdot \left[-\underline{k}\lambda^t \nabla p^n + \underline{k}\lambda^w \nabla p^c \right] = 0. \quad (61)$$

Conociendo las movilidades de fase y el gradiente de presión capilar, se puede resolver la Ecuación (61) para conocer el perfil de presión de la fase no mojada.

Antes de deducir la ecuación de saturación se define el *flujo fraccional*:

$$f^\alpha = \frac{\lambda^\alpha}{\lambda^t}, \quad (62)$$

donde el superíndice α identifica a cada fase. Se parte de la Ecuación (60) y se despeja la movilidad de fase total, esto arroja:

$$\lambda^t = \frac{-(\underline{u}^t/\underline{k}) + \lambda^w \nabla p^c}{\nabla p^n},$$

elevando a la -1 y multiplicando por λ^w ambos miembros de la ecuación anterior se obtiene:

$$f^w = \frac{\lambda^w}{\lambda^t} = \frac{\lambda^w \nabla p^n}{-(\underline{u}^t/\underline{k}) + \lambda^w \nabla p^c},$$

despejando ∇p^n se puede escribir:

$$\nabla p^n = \frac{f^w [-(\underline{u}^t/\underline{k}) + \lambda^w \nabla p^c]}{\lambda^w}. \quad (63)$$

A continuación se escribe la ecuación de conservación de masa para la fase mojada:

$$\phi \frac{\partial S^w}{\partial t} = -\nabla \cdot \underline{u}^w = \nabla \cdot \left[\underline{k}\lambda^w \nabla p^n - \underline{k}\lambda^w \nabla p^c \right] \quad (64)$$

Combinando las Ecuaciones (63) y (64) se obtiene:

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial S^w}{\partial t} &= \nabla \cdot \left[\underline{k}\lambda^w \left[\frac{-f^w(\underline{u}^t/\underline{k}) + f^w \lambda^w \nabla p^c}{\lambda^w} \right] - \underline{k}\lambda^w \nabla p^c \right] \\ &= \nabla \cdot \left[-f^w \underline{u}^t + \underline{k}f^w \lambda^w \nabla p^c - \underline{k}\lambda^w \nabla p^c \right] \\ &= \nabla \cdot \left[-f^w \underline{u}^t - \underline{k}f^n \lambda^w \nabla p^c \right]. \end{aligned} \quad (65)$$

Finalmente, ordenando la Ecuación (65) se puede escribir la ecuación de saturación:

$$\phi \frac{\partial S^w}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[f^w \underline{u}^t + \underline{k}f^n \lambda^w \nabla p^c \right] \quad (66)$$

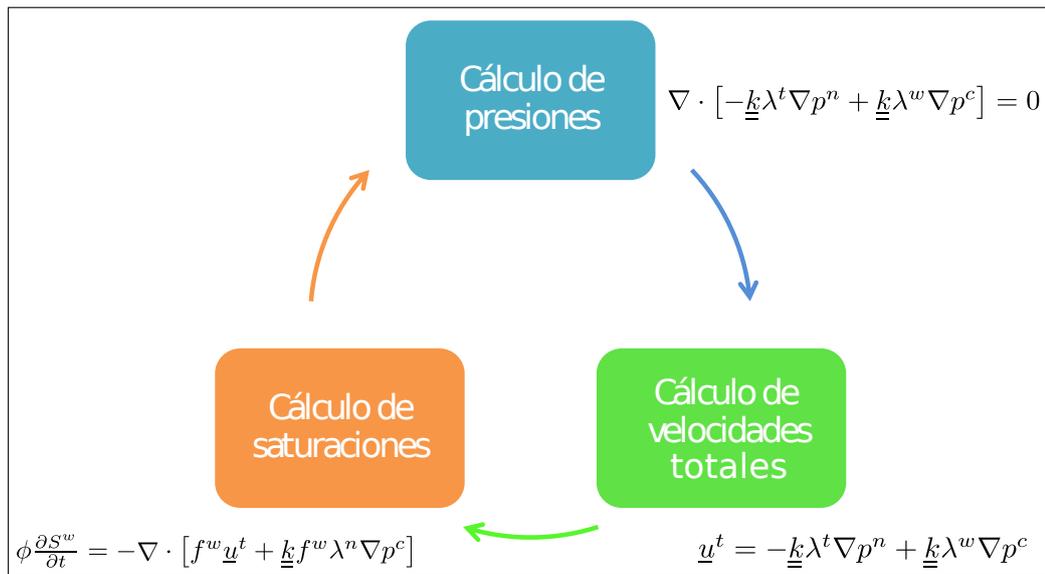


Figura 11. Representación esquemática del algoritmo IMPES

Resolviendo la Ecuación (66) se obtiene el perfil de saturación de la fase mojada. Con estos valores de saturación se pueden volver a calcular las presiones de la fase no mojada resolviendo la ecuación de presión (Ecuación (61)).

En la Figura 11 se muestra el algoritmo iterativo IMPES, y las ecuaciones que deben ser resueltas en cada etapa para resolver el sistema.

Capítulo 3

3. MÉTODOS ANALÍTICOS Y NUMÉRICOS

En este capítulo se presentan los tratamientos analíticos y numéricos de las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos en medios porosos.

3.1 Flujo monofásico

3.1.1 Método Analítico: Expansión en serie de Fourier

En este apartado se presenta la solución analítica de la ecuación de flujo subterráneo de agua en su forma unidimensional transiente. Esta solución sólo es válida cuando todos los parámetros físicos son constantes. Se parte de la ecuación de flujo subterráneo presentada en la Ecuación (33):

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla h) = 0.$$

Al expresar la Ecuación (3.1.1) en su forma unidimensional con K constante, se obtiene:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - K \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = 0. \quad (67)$$

La solución para la Ecuación (67) se deduce sencillamente empleando el método de separación de variable y luego expandiendo en serie de Fourier:

$$h(x, t) = h_L \left(1 - \frac{x}{L}\right) - \frac{2h_L}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp\left(-\frac{(K/S_s)n^2\pi^2 t}{l^2}\right) \sin\left(n\frac{\pi}{l}x\right), \quad (68)$$

donde h_L es la carga hidráulica en el extremo izquierdo del dominio. Debido a que la Ecuación (67) contiene derivadas en el espacio y en el tiempo, se deben definir tanto las condiciones de frontera como las condiciones iniciales. La presencia de una segunda

derivada en el espacio demanda que dos condiciones de frontera sean especificadas.

Los tres tipos de condiciones de frontera son:

$$h(x_i, t) = f_1(t), \quad x_i \in 0, L, \quad t \in [0, \infty); \quad (69)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} h(x_i, t) = f_2(t), \quad x_i \in 0, L, \quad t \in [0, \infty); \quad (70)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} h(x_i, t) + \alpha h(x_i, t) = f_3(t), \quad x_i \in 0, L, \quad t \in [0, \infty). \quad (71)$$

Las condiciones que pertenecen a la forma de la Ecuación (69) son llamadas de tipo uno, *Dirichlet*, o carga específica. Las condiciones que pertenecen a la forma de la Ecuación (70) son conocidas como de tipo dos, *Neumann* o flujo específico y aquellos que pertenecen a la forma de la Ecuación (71) son llamados de tipo tres, *Robbins* o de descarga específica. Una o dos de estas tres opciones deben ser aplicadas en $x = 0$ y en $x = l$ (Pinder & Celia, 2006). La derivada temporal de la Ecuación (67) requiere de una condición inicial, que toma la forma:

$$h(0, x) = f_4(x), \quad x \in [0, L], \quad (72)$$

que establece que dentro del dominio $x \in [0, L]$, en $t = 0$, la carga debe especificarse. En el Apéndice B.1.1 se presenta el código computacional escrito en lenguaje C++ para resolver el flujo monofásico utilizando la solución analítica.

3.1.2 Método Numérico: Diferencias Finitas

Existen diversos métodos que actualmente están siendo utilizados para resolver las ecuaciones de flujo subterráneo de agua, de cualquier forma, todas ellas comparten un mismo principio, el de la teoría de aproximación polinomial. Esta teoría es la base para la formulación de los métodos de diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos (Pinder & Celia, 2006).

El método de diferencias finitas relaciona derivadas continuas (como las encontradas en la Ecuación (3.1.1)) con expresiones que involucran la evaluación de funciones desconocidas en puntos discretos. La consecuencia natural de esta acción es la transformación de un problema que involucra derivadas a uno que involucra ecuaciones algebraicas (Burden & Faires, 2010).

Se ha utilizado el método de diferencias finitas para simular el flujo monofásico de fluidos en medios porosos debido a que de los tres métodos anteriormente mencionados,

es el método más fácil de aplicar. Si bien existe una corriente fiel a este método numérico, la tendencia actual es utilizar los métodos de elementos finitos, volúmenes finitos, y métodos mixtos, debido a la gran flexibilidad de creación de mallas con geometrías complejas.

A partir de la teoría de aproximación polinomial se realizan una serie de transformaciones para obtener las fórmulas correspondientes a las diferencias finitas, una deducción apropiada puede encontrarse en Burden & Faires (2010). En esta tesis sólo se presentan las fórmulas, las cuales serán aplicadas al problema unidimensional. En la Tabla 3 se provee la notación que facilita la expresión de las ecuaciones de diferencias finitas.

Tabla 3. Notación de los operadores de las fórmulas de diferencias finitas.

Operador	Símbolo	Representación
Diferencia progresiva	\triangle	$\triangle f(x_i) = f(x_{i+1} - x_i)$
Diferencia regresiva	∇	$\nabla f(x_i) = f(x_i) - f(x_{i-1})$
Diferencia central	δ	$\delta f(x_i) = f(x_{i+1/2}) - f(x_{i-1/2})$

Existen varios métodos desarrollados para resolver las ecuaciones gobernantes mediante diferencias finitas, en esta tesis, se analizan tres de ellas; el método explícito, el método implícito y el método de Crank-Nicolson. Se evalúan sus bondades y limitaciones y, más adelante se validan los resultados numéricos con la solución analítica para un medio homogéneo.

Se vuelve a presentar la ecuación diferencial parcial para un medio homogéneo de forma simplificada:

$$K \underbrace{\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}}_A = S_s \underbrace{\frac{\partial h}{\partial t}}_B \tag{73}$$

Se discretiza el término A utilizando el operador de diferencia central:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \approx \underbrace{\frac{\delta^2 h}{\Delta x^2}}_C \bigg|_k \tag{74}$$

El término C (que para el caso del método explícito está identificado con el nivel de

tiempo k) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta^2 h}{\Delta x^2} \right|_k &= \frac{\delta}{\Delta x} \left(\left. \frac{\delta h}{\Delta x} \right|_k \right) = \frac{\delta}{\Delta x} \left(\frac{h_{i+1/2}^k - h_{i-1/2}^k}{\Delta x} \right) = \frac{\delta}{\Delta x^2} (h_{i+1/2}^k) - \frac{\delta}{\Delta x^2} (h_{i-1/2}^k) \\ &= \frac{h_{i+1}^k - 2h_i^k + h_{i-1}^k}{\Delta x^2}. \end{aligned}$$

Donde el subíndice i representa a los nodos de posición y puede tomar los valores $i = 0, \dots, I$ mientras que k representa a los niveles de tiempo tomando los valores $k = 0, \dots, K$.

De esta manera se puede escribir:

$$\frac{\delta^2 h}{\delta x^2} \approx \frac{h_{i+1}^k - 2h_i^k + h_{i-1}^k}{\Delta x^2}. \quad (75)$$

El término B se discretiza mediante diferencias progresivas:

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{\Delta h}{\Delta t} \approx \frac{h_i^{k+1} - h_i^k}{\Delta t}. \quad (76)$$

Reemplazando las Ecuaciones (75) y (76) en la Ecuación (73) se obtiene:

$$h_{i+1}^k - 2h_i^k + h_{i-1}^k = \frac{S_s \Delta x^2}{K \Delta t} (h_i^{k+1} - h_i^k).$$

A fin de simplificar la escritura se utiliza la variable auxiliar $A = S_s K^{-1} \Delta x^2 \Delta t^{-1}$. Agrupando términos comunes y ordenando finalmente se obtiene:

$$h_i^{k+1} = B h_{i+1}^k + C h_i^k + B h_{i-1}^k, \quad (77)$$

donde $B = A^{-1}$ y $C = 1 - 2A^{-1}$.

Para entender la Ecuación (77) se debe analizar la molécula computacional mostrada en la Figura 12. Este sencillo esquema transmite toda la esencia del método. Imaginar que se encuentra en el nodo $i; k$, a la izquierda de este nodo se encuentra el nodo $i-1; k$ y a la derecha el nodo $i+1; k$, todos ellos se encuentran al mismo nivel de tiempo k pero a distintos niveles de posición. Arriba se encuentra el nodo $i; k+1$, que está ubicado en el mismo nivel de posición i , pero en un nivel superior de tiempo $k+1$. Es éste último nodo, el que representa la incógnita del sistema, así, conociendo los valores de los tres primeros se puede calcular el valor del nodo con posición $i; k+1$.

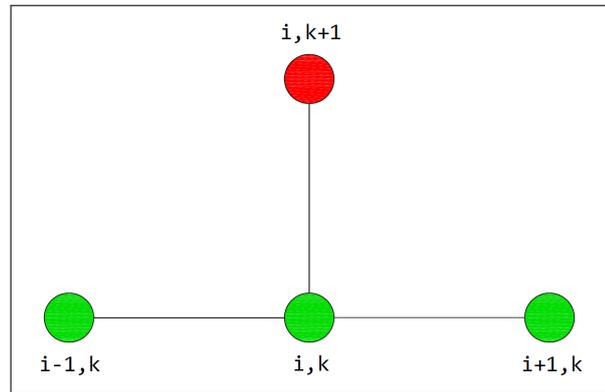


Figura 12. Molécula computacional para el método explícito.

En la Figura 13 se muestra un sistema de 10 niveles de tiempo y 7 nodos para la posición, de los cuales el primer y el último nodo corresponden a las condiciones de frontera izquierda (nodos de color naranja) y derecha (nodos de color amarillo) respectivamente. Los 5 nodos restantes son los nodos internos, cuyos valores de carga son desconocidos (nodos de color rojo). En el nivel de tiempo $k=0$ se pueden observar 5 nodos de color verde, los cuales pertenecen a las condiciones iniciales y son conocidos. Aplicando la Ecuación (77) al primer nivel de tiempo para el esquema de la Figura 13 y ordenando el sistema de ecuaciones se obtiene:

$$\begin{aligned} h_1^1 &= Bh_L + Ch_1^0 + Bh_2^0 \\ h_2^1 &= Bh_1^0 + Ch_2^0 + Bh_3^0 \\ h_3^1 &= Bh_2^0 + Ch_3^0 + Bh_4^0 \\ h_4^1 &= Bh_3^0 + Ch_4^0 + Bh_5^0 \\ h_5^1 &= Bh_4^0 + Ch_5^0 + Bh_R \end{aligned}$$

donde h_L corresponde a la condición de frontera izquierda y h_R corresponde a la condición de frontera derecha. El sistema puede expresarse en su forma matricial $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} h_1^1 \\ h_2^1 \\ h_3^1 \\ h_4^1 \\ h_5^1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} Bh_L + Ch_1^0 + Bh_2^0 \\ Bh_1^0 + Ch_2^0 + Bh_3^0 \\ Bh_2^0 + Ch_3^0 + Bh_4^0 \\ Bh_3^0 + Ch_4^0 + Bh_5^0 \\ Bh_4^0 + Ch_5^0 + Bh_R \end{Bmatrix}$$

Puede apreciarse que \mathbf{A} es la matriz identidad cuyo tamaño es equivalente al número de nodos internos. El vector de constantes \mathbf{b} está compuesto por la información proveí-

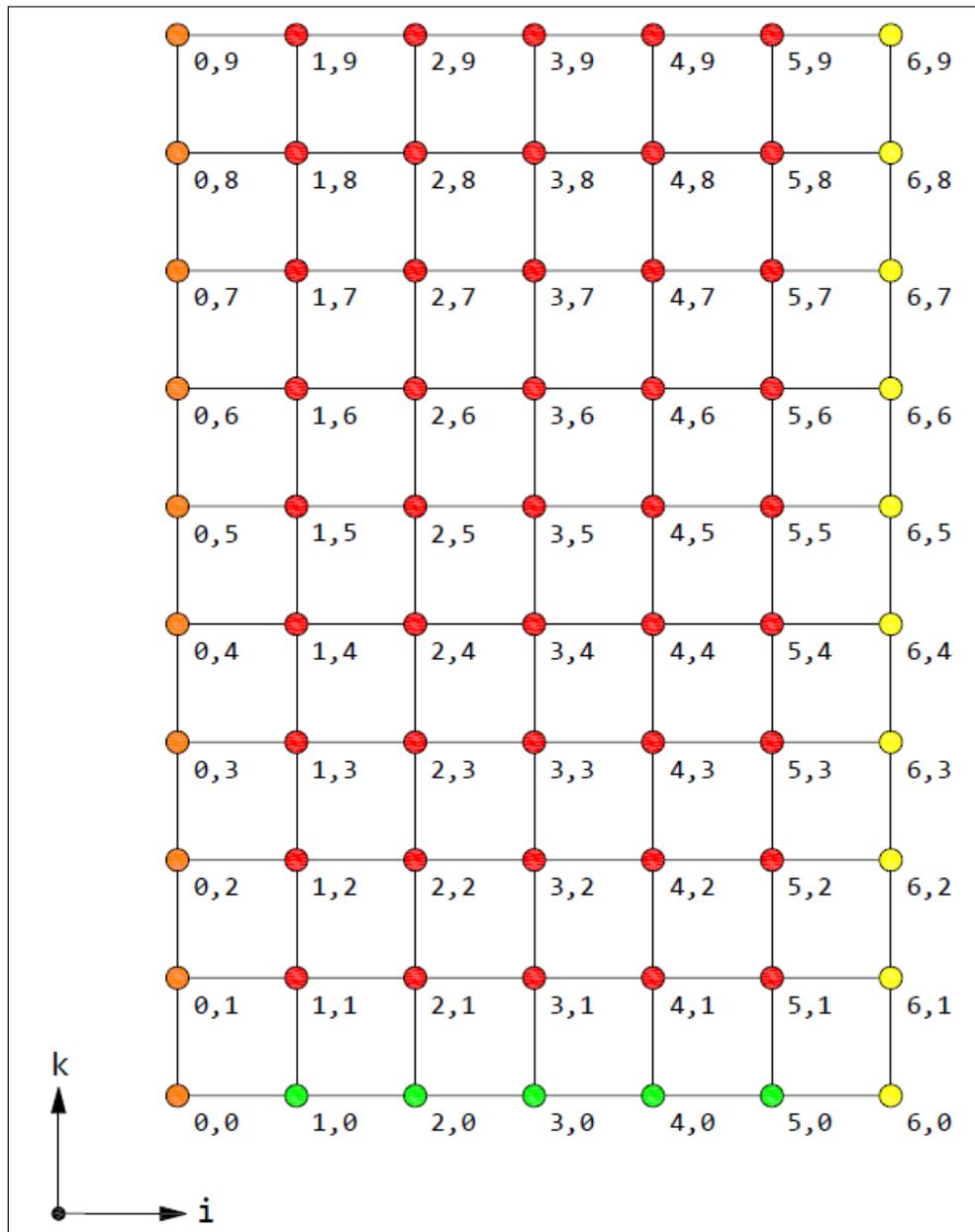


Figura 13. Esquema de diferencias finitas para el modelado de un sistema unidimensional.

da por las condiciones iniciales, las condiciones de frontera y los parámetros físicos. De esta forma, para determinar el vector de incógnitas sólo resta resolver el sistema de ecuaciones lineales. Afortunadamente, como la matriz de coeficientes es la matriz identidad, su inversa también lo es, es decir, sólo es necesario determinar el vector de constantes \mathbf{b} para conocer los valores de la carga hidráulica en el siguiente nivel de tiempo, en este caso $k=1$. Este procedimiento puede repetirse hasta llegar al último nivel de tiempo $k=K$. En el Apéndice B.1.2 se muestra el código computacional para el método explícito escrito en lenguaje C++ para un medio homogéneo.

El método explícito es muy fácil de programar y resolver, sin embargo, la estabilidad del método conlleva una restricción importante:

$$r \equiv \frac{K}{S_s} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 0,5. \quad (78)$$

Esta es una seria restricción que a menudo hace que el esquema explícito se vuelva impracticable (Pinder & Celia, 2006). Por ejemplo, si se desea mayor precisión en los resultados se debe disminuir Δx , esto implica un aumento de r , la única variable que se puede modificar para disminuir el valor de r es Δt , esto obliga a adoptar incrementos temporales muy pequeños (aún cuando existe la posibilidad de utilizar un valor mucho más grande).

A continuación se presenta el método implícito. La diferencia principal entre el método explícito y el implícito radica en la forma en la que se discretiza el término A de la Ecuación (73), que en vez de estar identificado con el nivel de tiempo k ahora lo está con el nivel $k+1$. Así, el término C de la Ecuación (74) se puede escribir como:

$$\left. \frac{\delta^2 h}{\Delta x^2} \right|_{k+1} = \frac{\delta}{\Delta x} \left(\left. \frac{\delta h}{\Delta x} \right|_{k+1} \right) = \frac{\delta}{\Delta x} \left(\frac{h_{i+1/2}^{k+1} - h_{i-1/2}^{k+1}}{\Delta x} \right) = \frac{h_{i+1}^{k+1} - 2h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}.$$

De esta forma el término espacial puede representarse como:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \approx \frac{h_{i+1}^{k+1} - 2h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}. \quad (79)$$

El término temporal es discretizado de la misma manera que en el método explícito. Reemplazando los términos espacial y temporal discretizados en la ecuación gobernante se obtiene:

$$h_{i+1}^{k+1} - 2h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1} = \frac{S_s}{K} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} (h_i^{k+1} - h_i^k).$$

Para simplificar la notación se define $A = S_s K^{-1} \Delta x^2 \Delta t^{-1}$. Agrupando y ordenando finalmente se obtiene:

$$h_{i+1}^{k+1} + B h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1} = C h_i^k, \quad (80)$$

donde $B = -A - 2$ y $C = -A$. Al inspeccionar la Ecuación (80) se puede verificar que se cuenta con tres valores desconocidos que se encuentran en el nivel $k+1$. Esto implica que para solucionar este esquema se debe contar con una serie de ecuaciones que tendrán que resolverse simultáneamente (Pinder & Celia, 2006). La molécula computacional correspondiente a este tipo de esquema se presenta en la Figura 14.

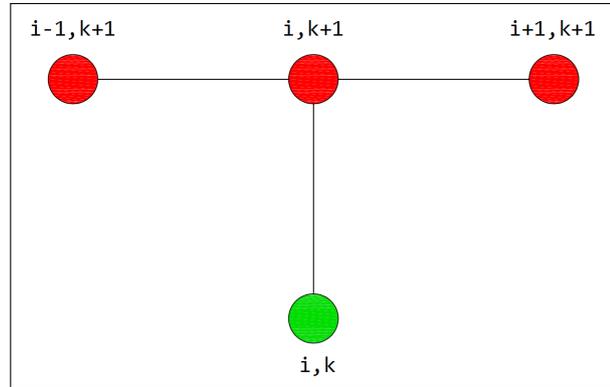


Figura 14. Molécula computacional para el esquema de diferencias finitas (método implícito) para el flujo de agua subterráneo.

La resolución del problema por el método implícito es más compleja, y requiere mayor esfuerzo para implementarla. Aplicando la Ecuación (80) al primer nivel de tiempo de la Figura 13 se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} B h_1^1 + h_2^1 &= C h_1^0 - h_L \\ h_1^1 + B h_2^1 + h_3^1 &= C h_2^0 \\ h_2^1 + B h_3^1 + h_4^1 &= C h_3^0 \\ h_3^1 + B h_4^1 + h_5^1 &= C h_4^0 \\ h_4^1 + B h_5^1 &= C h_5^0 - h_R \end{aligned}$$

Expresando el sistema de ecuaciones en forma matricial $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ se obtiene:

$$\begin{bmatrix} B & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & B & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & B & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & B & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & B \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} h_1^1 \\ h_2^1 \\ h_3^1 \\ h_4^1 \\ h_5^1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C h_1^0 - h_L \\ C h_2^0 \\ C h_3^0 \\ C h_4^0 \\ C h_5^0 - h_R \end{Bmatrix}$$

Al inspeccionar la matriz de coeficientes \mathbf{A} se pueden apreciar algunas características interesantes. Los elementos no nulos de la matriz son los elementos que conforman la diagonal principal (formada por elementos de valor B) y las diagonales secundarias superior e inferior (formadas por elementos de valor 1), a este tipo de matrices se las denomina *matrices tri-diagonales*. Como ningún elemento de la matriz depende de los términos espaciales ni temporales, es decir, no varían conforme lo hace el contador i y el contador k , sólo es necesario calcular la matriz una vez. El vector de constantes se compone de elementos de la forma Ch_i^k , sin embargo, tanto el primer como el último elemento se ven afectados por los valores de frontera. Una vez resuelto el sistema, el vector de incógnitas contendrá la información de las cargas hidráulicas del siguiente nivel de tiempo $k=1$. Evidentemente este sistema puede ser generalizado acorde a la necesidad de nodos de posición o de tiempo, no obstante, la estructura de la matriz y de los vectores será la misma. En el Apéndice B.1.3 se muestra el código computacional para el método implícito escrito en lenguaje C++.

La gran ventaja del método implícito es su incondicional estabilidad. Si bien el método implícito es aplicable bajo cualquier condición de simulación, no se ha analizado su precisión. Hay que tener en cuenta que el orden de precisión de un método está directamente relacionado con la velocidad de convergencia, es decir, *qué tan rápido* se acerca a la solución exacta. Los métodos explícito e implícito cuentan con una precisión de primer orden en el tiempo, sin embargo existen métodos con mayor precisión, como el desarrollado por Crank y Nicolson. El método de Crank-Nicolson es un promedio aritmético del método explícito y el implícito, está basado en diferencias centradas en el término espacial y en diferencias progresivas en el término temporal, dando una convergencia de segundo orden en el tiempo.

En la Tabla 4 se establecen las diferencias entre los métodos. Se puede verificar que el término temporal es el mismo para todos los esquemas, es en el término espacial donde radica la diferencia. F representa la función espacial que es discretizada utilizando diferencias centrales. Para el caso del método explícito esta función F está relacionada con el nivel de tiempo k , para el método implícito está relacionada con el nivel de

Tabla 4. Comparación entre los métodos de diferencias finitas.

Método	Término Espacial
Explícito	$F_i^k \left(h, x, t, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right)$
Implícito	$F_i^{k+1} \left(h, x, t, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right)$
Crank-Nicolson	$\frac{1}{2} \left[F_i^{k+1} \left(h, x, t, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) + F_i^k \left(h, x, t, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right]$

tiempo $k+1$, mientras que el método de Crank-Nicolson contempla ambos, es decir, se obtiene promediando los métodos explícito e implícito. Al igual que para los métodos explícito e implícito, se toma el sistema de la Figura 13 para desarrollar el método de Crank-Nicolson. Primeramente, se parte de la ecuación diferencial parcial y se aplican los operadores de diferencias finitas evaluados en los niveles de tiempo pertinentes:

$$K \underbrace{\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}}_A = S_s \underbrace{\frac{\partial h}{\partial t}}_B.$$

Se discretiza el término A utilizando el operador de diferencia central:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\delta^2 h}{\Delta x^2} \Big|_k + \frac{\delta^2 h}{\Delta x^2} \Big|_{k+1} \right] = \frac{1}{2} \left(\frac{h_{i+1}^k - 2h_i^k + h_{i-1}^k}{\Delta x^2} + \frac{h_{i+1}^{k+1} - 2h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right).$$

El término B es discretizado al igual que en los métodos anteriores. Reemplazando las aproximaciones para los términos espacial y temporal en la ecuación gobernante se obtiene:

$$h_{i+1}^k - 2h_i^k + h_{i-1}^k + h_{i+1}^{k+1} - 2h_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1} = \frac{2S_s \Delta x^2}{K \Delta t} (h_i^{k+1} - h_i^k).$$

A fin de simplificar la escritura se utiliza la variable auxiliar $A = 2S_s \Delta x^2 K^{-1} \Delta t^{-1}$. Agrupando términos comunes y ordenando se obtiene la ecuación discretizada:

$$h_{i+1}^{k+1} + Ch_i^{k+1} + h_{i-1}^{k+1} = -h_{i+1}^k - Bh_i^k - h_{i-1}^k, \quad (81)$$

donde $B = -2 + A$ y $C = -2 - A$. La molécula computacional para el método de Crank-Nicolson se muestra en la Figura 15, resulta evidente que este método precisa

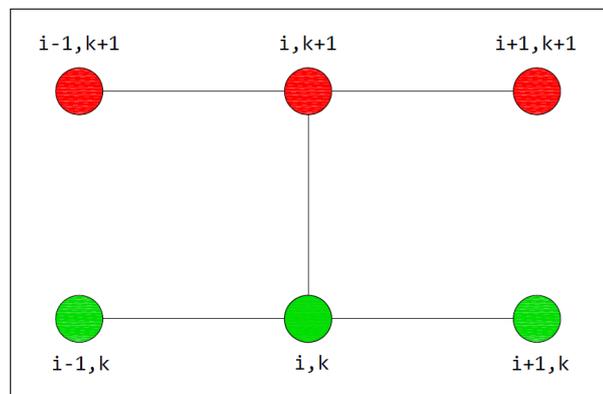


Figura 15. Molécula computacional para el Método Crank-Nicolson

de la información de los nodos $i-1$, i e $i+1$ del nivel de tiempo k , mientras que los nodos $i-1$, i e $i+1$ del nivel de tiempo $k+1$ corresponden a las incógnitas del sistema.

Aplicando la Ecuación 81 al primer nivel de tiempo de la Figura 13 se puede generar el siguiente sistema lineal de la forma $\mathbf{Ax}=\mathbf{B}$:

$$\begin{bmatrix} C & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & C & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & C & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & C & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & C \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} h_1^1 \\ h_1^2 \\ h_1^3 \\ h_1^4 \\ h_1^5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -Bh_1^0 - h_2^0 - 2h_L \\ -h_1^0 - Bh_2^0 - h_3^0 \\ -h_2^0 - Bh_3^0 - h_4^0 \\ -h_3^0 - Bh_4^0 - h_5^0 \\ -h_4^0 - Bh_5^0 - 2h_R \end{Bmatrix}$$

Las ventajas inherentes de este método son su incondicional estabilidad y su elevada exactitud, si bien, estos aspectos quedarán más claros en el capítulo siguiente donde se comparan los distintos esquemas numéricos con la solución analítica. En el Apéndice B.1.4 se presenta el código computacional para el método de Crank-Nicolson aplicado al flujo a través de un medio poroso homogéneo. Para garantizar que la aproximación numérica represente suficientemente bien el fenómeno físico a simular, a menudo, se deben validar los resultados. La validación consiste en comparar las aproximaciones obtenidas con los métodos numéricos con un resultado exacto, los resultados exactos generalmente son proveídos por las soluciones analíticas. Este procedimiento se debe realizar toda vez que se disponga de soluciones analíticas (o semi-analíticas). En el siguiente capítulo se presenta la validación de los esquemas numéricos para un medio homogéneo.

En los apartados anteriores se presentaron las ecuaciones discretizadas para tres tipos distintos de enfoques numéricos en diferencias finitas para un medio poroso homogéneo. Sin embargo, este es un escenario poco frecuente, ya que los acuíferos están formados por diversos materiales con distintas propiedades físicas, lo que ocasiona que el sistema se comporte de otra manera. Dicho esto, es necesario analizar el caso para un medio heterogéneo. Un medio heterogéneo es aquél formado por dos o más materiales, por ejemplo: arena gruesa, arena media y arena fina. Cada material posee una conductividad hidráulica distinta, lo que ocasiona que el flujo de agua se vea más o menos favorecido en determinadas zonas del sistema.

A continuación se aplica el método de Crank-Nicolson para modelar un sistema hete-

rogéneo. Se parte de la ecuación diferencial parcial para luego discretizarla:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right)}_A = S_s \underbrace{\frac{\partial h}{\partial t}}_B. \quad (82)$$

Se debe discretizar el término A evaluándolo en los niveles de tiempo k y $k+1$ y luego promediándolo aritméticamente, así:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) \approx \frac{1}{2} \left[\underbrace{\frac{\delta}{\Delta x} \left(K \frac{\delta h}{\Delta x} \right)}_C \Big|_k + \underbrace{\frac{\delta}{\Delta x} \left(K \frac{\delta h}{\Delta x} \right)}_D \Big|_{k+1} \right]. \quad (83)$$

El término C:

$$\frac{\delta}{\Delta x} \left(K \frac{\delta h}{\Delta x} \right) \Big|_k = \frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_{i+1}^k - K_{i-1/2} h_i^k) - \frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_i^k - K_{i-1/2} h_{i-1}^k).$$

El término D:

$$\frac{\delta}{\Delta x} \left(K \frac{\delta h}{\Delta x} \right) \Big|_{k+1} = \frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_{i+1}^{k+1} - K_{i-1/2} h_i^{k+1}) - \frac{1}{\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_i^{k+1} - K_{i-1/2} h_{i-1}^{k+1}).$$

Reemplazando los términos C y D en la Ecuación (83) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) &\approx \frac{1}{2\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_{i+1}^{k+1} - K_{i-1/2} h_i^{k+1} - K_{i+1/2} h_i^{k+1} + K_{i-1/2} h_{i-1}^{k+1} \\ &\quad + K_{i+1/2} h_{i+1}^k - K_{i-1/2} h_i^k - K_{i+1/2} h_i^k + K_{i-1/2} h_{i-1}^k). \end{aligned}$$

El término temporal B es el mismo que para los métodos anteriores. Reemplazando los términos espaciales y temporales en la ecuación gobernante se puede escribir:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\Delta x^2} (K_{i+1/2} h_{i+1}^{k+1} - K_{i-1/2} h_i^{k+1} - K_{i+1/2} h_i^{k+1} + K_{i-1/2} h_{i-1}^{k+1} \\ &\quad + K_{i+1/2} h_{i+1}^k - K_{i-1/2} h_i^k - K_{i+1/2} h_i^k + K_{i-1/2} h_{i-1}^k) = \frac{S_s}{\Delta t} (h_i^{k+1} - h_i^k). \end{aligned}$$

A fin de simplificar la escritura se define $A = 2S_s \Delta x^2 \Delta t^{-1}$. Ordenando y agrupando los términos comunes se puede escribir:

$$\begin{aligned} &K_{i+1/2} h_{i+1}^{k+1} + (-K_{i+1/2} - K_{i-1/2} - A) h_i^{k+1} + K_{i-1/2} h_{i-1}^{k+1} \\ &= -K_{i+1/2} h_{i+1}^k - (-K_{i+1/2} - K_{i-1/2} + A) h_i^k - K_{i-1/2} h_{i-1}^k. \end{aligned} \quad (84)$$

La Ecuación (84) representa la discretización del modelo unidimensional para un acuí-

fero saturado y heterogéneo utilizando el método de Crank-Nicolson. Para obtener la solución de esta ecuación se deben resolver simultáneamente tantas ecuaciones como nodos internos de posición posea el esquema de diferencias finitas y tantas veces como niveles de tiempo sean necesarios para alcanzar el tiempo de simulación. El código computacional se muestra en el Anexo B.1.5.

En la Ecuación (84) aparecen los términos $K_{i+1/2}$ y $K_{i-1/2}$, para calcularlos se debe aplicar alguna especie de promedio. Una alternativa es calcular el promedio aritmético entre dos valores discretos de K , así, por ejemplo $K_{i+1/2} = 0,5(K_i + K_{i+1})$. Sin embargo, Freeze & Cherry (1977) recomiendan utilizar el promedio armónico, definido como:

$$K_{i+1/2} = \frac{d_i + d_{i+1}}{\frac{1}{K_i} + \frac{1}{K_{i+1}}}. \quad (85)$$

donde d_i y d_{i+1} son las longitudes de las capas de material a promediar. En el caso particular en el que $d_i = d_{i+1}$, el numerador del término del lado derecho de la Ecuación (85) será $2\Delta x$. En el Apéndice B.1.5 se provee el código computacional para el modelo heterogéneo.

3.2 Flujo bifásico

3.2.1 Método Analítico: El modelo de Buckley-Leverett

Buckley & Leverett (1942) en su artículo *Mechanism of Fluid Displacement in Sands* presentaron un modelo analítico que permite analizar el desplazamiento de fluidos bifásicos en un medio poroso. Las hipótesis físicas para que el modelo sea válido se exponen a continuación:

1. El modelo es válido tanto para los procesos de drenaje como de imbibición, sin embargo, existe un tratamiento diferenciado para cada proceso y como se mencionó anteriormente se deben utilizar las curvas de permeabilidades relativas adecuadas para cada caso.
2. No existen fuentes ni sumideros en el sistema.
3. El flujo es incompresible, por lo tanto, el caudal total (NAPL + Agua) es equivalente al caudal de NAPL que ingresa al sistema.
4. El flujo es netamente horizontal (los efectos gravitatorios son nulos).

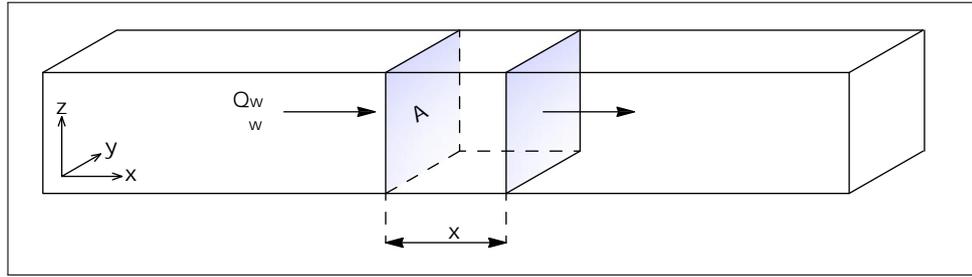


Figura 16. Volumen de control propuesto para la derivación de la ecuación de Buckley-Leverett.

Fuente: Adaptado de *Handout note 4: Buckley-Leverett analysis* (p.2), por J. Kleppe, 2003.

5. El medio poroso es homogéneo. La porosidad y la permeabilidad son constantes. En la práctica todos los acuíferos están compuestos por materiales heterogéneos, por lo tanto, lo recomendado es calcular un promedio aritmético de la porosidad y un promedio geométrico de las permeabilidades.
6. El gradiente de presión capilar es despreciado en la dirección de flujo.

Se inicia la derivación de la ecuación de Buckley-Leverett (BL) con la aplicación de un balance de masa de agua alrededor de un volumen de control Δx como lo sugiere la Figura 16 para un periodo de tiempo Δt . El balance de masa puede ser escrito de la siguiente manera:

$$[(Q^w \rho^w)|_x - (Q^w \rho^w)|_{x+\Delta x}] \Delta t = A\phi \left[(S^w \rho^w)^{t+\Delta t} - (S^w \rho^w)^t \right] \Delta x. \quad (86)$$

Cuando $\Delta x \rightarrow 0$ y $\Delta t \rightarrow 0$, se obtiene la ecuación de continuidad en su forma diferencial:

$$-\frac{\partial}{\partial x} (Q^w \rho^w) = A\phi \frac{\partial}{\partial t} (S^w \rho^w). \quad (87)$$

Para que el modelo de Buckley-Leverett sea válido se necesita considerar el flujo incompresible, esto es:

$$-\frac{\partial Q^w}{\partial x} = A\phi \frac{\partial S^w}{\partial t}. \quad (88)$$

Considerando que $f^w = Q^w/Q^t$, se puede escribir:

$$-\frac{\partial f^w}{\partial x} = \frac{A\phi}{Q^t} \frac{\partial S^w}{\partial t}. \quad (89)$$

Como $f^w(S^w)$ podemos hacer uso de la regla de la cadena para expresar la ecuación de arriba como:

$$-\frac{df^w}{dS^w} \frac{\partial S^w}{\partial x} = \frac{A\phi}{Q^t} \frac{\partial S^w}{\partial t}. \quad (90)$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de Buckley-Leverett. En la Figura se

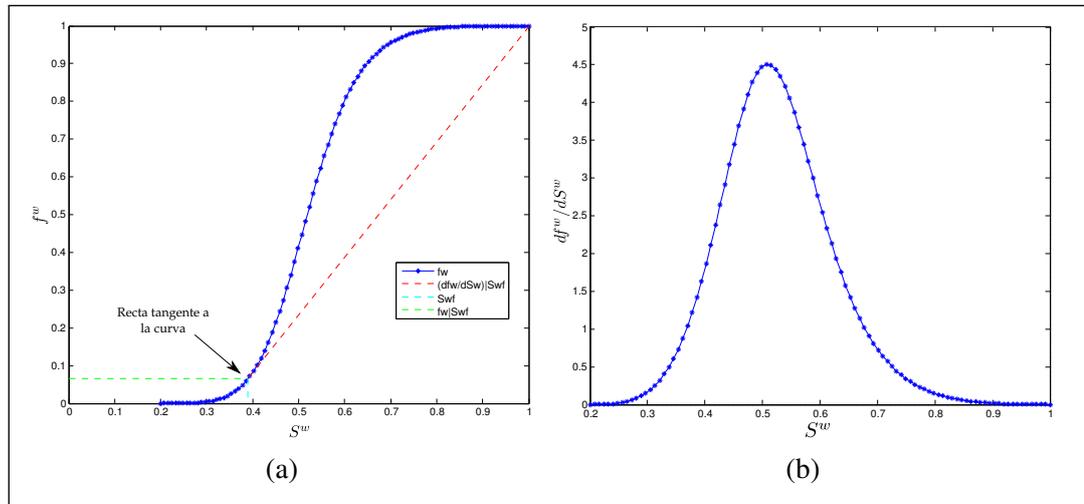


Figura 17. (a) Flujo fraccional como función de la saturación. (b) Derivada del flujo fraccional con respecto a la saturación.

muestran las curvas del flujo fraccional y de su derivada con respecto a la saturación 18.

Debido a que $S^w(x, t)$ se puede escribir la siguiente expresión:

$$dS^w = \frac{\partial S^w}{\partial x} dx + \frac{\partial S^w}{\partial t} dt.$$

En la solución de Buckley-Leverett “se sigue” a un fluido con un frente de saturación constante durante el proceso de desplazamiento (Kleppe, 2003). Entonces:

$$0 = \frac{\partial S^w}{\partial x} dx + \frac{\partial S^w}{\partial t} dt. \tag{91}$$

Combinando las Ecuaciones (90) y (91):

$$\frac{dx}{dt} = \frac{Q^t}{A\phi} \frac{df^w}{dS^w}. \tag{92}$$

La ecuación de arriba establece que la velocidad de un plano de saturación de agua constante es proporcional a la derivada del flujo fraccional evaluada a esa saturación (Buckley & Leverett, 1942). Integrando entre el tiempo inicial de desplazamiento del agua y un tiempo cualquiera, se puede encontrar el punto alcanzado por el plano de saturación constante de agua,

$$\int_0^t \frac{dx}{dt} dt = \frac{1}{A\phi} \frac{df^w}{dS^w} \int_0^t Q^t \cdot dt. \tag{93}$$

Resolviendo las integrales:

$$x = \frac{Q^t t}{A\phi} \frac{df^w}{dS^w}. \quad (94)$$

Por conveniencia, se introducen las siguientes variables adimensionales $x_D = x/L$ y $t_D = (Q^t t)/(AL\phi)$, donde x_D es la posición adimensional y L es la longitud del sistema, por otro lado t_D es el tiempo adimensional. Haciendo uso de estas variables adimensionales la Ecuación (94) se puede escribir como:

$$x_D = t_D \frac{df^w}{dS^w}. \quad (95)$$

Para hacer uso de la Ecuación (95) primero se debe calcular la derivada del flujo fraccional con respecto a la saturación de agua. La solución que se muestra en la Figura 18a presenta más de un valor de S^w para una misma distancia x_D . Esto es imposible desde un punto de vista físico y proviene de haber despreciado los efectos de la presión capilar. Buckley y Leverett dedujeron que los planos de saturación intermedios tienen mayor velocidad que los planos de saturación pequeños o mayores, entonces los alcanzan y se forma una discontinuidad o frente de choque en la curva $S^w(x)$. La saturación correspondiente al frente de choque se denomina S^{wf} . Este valor se encuentra balanceando las áreas por delante y por detrás del frente de choque. Aquí surge una diferencia bastante importante entre los procesos de drenaje e imbibición; para el proceso de drenaje, el rango utilizable de la curva va desde la saturación en el frente S^{wf} hasta el valor residual S^{iw} , sin embargo para el proceso de imbibición el rango utilizable va desde $1 - S^{or}$ hasta S^{wf} . En la Figura 18b se muestra el perfil de saturación final considerando la discontinuidad en la curva $S^w(x)$. Para determinar la saturación

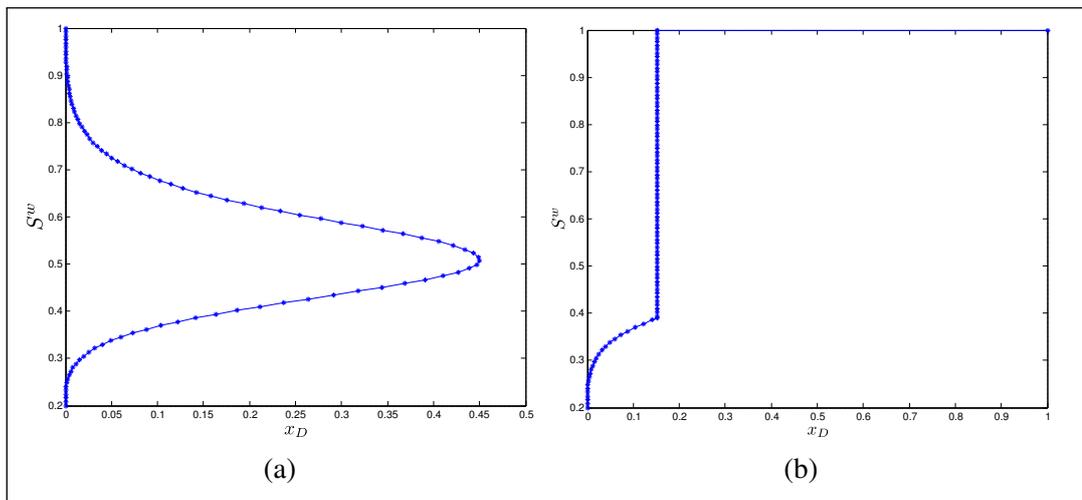


Figura 18. (a) Distribución de la saturación de agua en función de la distancia adimensional para $t_D = 0,1$. (b) Perfil de saturación final del agua para $t_D = 0,1$.

en el frente S^{wf} para el proceso de drenaje se debe trazar una recta tangente a la curva f^w vs S^w desde la saturación inicial de agua $S^w = 1$ (véase Figura 17a). En el Apéndice B.2.1 se provee el código computacional para el modelo de Buckley-Leverett.

3.2.2 Método numérico: Volúmenes Finitos (Algoritmo ImpES)

En este apartado se presenta la discretización de las ecuaciones del algoritmo ImpES. Recordar que existe una ecuación de presión, la cual está en función del gradiente de presión de la fase no mojada y una ecuación de saturación que se evalúa explícitamente para obtener los valores de saturación de la fase mojada de tal manera a volver a calcular las presiones.

A continuación se detallan las consideraciones sobre el sistema.

1. Flujo incompresible y medio rígido.
2. Flujo horizontal (los efectos de la gravedad no han sido considerados).
3. Medio homogéneo/heterogéneo.
4. Los efectos de la presión capilar son considerados.
5. Fluidos inmiscibles (se descarta la posibilidad de transferencia o reacción en la interfase).
6. No se consideran términos fuente.

Niño (2002) establece que:

El método de volúmenes finitos permite discretizar numéricamente ecuaciones diferenciales. Es un método alternativo a los de diferencias finitas y elementos finitos. Se considera una malla de discretización de espacio fluido. En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se traslapa con los de los puntos vecinos. De esta forma el volumen total de fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. La ecuación diferencial a resolver se integra sobre cada volumen, lo cual requiere especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla, de modo a poder evaluar las integrales resultantes. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante, es que la solución obtenida satisface en forma exacta las ecuaciones de conservación consideradas, independientemente del tamaño de la malla.

Se ha elegido el método de volúmenes finitos para discretizar las ecuaciones gobernantes ya que se garantiza la conservación de la masa por la naturaleza misma del método. Además, al trabajar con flujos, es más fácil adoptar condiciones de Neumann

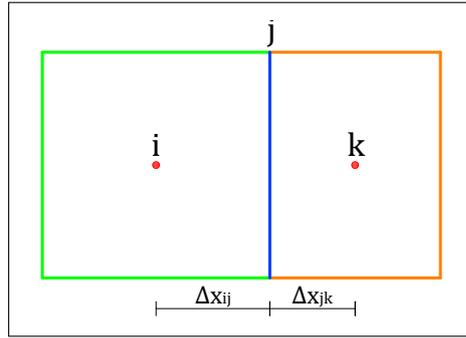


Figura 19. Celdas adyacentes, con centros en i y k , compartiendo la cara j .

y mixtas, que son necesarias para la evaluación de casos de estudio como los que se van a presentar en el capítulo siguiente. Por último, si se planea extender el problema unidimensional a más dimensiones resultará más sencillo hacerlo con el método de volúmenes finitos que con el método de diferencias finitas, ya que los flujos se discretizan en cada cara de la celda (como se verá a continuación), y el esquema es prácticamente el mismo.

Como se mencionó anteriormente, es necesario especificar un perfil de variación para evaluar las presiones, lo más sencillo es utilizar un perfil lineal, esta técnica se conoce como TPFA (por sus siglas en inglés *Two points flux approximation*), de esta forma se pueden aproximar los gradientes de las presiones de la fase no mojada y de la presión capilar (F. Doster, 2013):

$$\tilde{\nabla}\chi \approx \frac{\chi_k - \chi_i}{\Delta x_{jk} + \Delta x_{ij}}, \quad (96)$$

donde χ puede ser cualquier escalar, en este caso se aplicará para p^n y p^c .

La ecuación de presión se discretiza a continuación. Tal y como se había mencionado, se debe integrar la ecuación gobernante en todo el dominio de volumen Ω_i , aplicando el Teorema de *Gauss* se puede convertir una integral volumétrica en una superficial, multiplicando la velocidad total de Darcy \underline{u}^t por el vector normal \underline{n}_A a la superficie total de la celda dA e integrándola sobre la superficie total $\partial\Omega_i$ de la celda i . Generalmente, integrar por sobre la superficie total de la celda es poco práctico, por ello se recurre a dividir el área total de la celda en las áreas que componen sus caras. Así, en vez de integrar sobre la superficie total, se integra sobre cada una de las caras j en la superficie interfacial $\partial\Omega_{ij}$, multiplicando la velocidad total por el vector normal \underline{n}_{ij} a cada cara.

$$\int_{\Omega_i} \nabla \cdot \underline{u}^t dV = \int_{\partial\Omega_i} \underline{u}^t \cdot \underline{n}_A dA = \sum_j \int_{\partial\Omega_{ij}} \underline{u}^t \cdot \underline{n}_{ij} dA = 0. \quad (97)$$

Ahora se aproximan los flujos de entrada y salida de la celda i , a través de las caras ij .

$$\sum_j \int_{\partial\Omega_{ij}} \underline{u}^t \cdot \underline{n}_{ij} dA \approx - \sum_j A_j \hat{k}_j \left[\hat{\lambda}_j^{t,g} \tilde{\nabla}_{ijk} p^{n,g+1} - \hat{\lambda}_j^{w,g} \tilde{\nabla}_{ijk} p^{c,g} \right],$$

donde:

$$\hat{\chi}_j = \frac{\Delta x_{jk} + \Delta x_{ij}}{\frac{1}{\chi_i} + \frac{1}{\chi_k}},$$

es el promedio armónico de la cantidad χ obtenido a partir de sus valores en las celdas i y k . Se identifica con g al índice de tiempo para la ecuación de presión, y h al índice de tiempo para la ecuación de saturación. Estos, no necesariamente deben ser iguales. Así, se podría resolver la ecuación de presión con menos frecuencia que la de saturación. A esto enfoque se lo denomina ImpES mejorado, sin embargo, en esta tesis se adopta la misma frecuencia de resolución para ambas ecuaciones. Notar que para el flujo unidimensional, una celda (volumen) se convierte en una longitud, y el área es igual a 1. Por ende, se deben aproximar los flujos en dos caras, la izquierda (que es donde ingresa el flujo) y a la derecha (que es por donde sale el flujo).

La misma metodología aplicada para la ecuación de presión puede ser aplicada para la ecuación de saturación. A diferencia de la ecuación de presión, la de saturación sí cuenta con un término acumulativo. Se aproxima la derivada temporal de la saturación de la fase mojada mediante una diferencia finita del valor medio de la celda:

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial S^w}{\partial t} dV \approx V_i \frac{S_i^{w,h+1} - S_i^{w,h}}{\Delta t^h},$$

donde V_i será simplemente Δx . Los flujos deben ser aproximados explícitamente en el tiempo:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} \nabla \cdot (f^w \underline{u}^t + \underline{k} f^w \underline{\lambda}^n \nabla p^c) dV &= \sum_j \int_{\Omega_{ij}} (f^w \underline{u}^t + \underline{k} f^w \underline{\lambda}^n \nabla p^c) \cdot \underline{n}_{ij} dA \\ &\approx \sum_j A_j \left(\check{f}^{w,h} \underline{u}_j^{t,g+1} + \hat{k}_j \bar{f}^{w,h} \bar{\lambda}^{n,h} \tilde{\nabla}_{ijk} p^{c,h} \right). \end{aligned}$$

Los términos denotados con “ $\check{\sim}$ ” son cantidades ponderadas aguas arriba o *upstream weighting*. Para ponderar las movilidades de fase corriente arriba se deben conocer los valores de presión (de dicha fase) en las celdas que comparten la cara cuya movilidad se desea evaluar. Se supone que se quiere evaluar la movilidad de la fase mojada corriente arriba en la cara j , dicha cara es compartida por las celdas i a la izquierda y k a la

derecha. Así, si $p_i^w \geq p_j^w$, $\check{\lambda}_j^w = \lambda_i^w$, en caso contrario $\check{\lambda}_j^w = \lambda_k^w$. Análogamente pueden calcularse las movilidades de la fase no mojada. El flujo fraccional para la fase mojada ponderada corriente arriba es simplemente el calculado a partir de las movilidades de fase ponderadas corriente arriba.

Los términos denotados con “-”son cantidades promediadas aritméticamente. Así $\bar{\chi}_j = 0,5(\chi_i + \chi_k)$. F. Doster (2013) recomienda promediar aritméticamente los términos que multiplican el gradiente de presión capilar para reducir las no-linealidades. A continuación se aplica el algoritmo ImpES a un pequeño sistema de cinco celdas. Por simplicidad se consideran celdas de la misma longitud, sin embargo, tal como se comentó anteriormente el método de volúmenes finitos es flexible a adoptar celdas de distintos tamaños. Es buen momento de hablar de las condiciones de frontera e inicia-

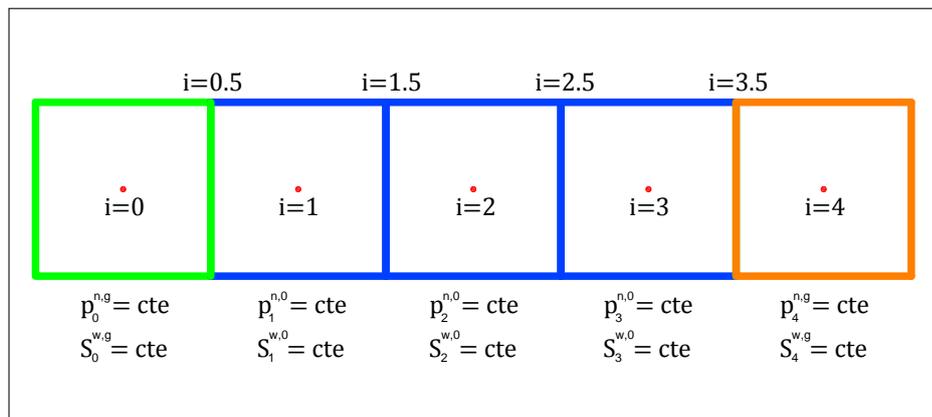


Figura 20. Sistema de 5 celdas de igual tamaño, incluyendo el fantasma izquierdo (verde) y el fantasma derecho (naranja).

les. Como las ecuaciones son de segundo orden en el espacio y de primer orden en el tiempo (tanto para la presión como para la saturación), es necesario proveer dos condiciones de frontera⁷ y una condición inicial. En la Figura 20 se pueden apreciar las condiciones necesarias.

Se empieza planteando la ecuación de presión. Las expresiones para las velocidades

⁷Estas pueden ser de tres tipos, *Dirichlet*, *Neumann* o *mixtas*. Para este ejemplo se utiliza la condición de *Dirichlet*.

de Darcy son las siguientes:

$$u_{0,5}^{t,g+1} = -\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{t,g}\frac{p_1^{n,g+1} - p_0^{n,g+1}}{\Delta x} + \hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{w,g}\frac{p_1^{c,g} - p_0^{c,g}}{\Delta x} \quad (98)$$

$$u_{1,5}^{t,g+1} = -\hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g}\frac{p_2^{n,g+1} - p_1^{n,g+1}}{\Delta x} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g}\frac{p_2^{c,g} - p_1^{c,g}}{\Delta x} \quad (99)$$

$$u_{2,5}^{t,g+1} = -\hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g}\frac{p_3^{n,g+1} - p_2^{n,g+1}}{\Delta x} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g}\frac{p_3^{c,g} - p_2^{c,g}}{\Delta x} \quad (100)$$

$$u_{3,5}^{t,g+1} = -\hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{t,g}\frac{p_4^{n,g+1} - p_3^{n,g+1}}{\Delta x} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{w,g}\frac{p_4^{c,g} - p_3^{c,g}}{\Delta x} \quad (101)$$

Se aplica la ecuación de presión discreta en las celdas internas 1, 2 y 3.⁸

$$u_{0,5}^{t,g+1} - u_{1,5}^{t,g+1} = 0 \quad (102)$$

$$u_{1,5}^{t,g+1} - u_{2,5}^{t,g+1} = 0 \quad (103)$$

$$u_{2,5}^{t,g+1} - u_{3,5}^{t,g+1} = 0. \quad (104)$$

Como Δx aparece en todos los términos se puede omitir en los cálculos siguientes. Reemplazando la Ecuaciones (98) y (99) en la Ecuación (102), las Ecuaciones (99) y (100) en la Ecuación (103) y las Ecuaciones (100) y (101) en la Ecuación (104) y ordenando, se cuenta con tres ecuaciones que permiten construir el sistema lineal:

$$\begin{aligned} & \hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{t,g}p_0^n - (\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{t,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g})p_1^{n,g+1} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g}p_2^{n,g+1} = \\ & \hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{w,g}p_0^{c,g} - (\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{w,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g})p_1^{c,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g}p_2^{c,g} \\ & \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g}p_1^{n,g+1} - (\hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g})p_2^{n,g+1} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g}p_3^{n,g+1} = \\ & \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g}p_1^{c,g} - (\hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g})p_2^{c,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g}p_3^{c,g} \\ & \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g}p_2^{n,g+1} - (\hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{t,g})p_3^{n,g+1} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{t,g}p_4^n = \\ & \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g}p_2^{c,g} - (\hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{w,g})p_3^{c,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{w,g}p_4^{c,g} \end{aligned}$$

La matriz de coeficientes:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -(\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{t,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g}) & \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g} & 0 \\ \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g} & -(\hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{t,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g}) & \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g} \\ 0 & \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g} & -(\hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{t,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{t,g}) \end{bmatrix}$$

⁸Por convención, se consideran los flujos entrantes como **negativos** y los flujos salientes como **positivos**.

El vector de constantes:

$$\mathbf{b} = \left\{ \begin{array}{l} -\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{t,g}p_0^n + \hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{w,g}p_0^{c,g} - (\hat{k}_{0,5}\hat{\lambda}_{0,5}^{w,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g})p_1^{c,g} + \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g}p_2^{c,g} \\ \hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g}p_1^{c,g} - (\hat{k}_{1,5}\hat{\lambda}_{1,5}^{w,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g})p_2^{c,g} + \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g}p_3^{c,g} \\ \hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g}p_2^{c,g} - (\hat{k}_{2,5}\hat{\lambda}_{2,5}^{w,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{w,g})p_3^{c,g} + \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{w,g}p_4^{c,g} - \hat{k}_{3,5}\hat{\lambda}_{3,5}^{t,g}p_4^n \end{array} \right\}$$

El vector de variables:

$$\mathbf{x} = \left\{ \begin{array}{l} p_1^{n,g+1} \\ p_2^{n,g+1} \\ p_3^{n,g+1} \end{array} \right\}$$

Resolviendo el sistema lineal $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ se pueden conocer los valores de presión para la fase no mojada de las celdas internas 1,2 y 3.

Las velocidades totales de Darcy ahora pueden ser calculadas con los valores de presión de fase no mojada del nivel de tiempo $g+1$. Una vez calculadas las velocidades de Darcy se pueden conocer las saturaciones de la fase mojada haciendo uso de la ecuación de saturación:

$$S_1^{w,h+1} = \frac{\Delta t}{\phi\Delta x} \left[\check{f}_{0,5}^{w,h}u_{0,5}^{t,g+1} - \check{f}_{1,5}^{w,h}u_{1,5}^{t,g+1} - \frac{\hat{k}_{0,5}}{\Delta x}\bar{f}_{0,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{0,5}^{n,h}p_0^{c,h} + \frac{1}{\Delta x} \left(\hat{k}_{0,5}\bar{f}_{0,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{0,5}^{n,h} \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{k}_{1,5}\bar{f}_{1,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{1,5}^{n,h} \right) p_1^{c,h} - \frac{\hat{k}_{1,5}}{\Delta x}\bar{f}_{1,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{1,5}^{n,h}p_2^{c,h} \right] + S_1^{w,h}$$

$$S_2^{w,h+1} = \frac{\Delta t}{\phi\Delta x} \left[\check{f}_{1,5}^{w,h}u_{1,5}^{t,g+1} - \check{f}_{2,5}^{w,h}u_{2,5}^{t,g+1} - \frac{\hat{k}_{1,5}}{\Delta x}\bar{f}_{1,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{1,5}^{n,h}p_1^{c,h} + \frac{1}{\Delta x} \left(\hat{k}_{1,5}\bar{f}_{1,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{1,5}^{n,h} \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{k}_{2,5}\bar{f}_{2,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{2,5}^{n,h} \right) p_2^{c,h} - \frac{\hat{k}_{2,5}}{\Delta x}\bar{f}_{2,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{2,5}^{n,h}p_3^{c,h} \right] + S_2^{w,h}$$

$$S_3^{w,h+1} = \frac{\Delta t}{\phi\Delta x} \left[\check{f}_{2,5}^{w,h}u_{2,5}^{t,g+1} - \check{f}_{3,5}^{w,h}u_{3,5}^{t,g+1} - \frac{\hat{k}_{2,5}}{\Delta x}\bar{f}_{2,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{2,5}^{n,h}p_1^{c,h} + \frac{1}{\Delta x} \left(\hat{k}_{2,5}\bar{f}_{2,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{2,5}^{n,h} \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{k}_{3,5}\bar{f}_{3,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{3,5}^{n,h} \right) p_3^{c,h} - \frac{\hat{k}_{3,5}}{\Delta x}\bar{f}_{3,5}^{w,h}\bar{\lambda}_{3,5}^{n,h}p_4^{c,h} \right] + S_3^{w,h}$$

Resolviendo estas tres ecuaciones se pueden conocer los valores para S_1^w , S_2^w y S_3^w para el nuevo nivel de tiempo $h+1$. Con esta información se vuelven a calcular las movilidades de fases y las presiones capilares, que son los parámetros físicos dependientes de la saturación. Al tener estos parámetros actualizados se vuelve a resolver el sistema de ecuaciones para la ecuación de presión, y así sucesivamente hasta llegar

al tiempo de simulación deseado. Es importante tener en cuenta que como las saturaciones se calculan explícitamente se deben utilizar pasos temporales pequeños a fin de garantizar la estabilidad del método. F. Doster (2013) provee una expresión para determinar la condición de estabilidad de la ecuación de saturación. Si bien este ejemplo fue aplicado a un sistema de sólo cinco celdas (incluyendo dos celdas fantasmas⁹), se puede generalizar sin mayores problemas a n celdas. En el Apéndice B.2.2 se muestra el código para el algoritmo ImpES escrito en lenguaje C++.

⁹Las celdas fantasmas son celdas imaginarias que se utilizan para definir los límites del sistema.

Capítulo 4

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Flujo monofásico

En esta sección se presentan casos de estudio referentes al flujo monofásico de un fluido a través de un medio poroso. En el primer caso de estudio se validan los resultados numéricos obtenidos mediante los distintos esquemas de diferencias finitas con la solución analítica, en el segundo caso de estudio se realiza un análisis de sensibilidad para evaluar la incidencia de los parámetros físicos (conductividad hidráulica, almacenaje específico y longitud del dominio) en el tiempo de establecimiento del sistema y por último, en el tercer caso de estudio se comparan los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos.

4.1.1 Caso de estudio #1: Validación de los esquemas numéricos con la solución analítica para medios homogéneos

El sistema para validar las soluciones numéricas consiste en una región de acuífero de 1 *km* de longitud, inicialmente el valor de carga hidráulica es de 0 m en toda su extensión, luego se induce una perturbación que consiste en una diferencia de carga hidráulica en los extremos del acuífero, a la izquierda $h_l = 100$ m y a la derecha $h_r = 0$ m, esto posibilita un flujo de izquierda a derecha, el perfil de carga hidráulica evolucionará en el tiempo hasta llegar al estado estacionario, donde se volverá independiente del mismo.

En la Figura 21 se presentan los resultados para la validación de los esquemas numéricos, las condiciones de simulación corresponden a las presentadas en la Tabla 5. Como puede observarse, los resultados obtenidos para el esquema explícito se alejan de la solución analítica. Esto se debe a que, a más de estar sujetos al criterio de estabilidad cuentan con una convergencia de primer orden en el tiempo. Por otro lado, los

Tabla 5. Datos para la validación de esquemas numéricos para flujo monofásico.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud del sistema	L	1000	m
Paso espacial	Δx	76,92	m
Tiempo de simulación	t_{sim}	14	h
Paso temporal	Δt	1000	s
Conductividad hidráulica	K	$1 \cdot 10^{-4}$	m/s
Almacenaje específico	S_s	$9,95 \cdot 10^{-5}$	m^{-1}
Condición de frontera izquierda	$h(l, t)$	100	m
Condición de frontera derecha	$h(r, t)$	0	m
Condición inicial	$h(x, 0)$	0	m

resultados del esquema implícito son más alentadores, el método implícito es incondicionalmente estable al paso temporal, sin embargo, al igual que el método explícito, posee una convergencia de primer orden en el tiempo. El método de Crank-Nicolson es una combinación de ambos, dando una convergencia de segundo orden en el tiempo, en la figura se puede apreciar que el perfil de carga prácticamente coincide con el de la solución analítica.

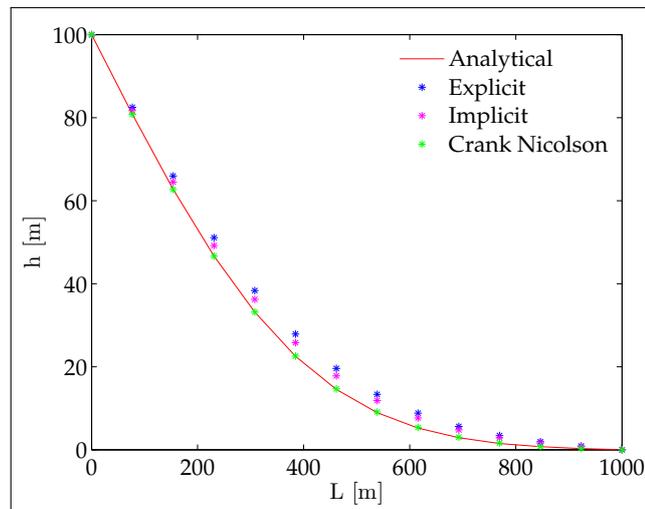


Figura 21. Comparación entre los esquemas numéricos y la solución analítica para las condiciones de simulación de la Tabla 5.

4.1.2 Caso de estudio #2: Análisis de la incidencia de los parámetros físicos del sistema en el tiempo de establecimiento del sistema

El tiempo de establecimiento t_L , es el tiempo necesario para que un sistema alcance el estado estacionario a partir de una perturbación inicial inducida. Esto es, la carga

hidráulica se vuelve independiente del tiempo, $h = h(x)$.

En este análisis se evalúa cómo la conductividad hidráulica, el almacenaje específico y la longitud del sistema influyen en el tiempo de establecimiento. En la Figura 22 se muestra la relación que existe entre el tiempo de establecimiento t_L y la conductividad hidráulica K para un valor de almacenaje específico $S_s = 1 \cdot 10^{-5} m^{-1}$ y una longitud del sistema $L = 1 m$.

Como sugiere la gráfica, existe una relación lineal inversa entre el tiempo estacionario y la conductividad hidráulica, lo cual es lógico, cuando un medio es más conductivo, ofrece menos resistencia a la transmisión de la carga hidráulica y el sistema alcanza más rápido el estado estacionario.

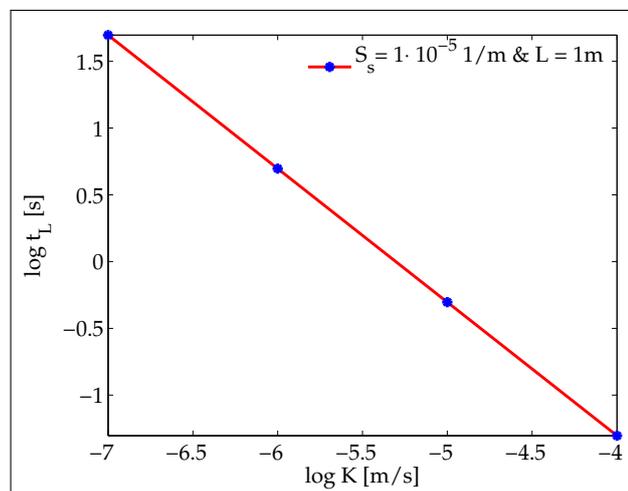


Figura 22. Relación entre la conductividad hidráulica y el tiempo de establecimiento.

A continuación se analiza cómo influye el almacenaje específico en el tiempo de establecimiento, la Figura 23 muestra dicha relación para un valor de conductividad hidráulica $K = 1 \cdot 10^{-6} m/s$ y una longitud del sistema $L = 1 m$. El almacenaje específico también varía linealmente, pero en este caso de manera directa.

Se debe analizar desde el punto de vista de la compresibilidad, mientras más compresible sea un medio poroso, más lentamente se transmitirá la carga hidráulica y los efectos de la perturbación inicial se harán menos evidentes. Para entender este fenómeno se podría imaginar una barra de hierro (medio incompresible) y una barra de esponja (medio muy compresible). Si se golpea un extremo de la barra de hierro se sentirán los efectos de manera instantánea en el otro extremo, sin embargo, si se realiza el mismo golpe en la barra de esponja los efectos en el extremo opuesto se sentirán en mucha menor proporción.

En el último análisis se estudia la relación entre el tiempo de establecimiento y la longi-

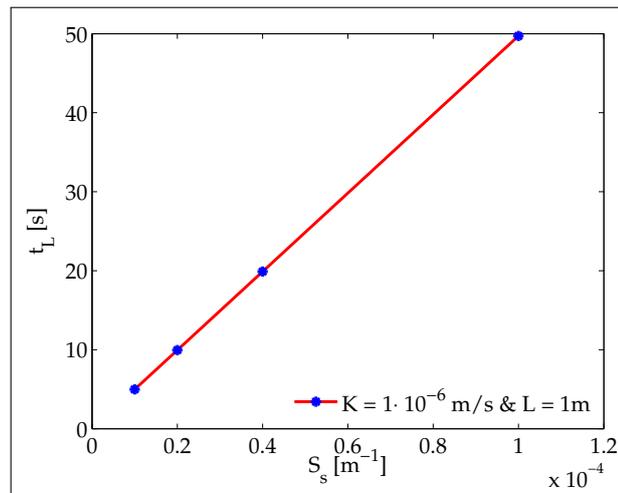


Figura 23. Relación entre el almacenaje específico y el tiempo de establecimiento.

tud del sistema para una conductividad hidráulica $K = 1 \cdot 10^{-6} m/s$ y un almacenaje específico de $S_s = 1 \cdot 10^{-5} m^{-1}$. La Figura 24 sugiere que al aumentar la longitud del sistema el tiempo de establecimiento también lo hace, sin embargo, no se verifica una proporcionalidad lineal sino una cuadrática. Esto resulta lógico, ya que mientras más largo sea el sistema mucho más lenta será la transmisión de la carga hidráulica.

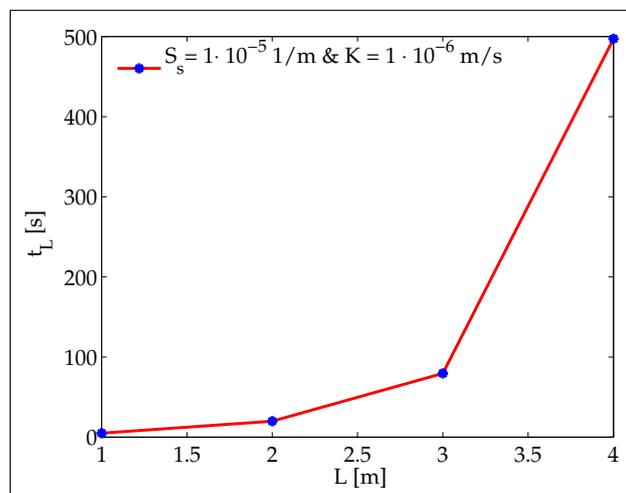


Figura 24. Relación entre la longitud del sistema y el tiempo de establecimiento.

Para finalizar este caso de estudio se pueden escribir las siguientes relaciones:

$$\frac{t_L}{t_{L0}} = \frac{K^{-1}}{K_0^{-1}} = \frac{S_s}{S_{s0}} = \left(\frac{L}{L_0}\right)^2, \tag{105}$$

donde el subíndice 0 representa los valores iniciales para un sistema en particular.

4.1.3 Caso de estudio #3: Comparación de los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos

En este caso se analizan los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos, en la Figura 25 se representan esquemáticamente los tres sistemas estudiados. El primero es un medio homogéneo compuesto por grava (un medio poroso altamente conductivo), el segundo es un medio heterogéneo compuesto por grava y arena (un medio poroso medianamente conductivo) y por último, un medio heterogéneo compuesto por grava, arena y arcilla (un medio poroso de muy baja conductividad).

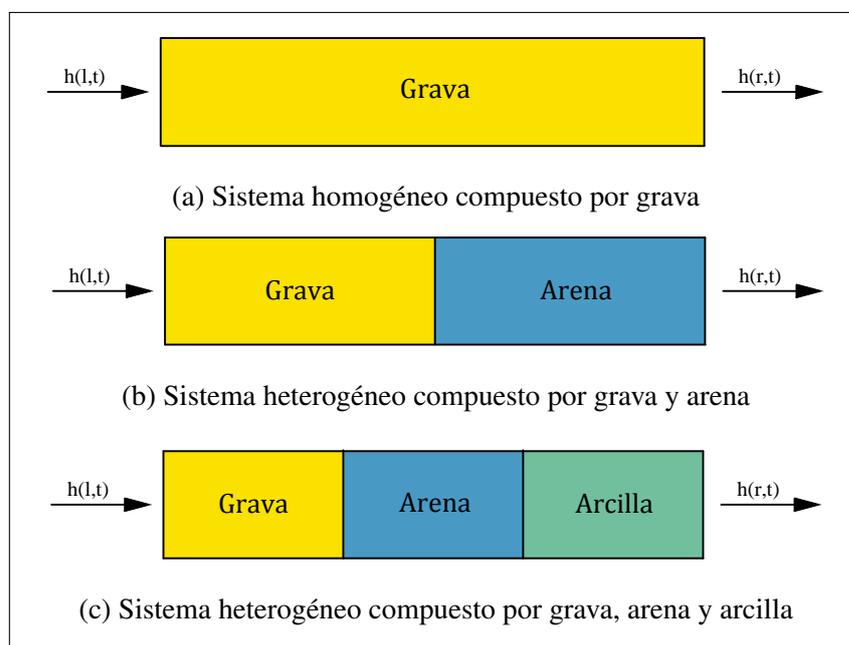


Figura 25. Distintas disposiciones de estratos rocosos.

La Figura 26a muestra los perfiles de carga hidráulica para un tiempo equivalente a 100 s, el sistema homogéneo compuesto por grava (G) presenta un perfil mucho más desarrollado, esto se debe a que al material es muy conductivo y ofrece muy poca resistencia al flujo, sin embargo, el sistema heterogéneo compuesto por grava y arena (G-A) muestra un perfil menos evolucionado ya que es menos conductivo, un detalle importante es que la forma que adopta el perfil cambia al llegar a la zona donde existe arena, este cambio en el perfil se debe justamente al cambio en los valores de conductividad hidráulica. En lo que respecta al perfil correspondiente al sistema grava-arena-arcilla (G-A-A) se observa muy poca evolución, el fluido apenas ha alcanzado la posición $x = 300 m$, por lo tanto no se verifica ningún cambio en la forma del perfil.

En la Figura 26b se muestran los perfiles de carga hidráulica para un tiempo igual a 1000 s. El perfil para el sistema homogéneo ya ha llegado al estado estacionario a los

Tabla 6. Datos para el estudio de los perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos porosos.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud del sistema	L	1000	m
Número de puntos	n	50	—
Paso espacial	Δx	20,41	m
Tiempo de simulación	t_{sim}	$8 \cdot 10^9$	s
Paso temporal	Δt	variable ⁱ	s
Conductividad hidráulica grava	K_{gra}	$1,52 \cdot 10^{-2}$	m/s
Conductividad hidráulica arena	K_{are}	$2,50 \cdot 10^{-4}$	m/s
Conductividad hidráulica arcilla	K_{arc}	$2,01 \cdot 10^{-9}$	m/s
Almacenaje específico grava	$S_{s,gra}$	$1,11 \cdot 10^{-5}$	m^{-1}
Almacenaje específico arena	$S_{s,are}$	$9,98 \cdot 10^{-5}$	m^{-1}
Almacenaje específico arcilla	$S_{s,arc}$	$9,82 \cdot 10^{-4}$	m^{-1}
Condición de frontera izquierda	$h(l, t)$	100	m
Condición de frontera derecha	$h(r, t)$	0	m
Condición inicial	$h(x, 0)$	0	m

ⁱ Para Figuras 25a-25d $\Delta t = 1$, para Figura 25e, $\Delta t = 1 \cdot 10^4$ y para Figura 25f, $\Delta t = 1 \cdot 10^6$

365 s, así que para todos los tiempos siguientes $h = h(x)$. El perfil para el sistema grava-arena se encuentra mucho más desarrollado y el cambio en la forma del perfil de carga hidráulica se hace todavía más evidente en $x = 500 m$, algo interesante que se debe notar es que para una posición, digamos $x = 200 m$, la carga hidráulica para el sistema grava-arena es mayor que para el sistema grava, esto puede explicarse con la ley de Darcy:

$$u = -K \frac{\Delta h}{\Delta x}, \quad \rightarrow \quad \frac{\Delta h}{\Delta x} = -\frac{u}{K}.$$

Como puede corroborarse con las ecuaciones, una conductividad menor sugiere un mayor valor de carga hidráulica para las mismas condiciones iniciales y velocidades de Darcy. En lo que respecta al sistema grava-arena-arcilla, ya se puede visualizar el primer cambio en la forma del perfil, sin embargo aún se encuentra en un estado transitorio poco desarrollado.

La Figura 26c muestra los perfiles para un tiempo de 5000 s, se verifica un estado más avanzado para los sistemas arena-grava y arena-grava-arcilla, sin embargo, la tendencia descrita en el párrafo anterior se mantiene. Como se mencionó anteriormente, el sistema grava ha alcanzado el estado estacionario y el perfil no cambiará con el tiempo a menos que se induzca un nuevo tipo de perturbación en el sistema.

En la Figura 26d se pueden observar los perfiles para un tiempo de 30000 s, el sistema grava-arena ya ha alcanzado el estado estacionario a los 28670 s, por otro lado, es

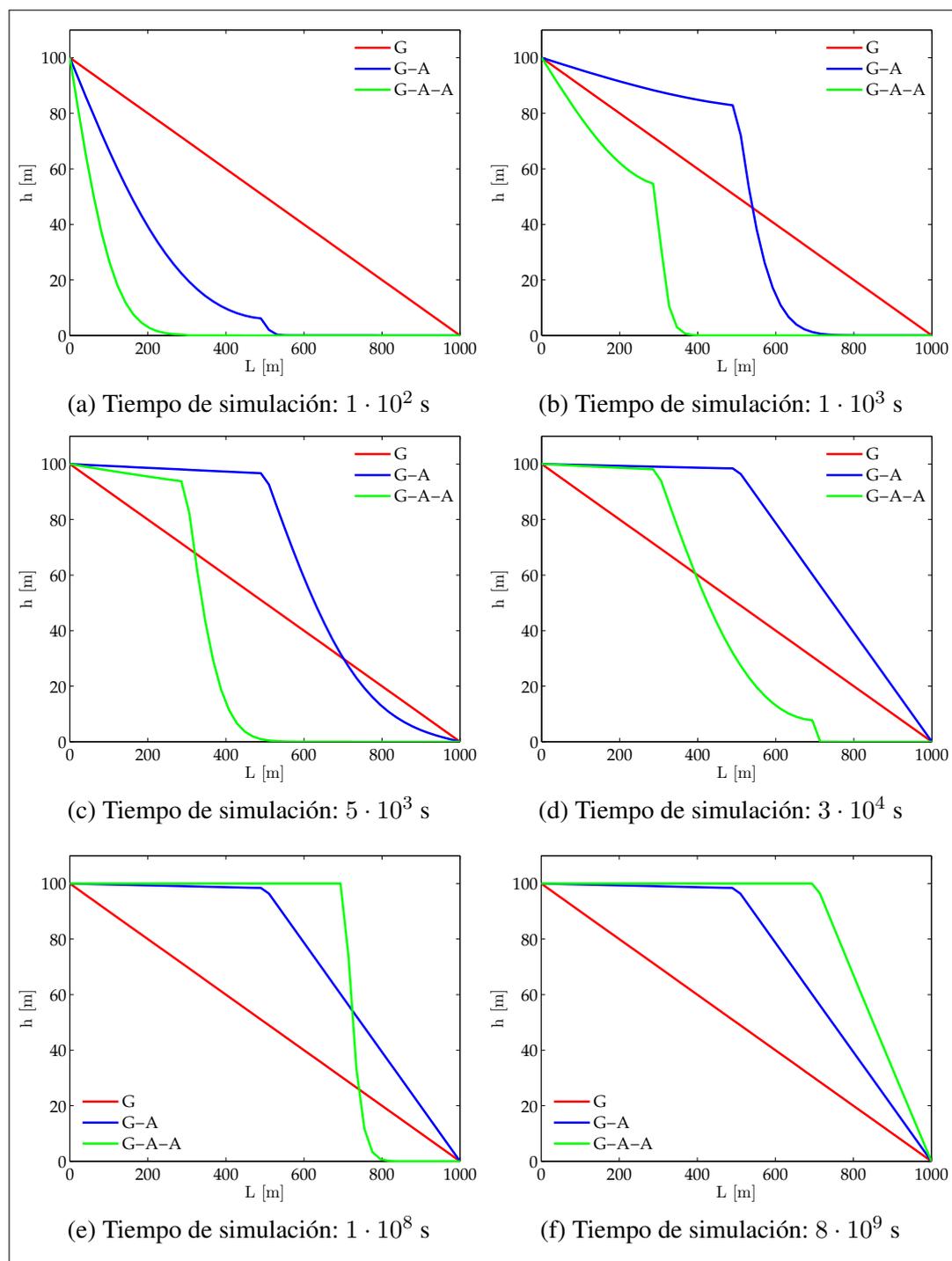


Figura 26. Perfiles de carga hidráulica para distintas disposiciones de estratos rocosos.

perceptible un cambio en el perfil de carga hidráulica debido a que el fluido ya ha alcanzado la arcilla (cercano a los 700 m) en el sistema grava-arena-arcilla.

Para generar los perfiles de carga hidráulica de la Figura 26e fue necesario adoptar otro valor de paso temporal, debido a que el tiempo de simulación $t_{sim} = 1 \cdot 10^8$ s $\approx 3,2$

años es considerablemente mayor. En esta gráfica se puede apreciar que los valores de carga hidráulica del sistema grava-arena-arcilla son mayores que los del sistema grava-arena y grava en las regiones donde el perfil ya se encuentra completamente desarrollado, esto es, hasta los 750 m aproximadamente, esto obedece al mismo hecho explicado unos párrafos atrás.

Por último, para que el sistema grava-arena-arcilla alcance el estado estacionario se necesita $7,837 \cdot 10^9 s \approx 248,5$ años, esto se debe a que la arcilla es prácticamente impermeable. El perfil en estado estacionario se muestra en la Figura 26f. En este caso también fue necesario adoptar un incremento temporal mayor por los mismos motivos ya explicados.

Los perfiles de carga hidráulica dependen en gran medida del tipo de medio poroso del cual esté formado el acuífero, un medio poroso altamente conductivo puede alcanzar el estado estacionario en un par de minutos, mientras que un medio con baja conductividad puede crear una resistencia tan elevada que se necesiten cientos de años para alcanzarlo.

4.2 Flujo bifásico

Los casos de estudio que se abordan en esta sección inician con la validación de los resultados numéricos obtenidos con el algoritmo ImpES con el modelo analítico propuesto por Buckley y Leverett, además se comparan los resultados numéricos obtenidos con malla refinada y con mallas gruesas. Luego se estudia cómo afecta a los perfiles de presión y saturación de contaminante adoptar distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio. Se evalúa también la incidencia de emplear celdas con baja permeabilidad en distintas regiones del sistema y celdas con permeabilidades aleatorias a lo largo del dominio. Además, se evalúa cómo los parámetros físicos como el índice de distribución de tamaño de poros, la presión entrante y la porosidad afectan la transmisión de presión y la propagación del frente de saturación del contaminante.

4.2.1 Caso de estudio #4: Validación de los resultados numéricos obtenidos mediante el algoritmo ImpES con el modelo de Buckley-Leverett y comparación de resultados numéricos con mallas gruesas y refinadas.

Como el modelo de Buckley-Leverett no contempla los efectos de la presión capilar, la zona donde se verifica el frente de choque de la saturación será diferente que la del esquema numérico, sin embargo, si se disminuyen los efectos de la presión capi-

lar (adoptando valores de presión entrante bajos) se logra reproducir bastante bien la forma de la curva. El caso real debe contemplar los efectos de presión capilar, desafortunadamente no existe un modelo analítico con el cual contrastar los resultados numéricos, por lo que se recurre a generar un perfil de saturación utilizando una malla refinada (ej: 600 celdas) para compararlas con mallas más gruesas. Las condiciones de simulación se detallan en la Tabla 7.

Para comparar el modelo de Buckley-Leverett con el esquema numérico se debe utilizar una condición de Neumann en la frontera izquierda (valor de velocidad total) y una condición de Dirichlet (con un valor cualquiera de presión) en la frontera derecha. En la Figura 27 se muestran las distintas curvas generadas con diferentes valores de presión entrante. Las curvas muestran el perfil de saturación del contaminante S^n frente a la longitud L para un tiempo de $1 \cdot 10^6$ s. Como sugiere la condición de frontera izquierda para la saturación, al sistema ingresa solamente contaminante, sin embargo, nunca podrá desplazar toda el agua ya que existe una porción residual de agua en poros aislados, es por eso que el valor de saturación baja instantáneamente a $1 - S^{iw} = 0,8$, luego desciende suavemente hasta llegar al choque (aproximadamente en $S^n = 0,70$) donde se verifica una caída vertiginosa de la saturación hasta la condición inicial $S^w = 1$.

Tabla 7. Datos para la validación de los resultados numéricos con el modelo de Buckley-Leverett.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud del sistema	L	1	m
Número de celdas	n	variable ⁱ	—
Tiempo de simulación	t_{sim}	$1 \cdot 10^6$	s
Paso temporal	Δt	$1 \cdot 10^3$	s
Viscosidad del contaminante	μ^n	10	cP
Viscosidad del agua	μ^w	1	cP
Saturación residual del agua	S^{iw}	0,20	—
Presión entrante	p_{ent}	variable ⁱⁱ	bar
Índice de distr. de tamaño de poro	τ	2,00	—
Porosidad	ϕ	0,15	—
Cond. de front. izquierda (Vel. total)	$u^t(l, t)$	1,0	$m/año$
Cond. de front. izquierda (Saturación)	$S^w(l, t)$	0,8	—
Cond. de front. derecha (Presión)	$p^n(r, t)$	1,0	bar
Cond. de front. derecha (Saturación)	$S^w(r, t)$	0	—
Condición inicial (Presión)	$p^n(x, 0)$	0	bar
Condición inicial (Saturación)	$S^w(x, 0)$	1	—

ⁱ 100 celdas para la comparación con el modelo de BL y variable para la comparación con el algoritmo ImPES malla refinada ⁱⁱ Variable para la comparación con el modelo de BL e igual a 0,20 para la comparación con el algoritmo ImPES malla refinada

En el caso del modelo de Buckley-Leverett este choque genera una discontinuidad en la saturación, por este motivo exhibe una caída en ángulo recto, sin embargo, si se consideran los efectos de la presión capilar el choque se dispersa haciendo que la

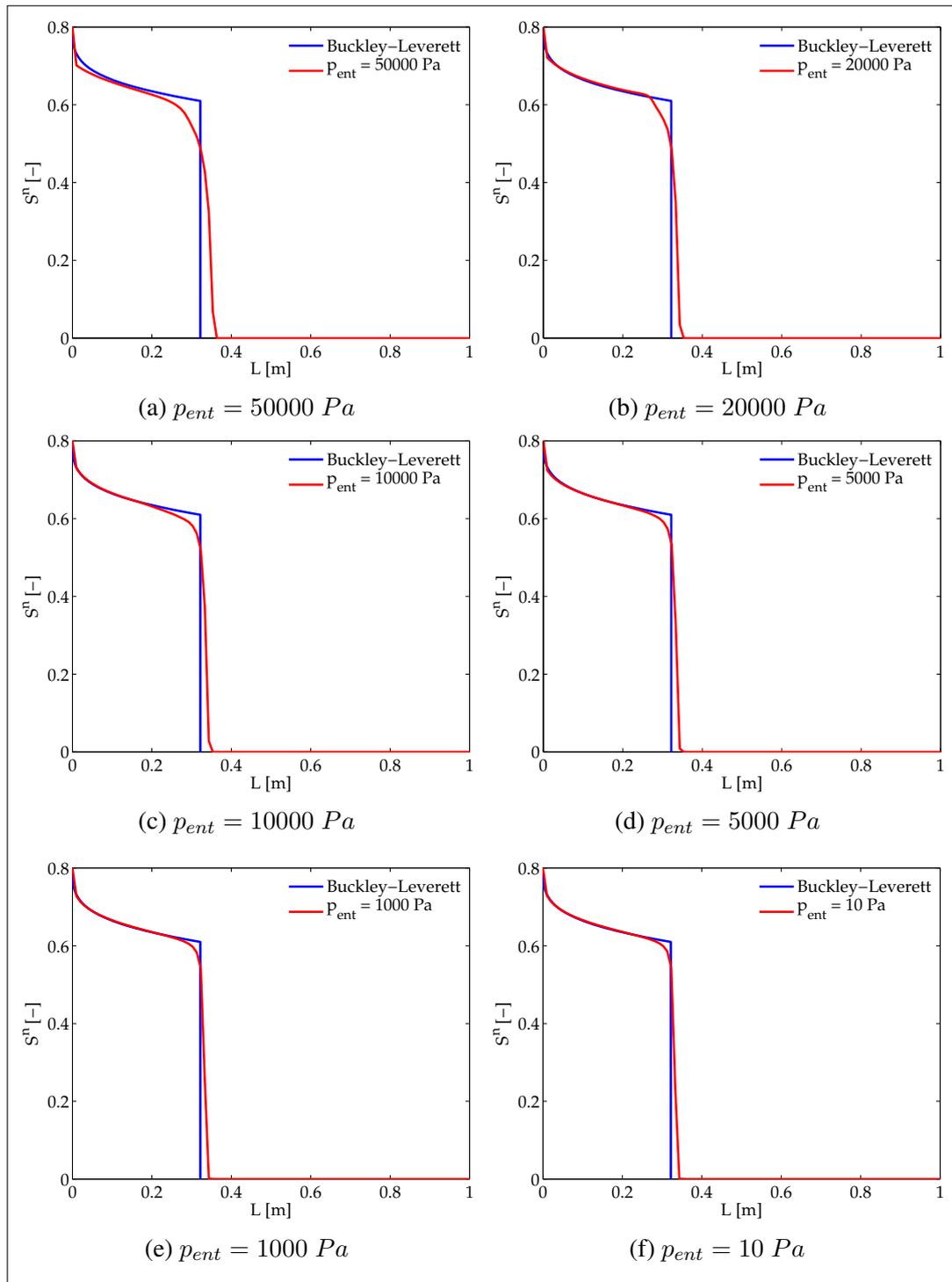


Figura 27. Validación de los resultados numéricos (algoritmo ImpES) con el analítico (modelo de Buckley-Leverett) para distintos valores de presión entrante.

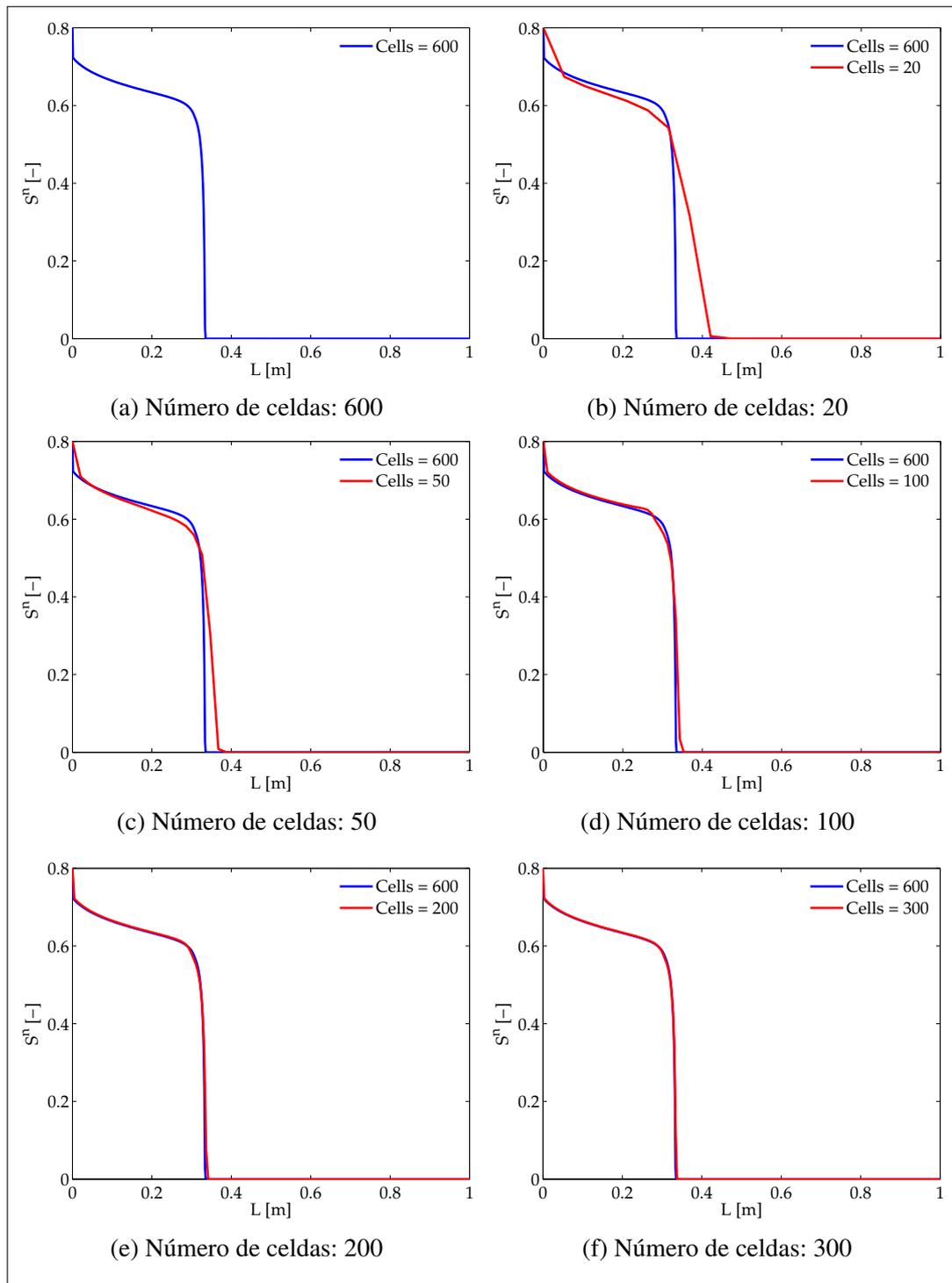


Figura 28. Comparación de los resultados obtenidos con mallas gruesas y malla refinada (600 celdas).

función se vuelve continua en todo el dominio. Como era de esperarse, la Figura 27 muestra que mientras menor sea la contribución de los efectos de la presión capilar más se acerca la solución numérica a la analítica.

Como se mencionó anteriormente, debido a la inexistencia de un modelo analítico que contemple los efectos de la presión capilar, es necesario adoptar un sistema con elevado número de celdas (malla refinada) como curva teórica o “exacta”. Esto posibilita tener un punto de referencia relativo del error que se genera al utilizar mallas gruesas. La Figura 28 muestra las simulaciones para distintos números de celdas. Como es de esperarse, al ir refinando las mallas, las soluciones cada vez se acercan más a la curva con 600 celdas. Se debe notar que el aumento en la precisión es cada vez menor. Existe un punto en el que el aumento en la precisión no compensa los elevados costos computacionales inherentes a un refinamiento de malla. Se puede verificar que para 100 celdas las diferencias con la curva generada con 600 celdas son mínimas. Para 200 celdas se puede considerar que la solución se vuelve completamente independiente del número de malla e ir refinándola sólo incrementará el tiempo computacional, obteniendo una mejora virtualmente nula en la precisión.

4.2.2 Caso de estudio #5: Análisis de la incidencia de adoptar distintos tipos de condiciones de frontera en los perfiles de presión y saturación

En este caso de estudio se analizan los perfiles de presión y de saturación de contaminante considerando dos tipos distintos de condiciones de frontera al final del dominio, la primera es una condición de Dirichlet, que no es otra cosa que establecer una presión constante de contaminante al final del sistema, la otra es una condición mixta, que combina una de Dirichlet y una de Neumann¹⁰, estableciendo como nula la velocidad de salida del contaminante, esto podría verse como una especie de membrana semipermeable que solo permite el paso del agua, si bien este es un caso un poco particular (ya que demandaría un tipo especial de roca que sea netamente hidrofílica e impida el paso del contaminante) resulta interesante estudiarlo ya que bajo estas condiciones lo lógico sería que el contaminante se acumule al final del sistema. En la Tabla 8 se muestran las condiciones de simulación para los resultados mostrados en las Figuras 29 y 30.

Las Figuras 29a y 30a muestran los perfiles de presión y saturación de contaminante para las condiciones iniciales $p^n(x, 0)$ y $S^n(x, 0)$ respectivamente. A los 30 años se observa que la presión del contaminante ha aumentado a lo largo del dominio describiendo un perfil idéntico (prácticamente lineal) para ambas condiciones de frontera, esto resulta coherente ya que el sistema está siendo invadido por el contaminante, lo que necesariamente implica un incremento en la presión. Aún no se sienten los efec-

¹⁰Notar que es un tipo especial de condición de Neumann ya que se aplica sólo al contaminante.

Tabla 8. Datos para el análisis de la incidencia de adoptar distintas condiciones de fronteras al final del dominio.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud del sistema	L	100	m
Número de celdas	n	70	—
Paso espacial	Δx	1,45	m
Tiempo de simulación	t_{sim}	60	$años$
Paso temporal	Δt	2,8	$horas$
Viscosidad del contaminante	μ^n	10	cP
Viscosidad del agua	μ^n	1	cP
Saturación residual del agua	S^{iw}	0,20	—
Presión entrante	p_{ent}	0,20	bar
Índice de distr. de tamaño de poro	τ	2,00	—
Porosidad	ϕ	0,15	—
Cond. de front. derecha (Presión)	$p^n(l, t)$	100	bar
Cond. de front. izquierda (Saturación)	$S^w(l, t)$	0,8	—
Cond. de front. derecha (Vel. contamin.)	$u^n(r, t)$	0	$m/año$
Cond. de front. derecha (Presión)	$p^n(r, t)$	10	bar
Cond. de front. derecha (Saturación)	$S^w(r, t)$	1	—
Condición inicial (Presión)	$p^n(x, 0)$	10	bar
Condición inicial (Saturación)	$S^w(x, 0)$	1	—

tos de la condición de Neumann debido a que el frente de saturación no ha llegado al final del dominio como puede corroborarse en las Figuras 29b y 30b. A los 42 años el perfil de presión para la condición de flujo nulo de contaminante ha aumentado hasta $p^n(l, t)$, esto atiende al hecho de que como el flujo se ve impedido necesariamente se acumula masa en el sistema, (esta acumulación de masa se hace evidente en la Figura 30c donde se observa un pico en la saturación al final del dominio). A su vez, esta acumulación de masa ocasiona un aumento de presión en el sistema, sin embargo, el máximo valor posible que puede alcanzar la presión del contaminante equivale al de la condición de frontera izquierda, una vez alcanzado este valor el sistema queda en un estado cuasi-estático. Para los siguientes años ya no se verifican diferencias significativas en los perfiles de presión ni de saturación debido a que los efectos advectivos son prácticamente nulos a causa de la reducida (casi inexistente) diferencia de presión en el sistema. Los pequeños cambios que se pueden llegar a observar en los perfiles de saturación de las Figuras 30e y 30f se deben a los efectos de presión capilar, los cuales son generalmente mucho más pequeños que los advectivos.

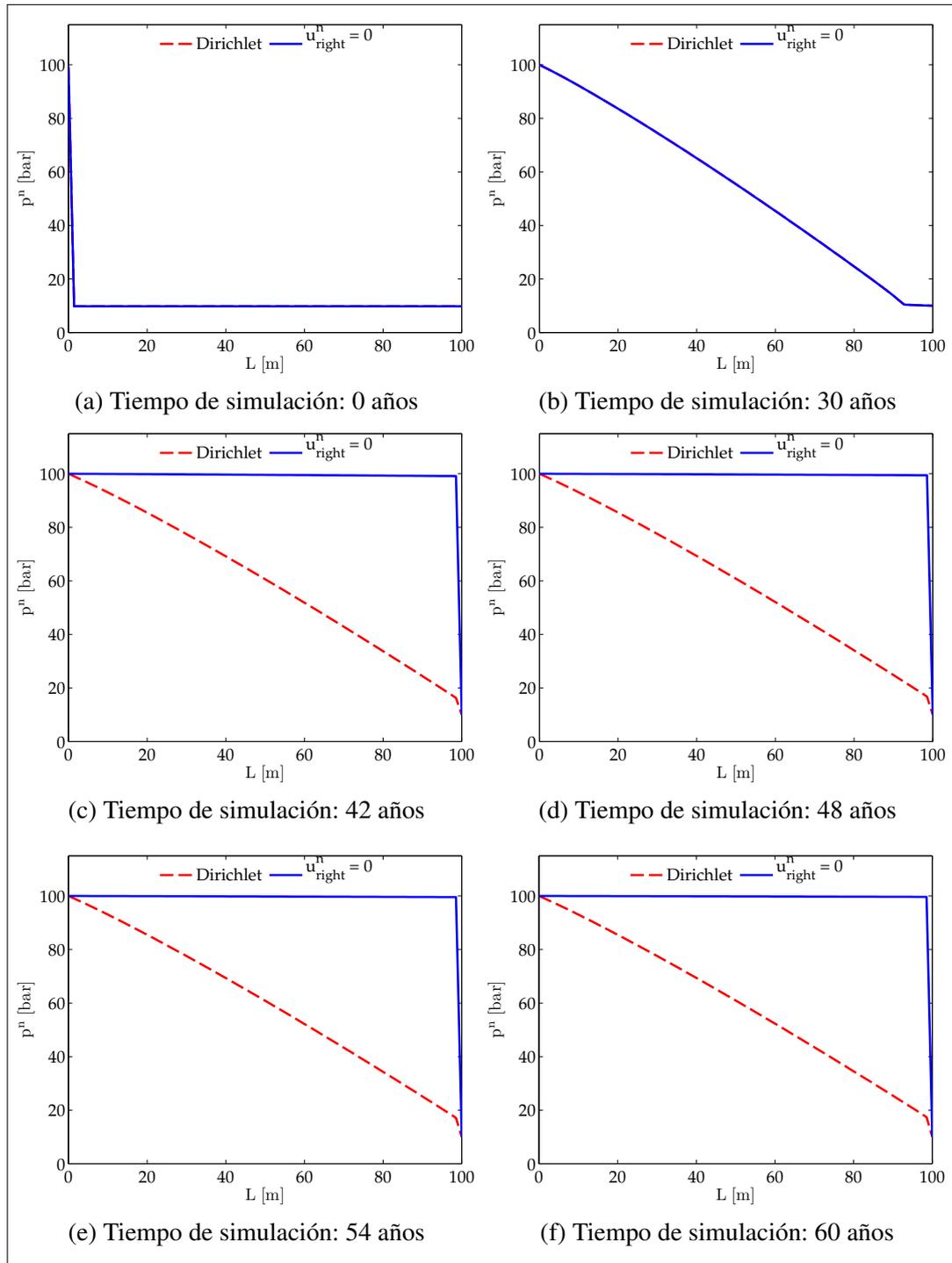


Figura 29. Perfiles de presión de contaminante para distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio.

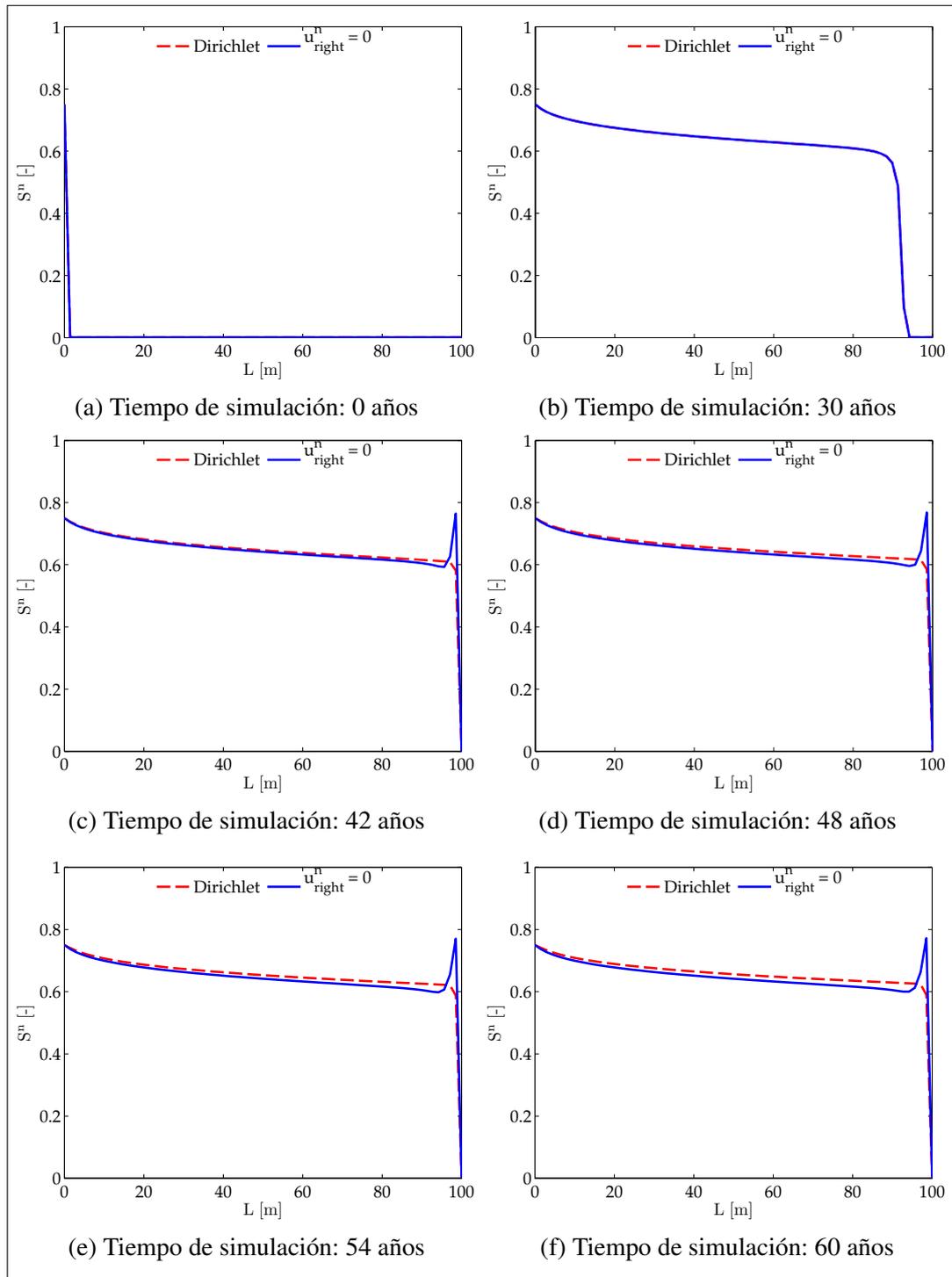


Figura 30. Perfiles de saturación de contaminante para distintos tipos de condiciones de frontera al final del dominio.

4.2.3 Caso de estudio #6: Análisis de la incidencia de adoptar celdas con baja permeabilidad en el medio del dominio en los perfiles de presión y saturación de contaminante

En este caso de estudio se analiza la influencia de adoptar dos celdas con permeabilidad más baja situadas en el medio del dominio en la transmisión de presión y el desplazamiento del frente de saturación del contaminante.

Las condiciones de simulación son las mismas que las presentadas anteriormente. En la Figura 31 se presentan los valores de permeabilidad a considerar.

En las Figuras 32 y 33 se muestran los perfiles de presión y saturación de contaminante para los distintos sistemas.

En las Figuras 32a y 33a se muestran las condiciones iniciales.

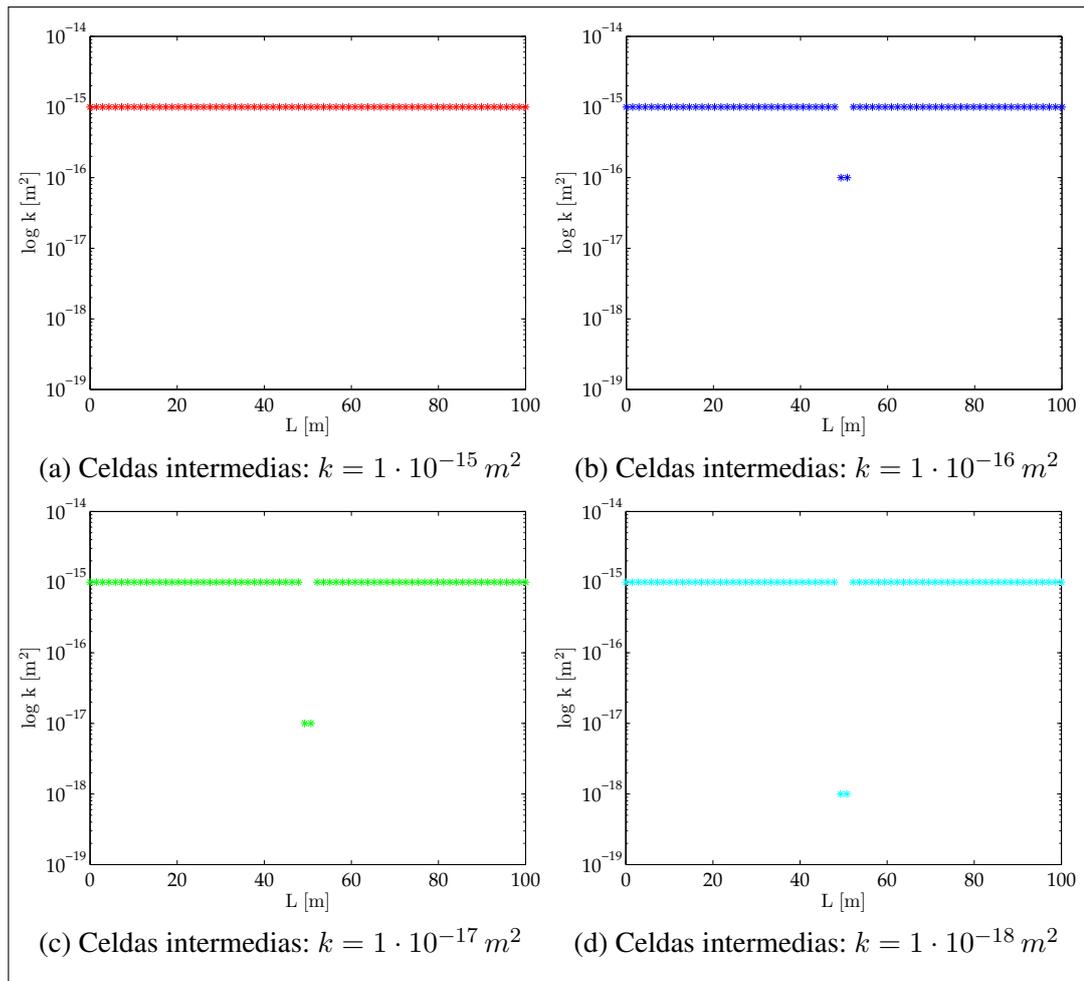


Figura 31. Permeabilidades para el caso de estudio #6.

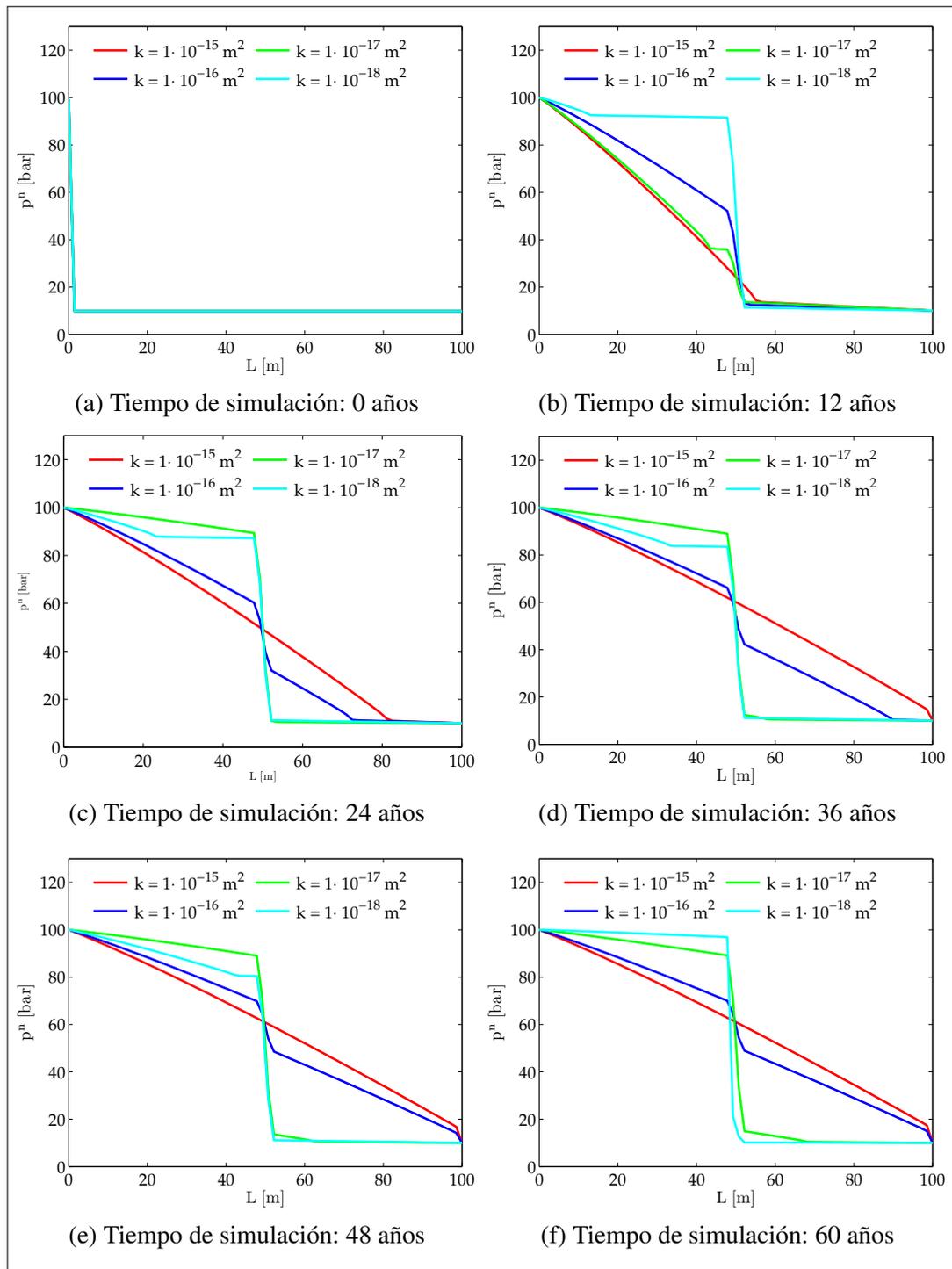


Figura 32. Perfiles de presión de contaminante para celdas con baja permeabilidad en el medio del sistema.

En la Figuras 32b y 33b se pueden observar los perfiles para un tiempo de simulación equivalente a 20 años, como era de esperarse los perfiles de presión y saturación para los sistemas más conductivos se encuentran más desarrollados.

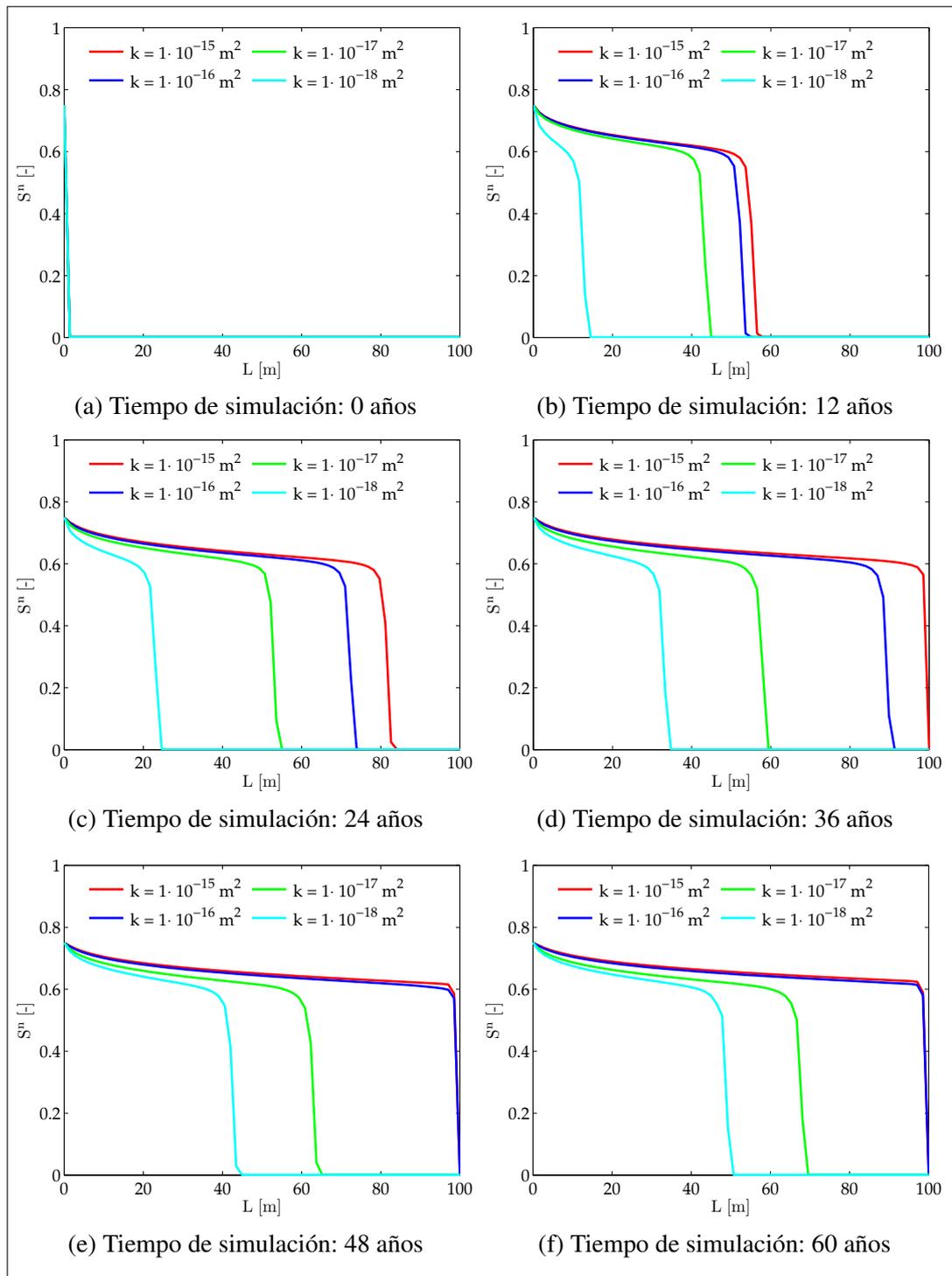


Figura 33. Perfiles de saturación de contaminante para celdas con baja permeabilidad en el medio del sistema.

Esto puede verse como una analogía entre la carga hidráulica y la conductividad hidráulica para el flujo monofásico, la explicación basada en la ley de Darcy sigue siendo completamente válida para explicar este fenómeno.

Los sistemas con $k = 1 \cdot 10^{-15} m^2$ y $k = 1 \cdot 10^{-16} m^2$ son los suficientemente conductivos para alcanzar el medio del dominio. El perfil de presión del primero conserva la misma pendiente por ser un medio homogéneo, sin embargo, en el segundo sistema la presión se incrementa al hacer contacto con el material menos conductivo. Los frentes de saturación de los sistemas con $k = 1 \cdot 10^{-17} m^2$ y $k = 1 \cdot 10^{-18} m^2$ aún no alcanzan el medio del dominio para este tiempo. Estos perfiles pueden verse en las Figuras 32b y 33b.

Como sugieren las Figuras 32c y 33c para el año 24 el sistema con $k = 1 \cdot 10^{-17} m^2$ ya ha alcanzado la mitad del dominio, la presión se ha elevado superando a los sistemas con conductividad más elevada, sin embargo, como sugieren las Figuras 32c y 33c el frente de saturación para el sistema con $k = 1 \cdot 10^{-18} m^2$ aún no ha alcanzado las celdas con baja permeabilidad.

A los 36 años el sistema homogéneo alcanza el final del sistema y el contaminante trasciende las fronteras dominio, a partir de este momento el sistema llega a un estado cuasi-estático y cualquier cambio en el sistema se debe a los efectos de la presión capilar. Los frentes de saturación de contaminante de los sistemas con menor permeabilidad siguen desplazando al agua. El sistema con $k = 1 \cdot 10^{-18} m^2$ aún no alcanza la mitad del dominio. Los perfiles pueden verse en las Figuras 32d y 33e.

Para un tiempo equivalente a 48 años el sistema con $k = 1 \cdot 10^{-16} m^2$ alcanza el final del dominio aproximándose bastante al perfil para el sistema homogéneo (sin embargo fueron necesarios 12 años más para alcanzarlo).

No es sino a los 60 años que el sistema con $k = 1 \cdot 10^{-18} m^2$ alcanza la mitad del dominio exhibiendo los mayores valores de presión como era de esperarse. Los perfiles finales pueden observarse en las Figuras 32f y 33f.

4.2.4 Caso de estudio #7: Análisis de la incidencia de adoptar celdas con permeabilidades aleatorias en los perfiles de presión y saturación

A pesar de que ya se conoce cómo las permeabilidades afectan a la transmisión de presión y al frente de saturación, resulta interesante evaluar cómo se comporta el sistema cuando se asignan valores aleatorios de permeabilidades a cada celda.

La Figura 34 muestra las permeabilidades aleatoriamente generadas para cuatro casos.

Las Figuras 35 y 36 muestran los perfiles de presión y saturación para distintos tiempos de simulación. Se puede ver que el frente de saturación para el sistema con valores

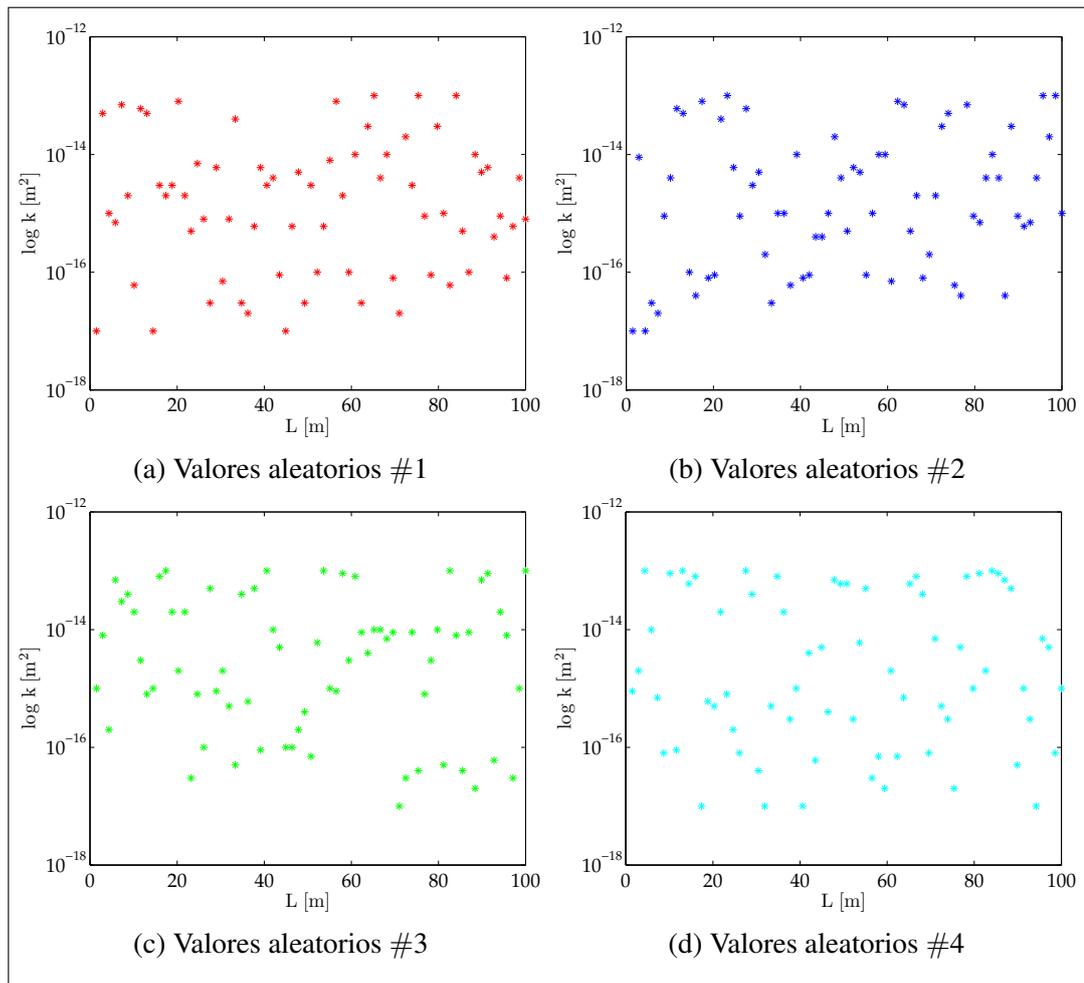


Figura 34. Permeabilidades para el caso de estudio #7.

aleatorios #3 se desplaza más rápido que el frente con valores aleatorios #4, que a su vez es superior al del sistema con valores aleatorios #1, por último el frente más impedido es del sistema con valores aleatorios #2.

Este comportamiento es solamente atribuible a la resistencia al flujo generada por las permeabilidades estocásticamente asignadas a cada celda a lo largo del dominio. Los perfiles de presión son completamente irregulares como bien sugiere la 35 y en cada celda se verifica un cambio en la pendiente (atendiendo a la ley de Darcy).

Por otro lado, los perfiles de saturación conservan su forma característica aún cuando el rango de permeabilidades es aleatorio, esto se debe a que la propagación de la saturación es mucho más lenta que la propagación de presión, por lo tanto, ésta se ve más afectada por los valores de permeabilidad intrínseca.

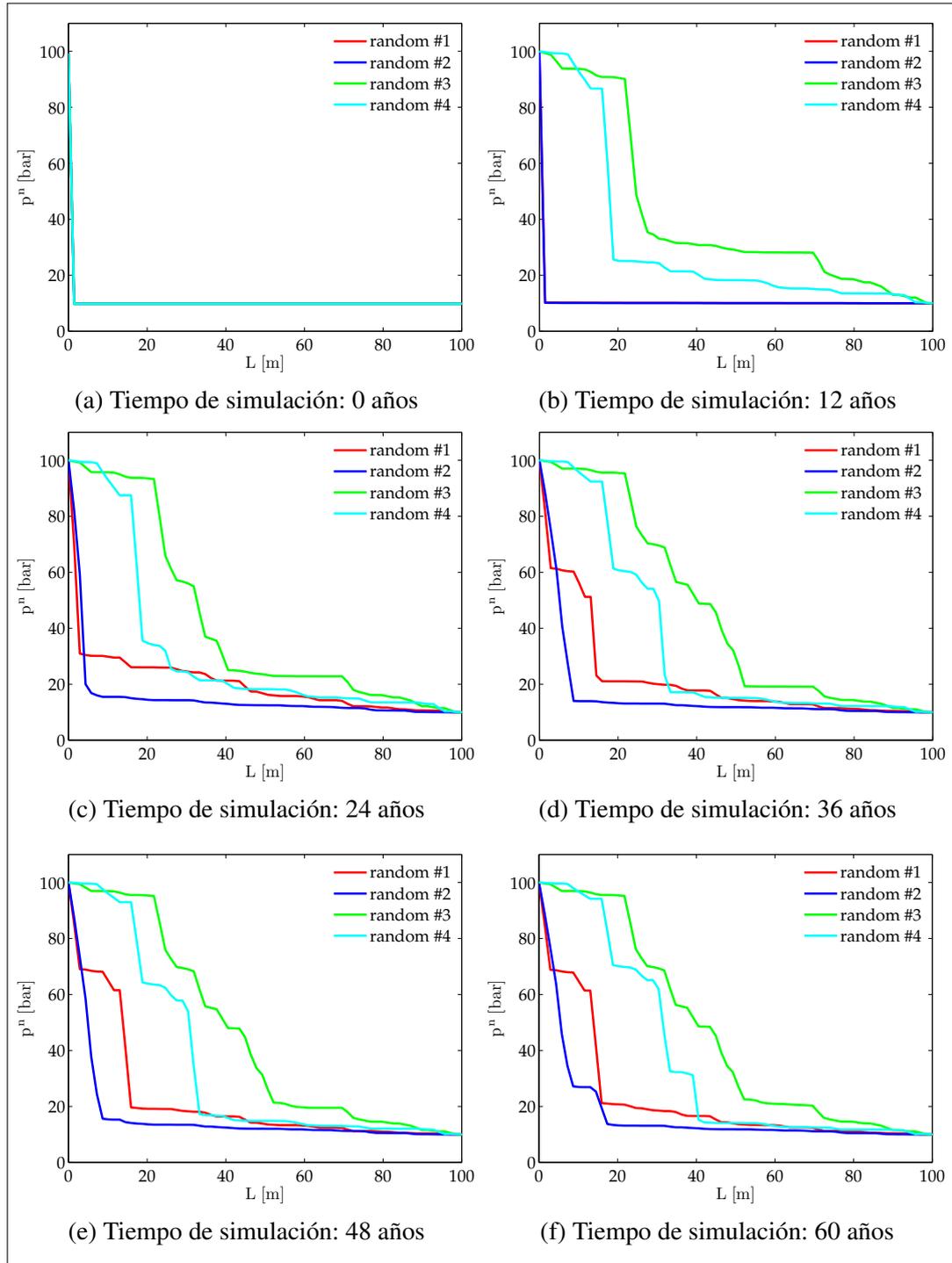


Figura 35. Perfiles de presión de contaminante para celdas con permeabilidades aleatorias.

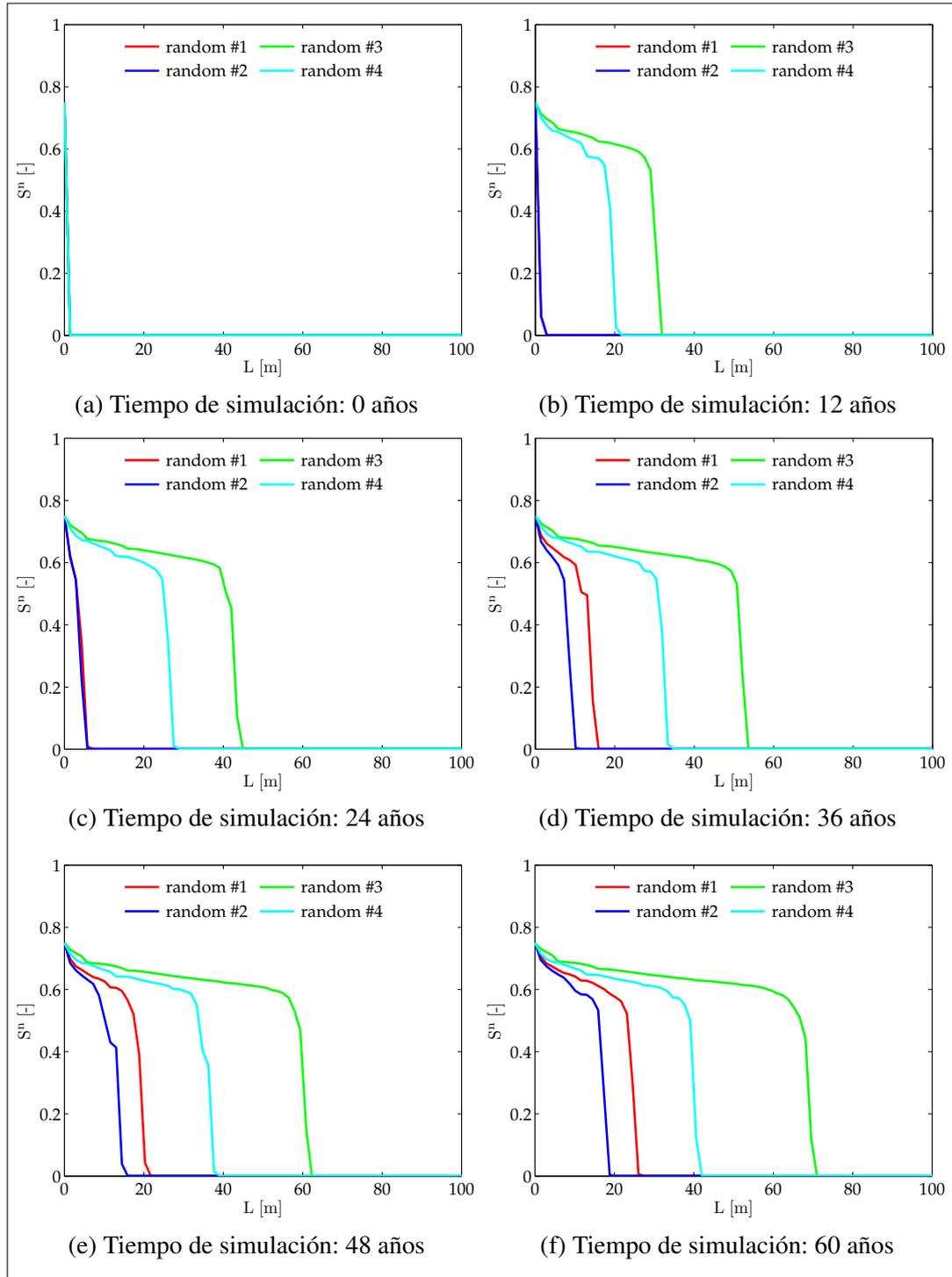


Figura 36. Perfiles de saturación de contaminante para celdas con permeabilidades aleatorias.

4.2.5 Caso de estudio #8: Análisis de la incidencia de adoptar distintos índices de distribución de tamaño de poros en los perfiles de presión y saturación

En este caso de estudio se analiza la incidencia de adoptar distintos valores de τ (índice de distribución de tamaño de poros) en los perfiles de presión y saturación de contaminante. Como se ha mencionado anteriormente, mientras mayor sea el valor de τ más uniforme es la distribución de tamaño de los poros, los valores a emplear en este análisis son $\tau = 0,5$ que corresponde a un *muy amplio rango de tamaño de poros*, $\tau = 2,0$ a un *amplio rango de tamaño de poros*, $\tau = 4,0$ a un *rango medio de tamaño de poros* y por último, $\tau = \infty$ a *poros de tamaño uniforme*.

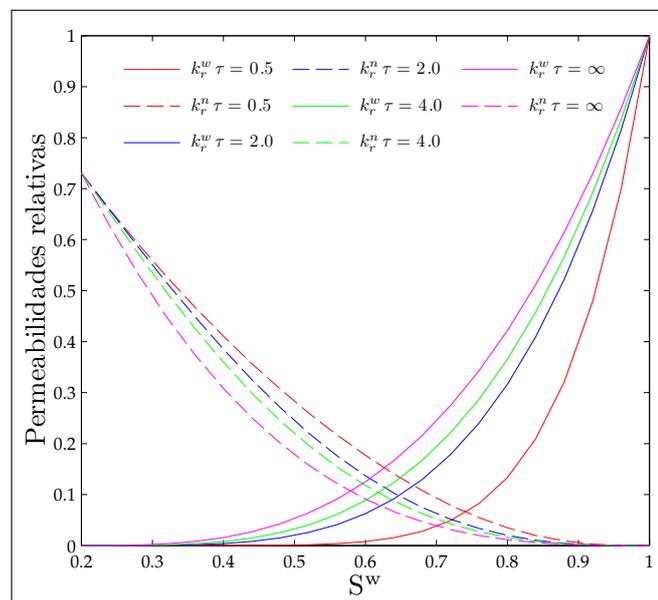


Figura 37. Curvas de permeabilidades relativas para distintos valores de τ .

La Figura 37 muestra las curvas de permeabilidades relativas al adoptar distintos valores de τ , donde se aprecia que los valores de permeabilidad relativa¹¹ para la fase mojada aumentan conforme lo hace τ . Al ser la fase mojada menos viscosa, ésta tiene mayor facilidad de fluir en la estructura porosa, como la fase no mojada tiende a llenar los poros de mayor tamaño preferencialmente, su flujo a micro-escala se ve más impedido al uniformar el tamaño de los poros. Las Figuras 38 y 39 muestran los perfiles de presión y saturación de contaminante. Estas sugieren que para $\tau = 0,5$ la velocidad del frente de saturación es ligeramente menor que para los medios más uniformes, esto concuerda con los bajos valores de permeabilidad relativa, si bien no existen mayores variaciones entre los frentes de saturación para los medios más uniformes sí se

¹¹Recordar que las permeabilidades relativas son una medida de la capacidad (facilidad) de fluir de una fase en presencia de la otra con relación a su permeabilidad absoluta.

percibe que mientras mayor sea τ , mayor es la cantidad de agua drenada (las curvas de saturación son más elevadas), este comportamiento es coherente con lo expuesto anteriormente ya que el flujo de agua se ve favorecido con valores altos de τ .

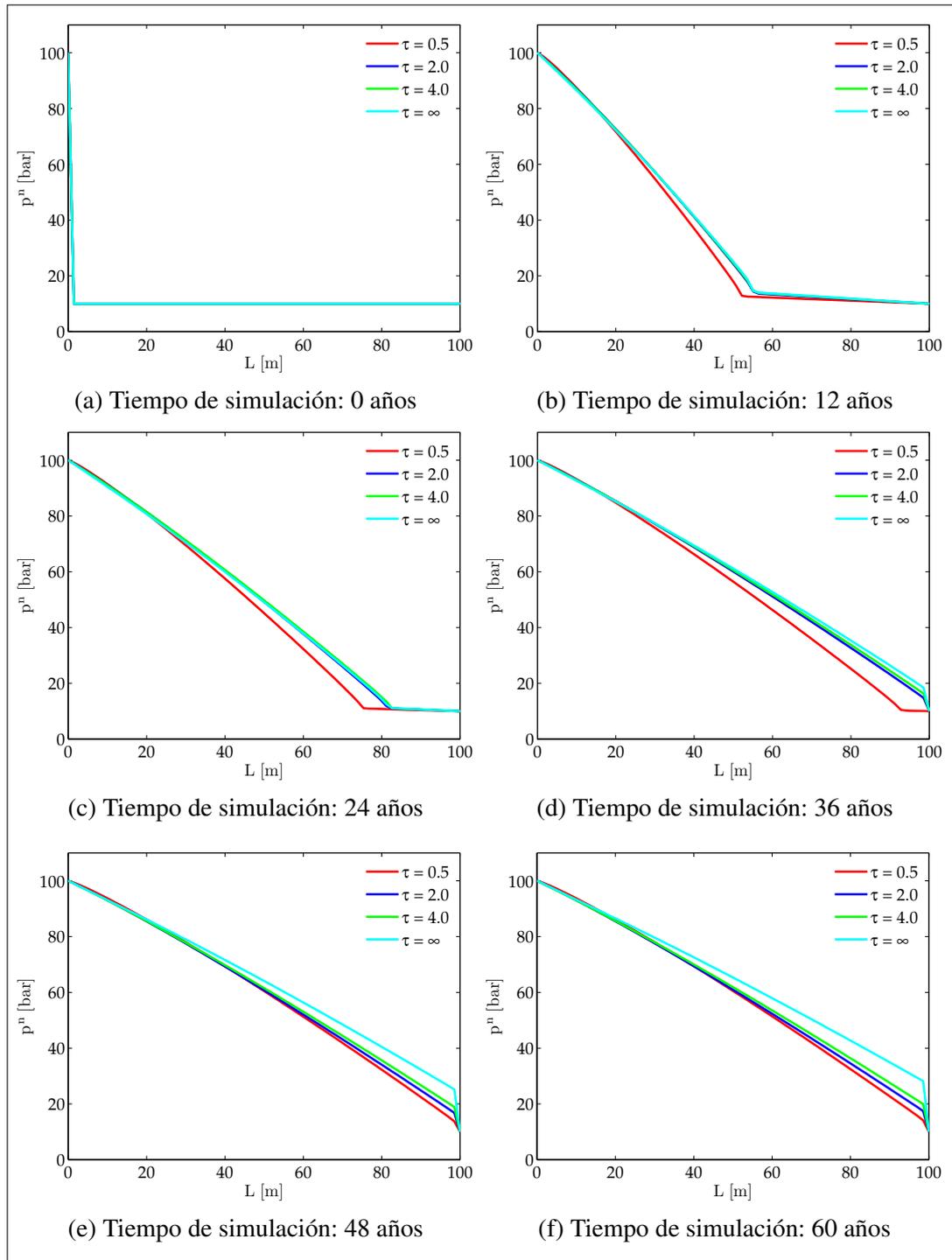


Figura 38. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores de índice de distribución de tamaño de poros.

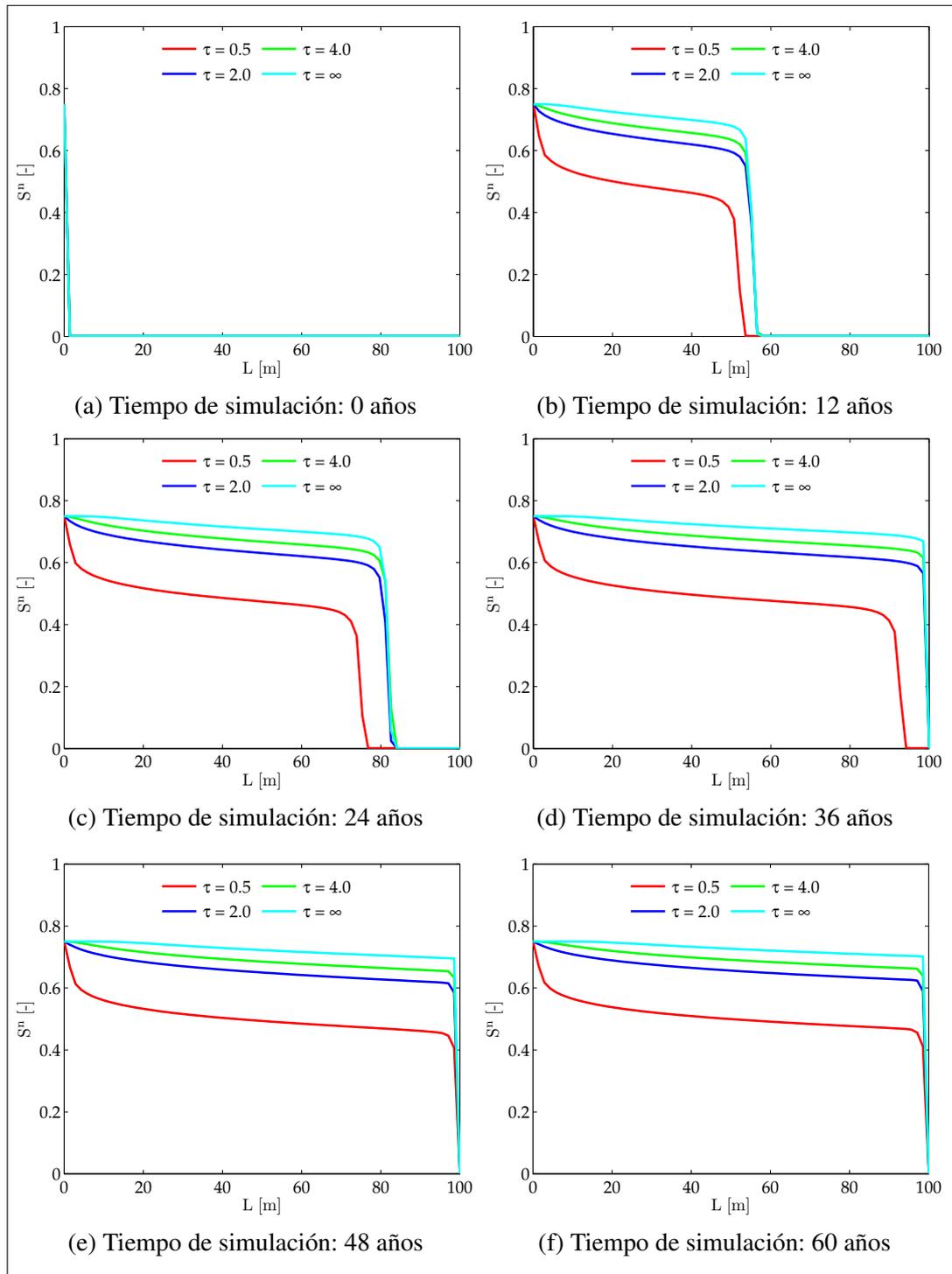


Figura 39. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de índice de distribución de tamaño de poros.

4.2.6 Caso de estudio #9: Análisis de la incidencia de adoptar distintos valores de presión entrante en los perfiles de presión y saturación

En este caso de estudio se analiza la influencia de la presión entrante en el proceso de transmisión de la presión y propagación del frente de saturación del contaminante. Las condiciones de simulación para este caso se muestran en la Tabla 9, los valores de las presiones en las fronteras fueron reducidos para aumentar la contribución de los efectos de presión capilar.

Tabla 9. Datos para el análisis de la incidencia de la presión entrante en los perfiles de presión y saturación.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud del sistema	L	15	m
Número de celdas	n	70	—
Paso espacial	Δx	0,22	m
Tiempo de simulación	t_{sim}	60	$años$
Paso temporal	Δt	2,8	$horas$
Viscosidad del contaminante	μ^n	10	cP
Viscosidad del agua	μ^n	1	cP
Saturación residual del agua	S^{iw}	0,20	—
Presión entrante	p_{ent}	variable	bar
Índice de distr. de tamaño de poro	τ	2,00	—
Permeabilidad	k	$1 \cdot 10^{-15}$	m^2
Porosidad	ϕ	0,15	—
Cond. de front. izquierda (Presión)	$p^n(l, t)$	3,0	bar
Cond. de front. izquierda (Saturación)	$S^w(l, t)$	0,8	—
Cond. de front. derecha (Presión)	$p^n(r, t)$	1,0	bar
Cond. de front. derecha (Saturación)	$S^w(r, t)$	1	—
Condición inicial (Presión)	$p^n(x, 0)$	1,0	bar
Condición inicial (Saturación)	$S^w(x, 0)$	1	—

Es de esperarse que mientras mayor sea la presión entrante más dificultosa será la invasión del contaminante en el sistema. Las Figuras 40 y 41 muestran los perfiles de presión y saturación del contaminante para cuatro valores de presión entrante, a saber, 0,2, 0,4, 0,8 y 1,6 bar.

Los perfiles de presión para los distintos valores de presión entrante son bastantes similares durante el proceso de invasión, los sistemas con presiones entrantes mayores exhiben valores de presión ligeramente mayores a los sistemas con presiones entrantes menores. Esto se debe a que los valores de presión necesarios para iniciar la invasión son más elevados, luego, a partir de este valor la presión se transmite a lo largo del dominio. Esta tendencia se mantiene conforme transcurre la simulación y se hace más

evidente en la Figura 40f.

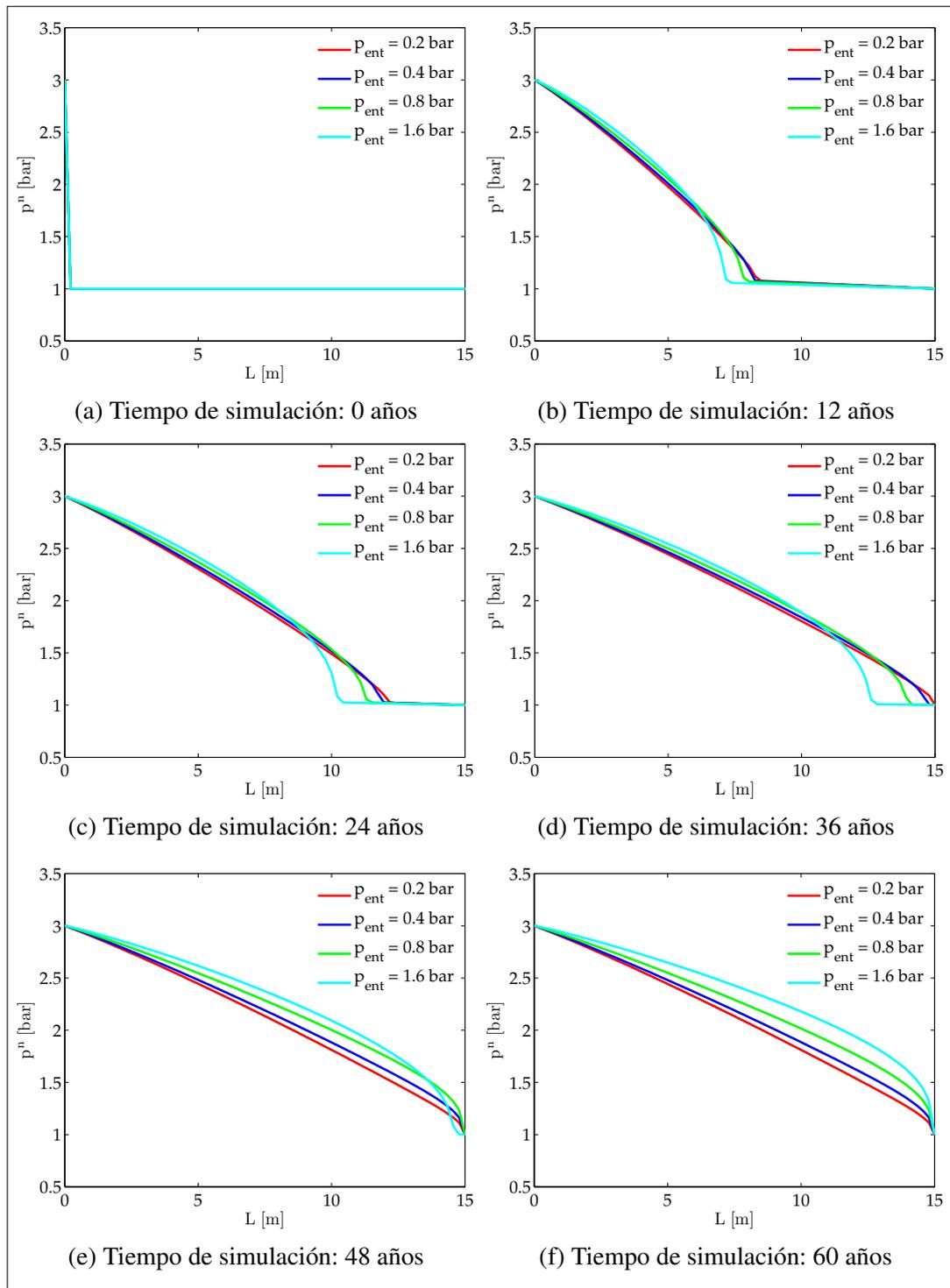


Figura 40. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores presión entrante.

Como puede apreciarse en las figuras de saturación de contaminante contra longitud del sistema, los perfiles exhiben el comportamiento esperado, el sistema con presión entrante $p_{ent} = 0,2 \text{ bar}$ se encuentra más evolucionado que los demás, por la relativa

facilidad a invadir el sistema.

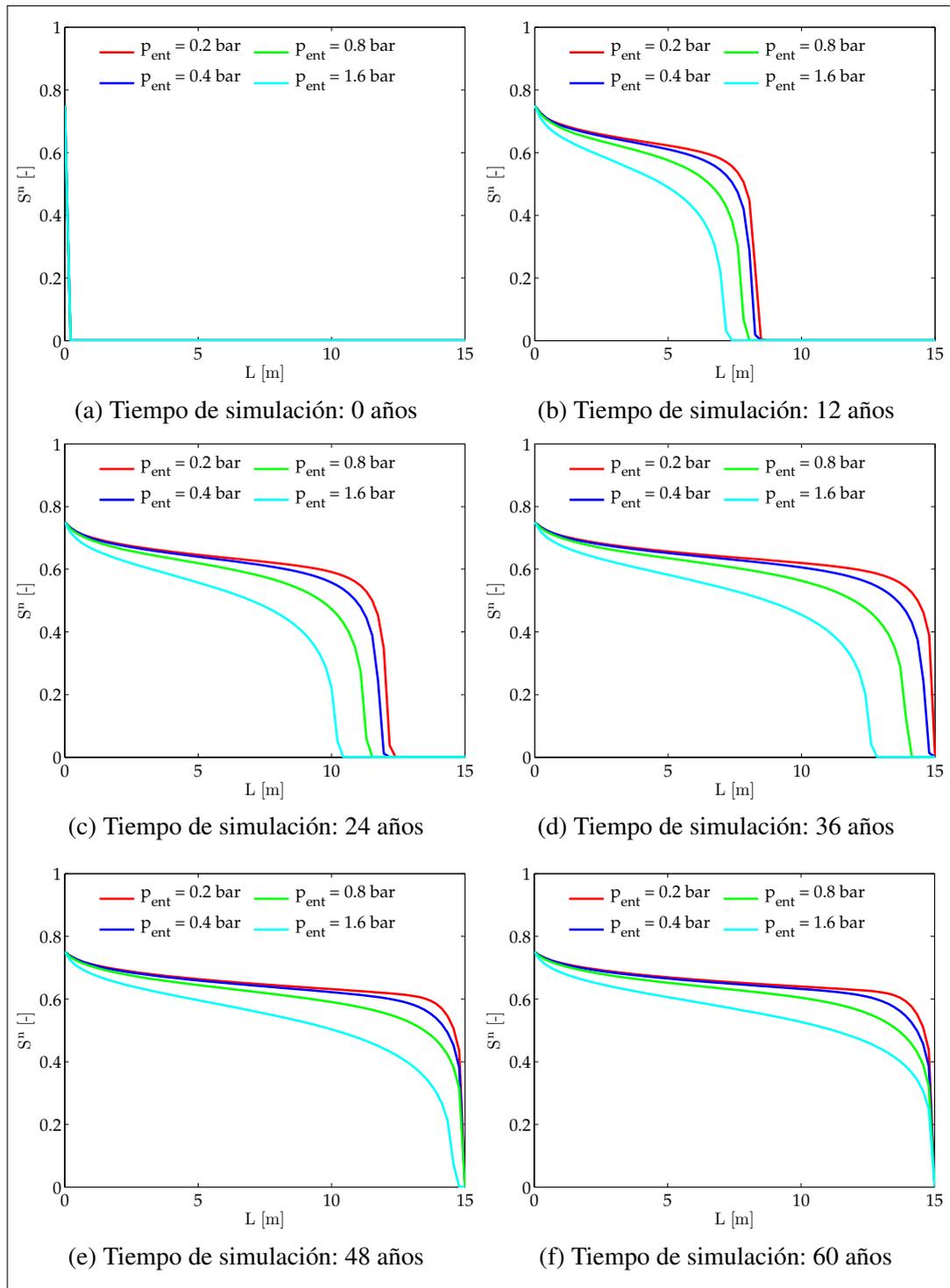


Figura 41. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de presión entrante.

Se puede decir que la fuerza motriz para el flujo del contaminante es superior, ya que el gradiente de presión efectivo también lo es. Por otro lado, los sistemas con valores

mayores de presión entrante muestran perfiles menos desarrollados ya que los requerimientos de presión entrante son mayores y los efectos advectivos se hacen menos evidentes.

4.2.7 Caso de estudio #10: Análisis de la incidencia de adoptar distintos valores porosidad en los perfiles de presión y saturación

En este caso de estudio se estudia la influencia que tiene el valor de la porosidad en la transmisión de la presión y en el desplazamiento del frente de saturación para el contaminante.

Resulta evidente que mientras mayor sea el valor de la porosidad, mayor será el volumen de fluido en el sistema (para un mismo volumen de acuífero). Las Figuras 42 y 43 muestran los perfiles de presión y saturación para cuatro valores de porosidad, $\phi = 0,10$, $\phi = 0,15$, $\phi = 0,20$ y $\phi = 0,25$.

Las condiciones de simulación son las mismas que las indicadas en la Tabla 8 a diferencia de que las dos condiciones de frontera son de Dirichlet y las porosidades son variables.

Al analizar la Figura 43 se puede observar que mientras menor sea la porosidad del medio más desplazado se encuentra el perfil de saturación. Como el gradiente de presión es el mismo para todos los casos, la fuerza que impulsa la invasión del contaminante también es la misma, sin embargo, tal y como se mencionó, el volumen de agua inicial existente en los sistemas con menor porosidad es claramente menor, esto explica el hecho de que el frente para el sistema con $\phi = 0,10$ sea el más desarrollado y el del frente con $\phi = 0,25$ el menos desarrollado.

Con respecto a los perfiles de presión se puede notar que existen ligeras diferencias, los sistemas con menor porosidad exhiben valores ligeramente superior a los sistemas con mayor porosidad, esto se debe a que la fracción sólida para los sistemas con menor porosidad es mayor, por ende, el canal para el transporte de presión es mayor, esta es otra forma de explicar por qué los frentes de saturación de sistemas con menor porosidad se desplazan con mayor velocidad. Los perfiles finales se pueden ver en la Figura 42f.

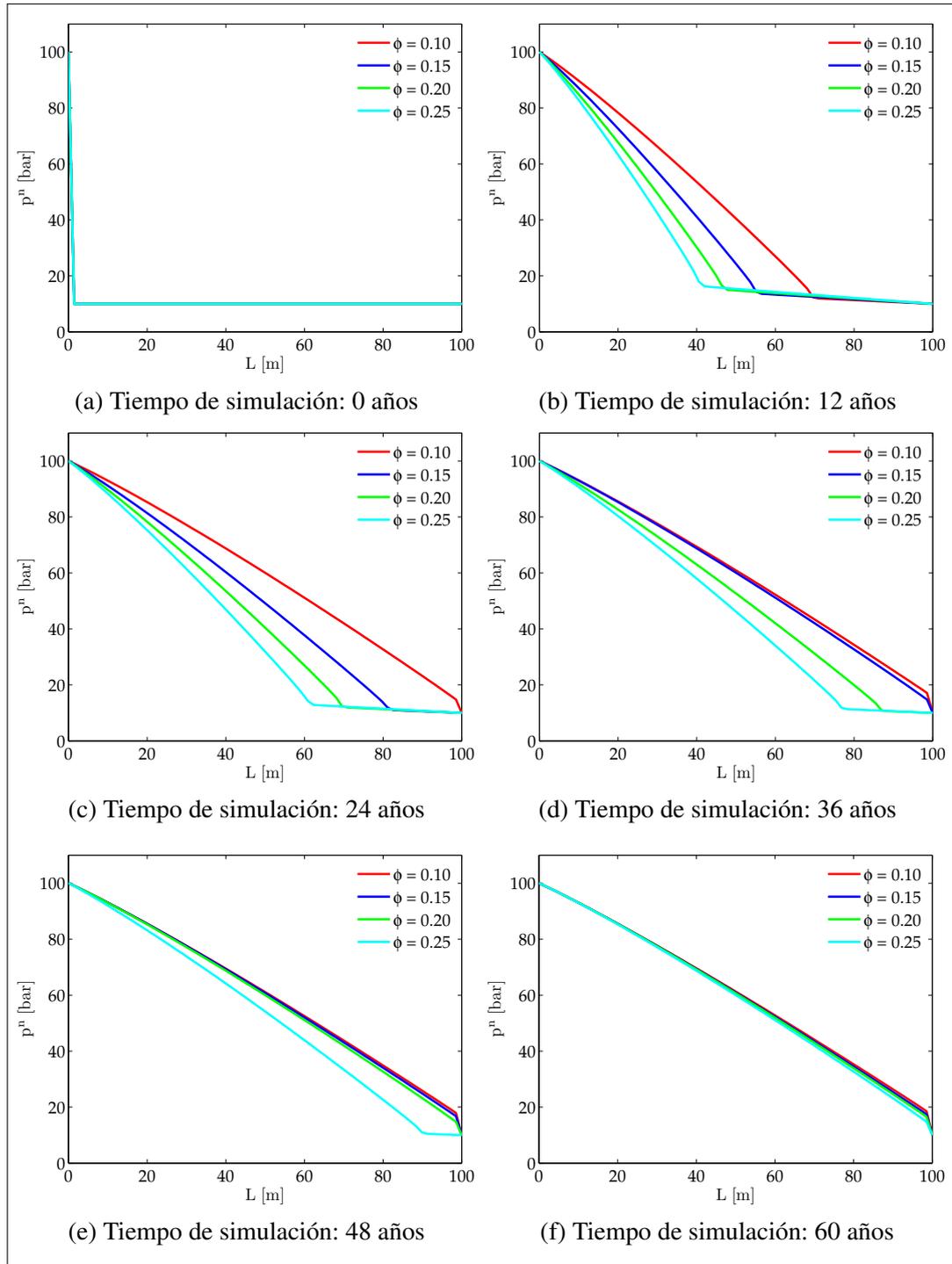


Figura 42. Perfiles de presión de contaminante para distintos valores de porosidad.

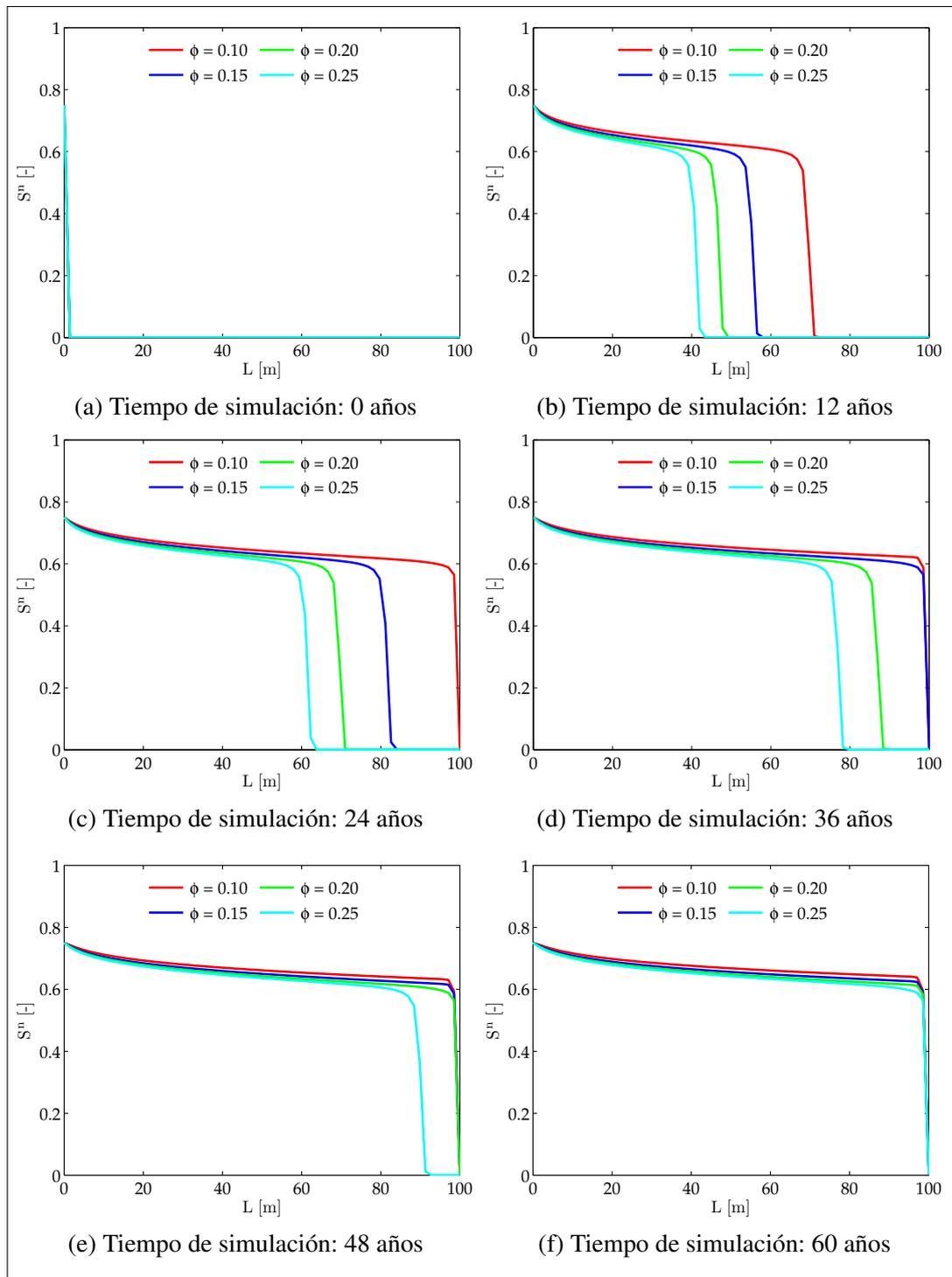


Figura 43. Perfiles de saturación de contaminante para distintos valores de porosidad.

Capítulo 5

5. CONCLUSIONES

El método de Crank-Nicolson ha sido el esquema numérico en diferencias finitas más atractivo para aplicarlo en el flujo monofásico de fluidos en medios porosos saturados.

El tiempo de establecimiento depende de manera lineal inversa con la conductividad hidráulica, lineal directa con el almacenaje específico y cuadrática directa con la longitud del sistema.

Los perfiles de carga hidráulica dependen en gran medida de los valores de conductividad hidráulica presentes en el medio, al considerar la heterogeneidad en el modelo se puede emular la estratificación en un acuífero.

El modelo de Buckley-Leverett es una herramienta útil para validar esquemas numéricos, sin embargo, al no contemplar los efectos de la presión capilar se debe reducir al mínimo el valor de la presión entrante en los esquemas numéricos. Contrastando los resultados del algoritmo ImpES para una malla refinada con mallas gruesas se corroboró que adoptando pocas celdas se obtienen malas aproximaciones, y que llegado a un punto, seguir refinando la malla no ofrece mejoras significativas.

Las condiciones de fronteras afectan en gran medida el desplazamiento de fluidos. Al considerar una condición de flujo impedido de contaminante a la salida del sistema se ha constatado la acumulación del mismo.

La transmisión de presión y la velocidad de propagación del frente de saturación dependen en gran medida de la permeabilidades. Sólo basta un par de celdas con baja permeabilidad para retrasar de manera significativa el flujo de contaminante. Al considerar permeabilidades aleatorias los perfiles de presión son irregulares, sin embargo los perfiles de saturación mantienen su forma característica.

Medios que presentan índices de distribución de tamaño de poros elevados favorecen el desplazamiento del frente, ya que el flujo de agua a través de la matriz porosa se ve potenciado. Un valor elevado de presión entrante se traduce en una reducción en la velocidad de propagación del frente de saturación debido a que el gradiente de presión “efectivo” es menor. Mientras más porosa sea una roca, más retrasado se verá el frente de saturación debido a que la masa de fluido para un mismo gradiente de presión es mucho mayor.

NOMENCLATURA

Acrónimos

ImPES *Implicit Pressure Explicit Saturation*

NAPL *Non Aqueous Phase Liquid*

REV *Representative Elementary Volume*

SS *Simultaneous Solution*

TPFA *Two Points Flux Approximation*

Símbolos Griegos

β Compresibilidad del agua [$M^{-1}LT^{-2}$]

λ^n Movilidad de la fase no mojada [–]

λ^t Movilidad total [–]

λ^w Movilidad de la fase mojada [–]

μ Viscosidad dinámica [$ML^{-1}T^{-1}$]

μ^n Viscosidad de la fase no mojada [$ML^{-1}T^{-1}$]

μ^w Viscosidad de la fase mojada [$ML^{-1}T^{-1}$]

ν Volumen específico [$M^{-1}L^3$]

Ω Potencial total específico [L^2T^{-2}]

ϕ Porosidad o fracción de huecos [–]

ψ Carga de presión [L]

ρ^n Densidad de la fase no mojada [ML^{-3}]

ρ^w Densidad del agua, Densidad de la fase mojada [ML^{-3}]

τ Índice de distribución de tamaño de poros [–]

ζ Carga de elevación [L]

Operadores/Funciones

$\bar{\chi}$	Promedio aritmético de χ entre dos puntos discretos
∇f	Operador Diferencia regresiva
Δf	Operador Diferencia progresiva
$\check{\chi}$	<i>Upstream weighting</i> de χ entre dos puntos discretos
δf	Operador Diferencia central
γ_l	Función de distribución para la fase líquida
γ_s	Función de distribución para la fase sólida
$\hat{\chi}$	Promedio armónico de χ evaluado entre dos puntos discretos
$\langle f \rangle_\alpha^\alpha$	Operador promediador de volumen intrínseco
$\langle f \rangle_\alpha$	Operador promediador de volumen
\bar{f}^α	Operador promediador de masa
$\tilde{\nabla} \chi$	Aproximación del gradiente de χ mediante TPFA

Símbolos Romanos

\ddot{k}^n	Permeabilidad normalizada de la fase no mojada [–]
\ddot{k}^w	Permeabilidad normalizada de la fase mojada [–]
\dot{m}^n	Flujo másico (término fuente) para la fase no mojada [MT ⁻¹]
\dot{m}^w	Flujo másico (término fuente) para la fase mojada [MT ⁻¹]
\underline{I}	Gradiente de carga hidráulica [–]
\underline{n}	Vector normal a la superficie [–]
A	Área de sección transversal [L ²]
C_v	Coefficiente de consolidación [M ⁻¹ LT ⁻²]
D	Diámetro de esferas uniformes aleatoriamente empacadas [L ²]
f^n	Flujo fraccional para la fase no mojada [–]
f^w	Flujo fraccional para la fase mojada [–]
F_n	Flujo neto de masa a través de un volumen de control [MT ⁻¹]
g	Aceleración de la gravedad [LT ⁻²]
K	Conductividad hidráulica [LT ⁻¹]
k	Permeabilidad intrínseca [L ²]

k^n	Permeabilidad efectiva de la fase no mojada [L^2]
k^w	Permeabilidad efectiva de la fase mojada [L^2]
k_r^n	Permeabilidad relativa de la fase no mojada [-]
k_r^w	Permeabilidad relativa de la fase mojada [-]
k_{rmax}^n	Máximo valor de permeabilidad relativa de la fase no mojada [-]
l	Longitud entre dos puntos de un sistema lineal [L]
M	Masa de una porción de fluido [M]
N	Factor adimensional de forma del grano [-]
p^a	Presión atmosférica [$ML^{-1}T^{-2}$]
p^c	Presión capilar [$ML^{-1}T^{-2}$]
p^n	Presión de la fase no mojada [LT^{-1}]
p^w	Presión de agua, presión de la fase mojada [$ML^{-1}T^{-2}$]
p_{ent}	Presión entrante [$ML^{-1}T^{-2}$]
Q	Flujo volumétrico [L^3T^{-1}]
S	Superficie de una porción de fluido [L^2]
S^n	Saturación de la fase no mojada [-]
S^w	Saturación de la fase mojada [-]
S^{iw}	Saturación residual para la fase mojada [-]
S^{or}	Saturación residual para la fase no mojada [-]
S^{we}	Saturación efectiva para la fase mojada [-]
S^{wf}	Saturación de la fase mojada al momento del <i>shock</i> [-]
S_s	Almacenaje específico [L^{-1}]
t_D	Tiempo adimensional [-]
u	Velocidad de Darcy [LT^{-1}]
u^n	Velocidad de Darcy para la fase no mojada [LT^{-1}]
u^t	Velocidad de Darcy total [LT^{-2}]
u^w	Velocidad de Darcy para la fase mojada [LT^{-1}]
V	Volumen total [L^3]
v	Velocidad lineal [LT^{-1}]

v_n	Velocidad del fluido normal a la superficie dS [LT^{-1}]
V_s	Volumen de sólidos [L^3]
V_v	Volumen de espacios huecos [L^3]
x_D	Posición adimensional [-]
z	Altura, elevación [L]

APÉNDICE A

Ecuaciones de conservación

A.1 Conservación de la masa de un fluido

A continuación se parafrasea lo expuesto por Pinder & Celia (2006) en su obra *Sub-surface Hydrology*. Se parte de un elemento de fluido de volumen V y superficie S . La forma del elemento es arbitraria, pero el volumen es pequeño en comparación con el cuerpo del fluido que circula por el sistema. La masa total de fluido M se obtiene sumando la masa en cada volumen incremental dV . Si la densidad del fluido está definida como la masa de fluido por volumen de fluido, entonces la masa de fluido en un volumen incremental dV es ρdV , y la masa en todo el volumen V es:

$$M = \int_V \rho dV. \quad (\text{A.1.1})$$

Se considera la posibilidad de que la masa se mueva fuera del volumen de control a través de una superficie S . Si la velocidad del fluido hacia afuera, perpendicular a la superficie incremental dS está dada por v_n , el flujo másico (hacia afuera) a través de la superficie incremental dS es $\rho v_n dS$. El flujo neto de masa que sale del volumen de control (atravesando la frontera) está dado por:

$$F_n = \int_S \rho v_n dS. \quad (\text{A.1.2})$$

Se puede relacionar la velocidad del fluido dirigida hacia afuera v_n con el vector unitario dirigido hacia afuera \underline{n} , a través del producto escalar $v_n = \underline{v} \cdot \underline{n}$, donde \underline{v} es la velocidad del fluido (véase Figura A.1.1). En ausencia de fuentes internas o sumideros de masa, la tasa de cambio en el volumen de control es balanceada por la cantidad de

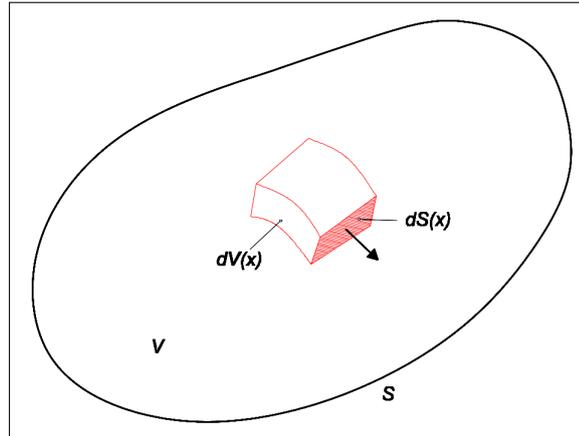


Figura A.1.1. Volumen de control V , volumen incremental dV , superficie del volumen de control S , superficie del volumen incremental dS .

Fuente: Adaptado de *Subsurface Hydrology* (p.165), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

movimiento neto a través de la superficie S . Por ello se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t} M = -F_n. \tag{A.1.3}$$

Vale la pena acotar que el lado derecho de la Ecuación (A.1.3) lleva un signo negativo ya que por definición el flujo neto de salida es negativo. Al sustituir las Ecuaciones (A.1.1) y (A.1.2) en la Ecuación (A.1.3) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_S \rho v_n dS, \tag{A.1.4}$$

donde el lado derecho de la Ecuación (A.1.4) puede escribirse como:

$$- \int_S \rho v_n dS = - \int_S (\rho \underline{v} \cdot \underline{n}) dS. \tag{A.1.5}$$

Es necesario aplicar el Teorema de Gauss al lado derecho de la Ecuación (A.1.5). Dicho teorema establece que:

$$\int_V (\nabla \cdot \underline{J}) dV = \int_S (\underline{J} \cdot \underline{n}) dS,$$

donde \underline{J} es una función vectorial, y \underline{n} es nuevamente el vector normal dirigido hacia afuera de la superficie S que envuelve al volumen V . En esencia, el Teorema de Gauss convierte la integral volumétrica de la divergencia de un campo vectorial en una integral superficial considerando el componente normal al vector \underline{J} sobre la superficie que encierra a V , esto es, S . Para este análisis el vector \underline{J} corresponde a $\rho \underline{v}$. Así, al aplicar

el Teorema de *Gauss* se obtiene:

$$-F_n = - \int_S (\rho \underline{v} \cdot \underline{n}) dS = - \int_V (\nabla \cdot \rho \underline{v}) dV, \quad (\text{A.1.6})$$

de esta manera Ecuación (A.1.4) puede escribirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_V (\nabla \cdot \rho \underline{v}) dV. \quad (\text{A.1.7})$$

Debido a que V no cambia con el tiempo (por construcción), el término $\partial/\partial t$ puede ingresar dentro de la integral del término de la izquierda de la Ecuación (A.1.7), así se obtiene:

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} \right) dV = 0. \quad (\text{A.1.8})$$

Al integrar la Ecuación (A.1.8) se obtiene la ecuación para la conservación de masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} = 0. \quad (\text{A.1.9})$$

A.2 Conservación de la masa de un fluido en un medio poroso

En el apartado anterior se dedujo la ecuación que describe la conservación de la masa de un fluido en cualquier punto del espacio. Ahora se extiende este concepto al flujo a través de un medio poroso. La deducción de la ecuación de conservación de masa de un fluido en un medio poroso fue desarrollada por Bear (1972). En este apartado se presentan los pasos secuenciales para llegar a ella. En la Figura A.2.2 se presenta una muestra arbitraria de suelo compuesto de un material con un rango de tamaño de granos variable.

Se empieza dibujando un círculo con su centro localizado en 1 (para que el análisis sea congruente en tres dimensiones el círculo es reemplazado por un cilindro). Por ahora se asume que el volumen utilizado para definir la porosidad es suficientemente representativo del material en la vecindad del punto 1, por ende el volumen corresponde a un volumen representativo elemental o REV por sus siglas en inglés. A continuación, se mide la porosidad del REV con centro en 1, obteniendo un valor ϕ_1 . Como este análisis es hipotético, luego de medir la porosidad en la muestra 1 se la retorna a su posición original.

Ahora se mueve el cilindro a la posición identificada con el centro en 2 y se repite el análisis obteniendo una porosidad ϕ_2 . Se repone la muestra y se repite el proceso

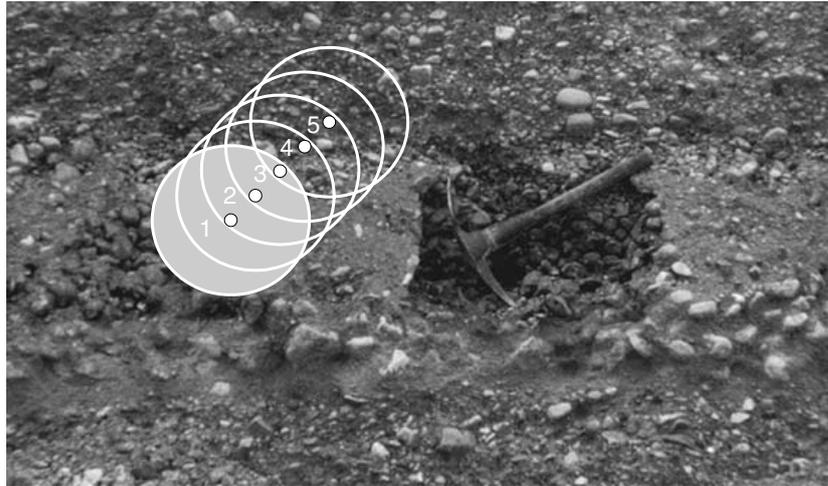


Figura A.2.2. Valores representativos elementales (REV's) utilizados para evaluar la porosidad

Fuente: *Subsurface Hydrology* (p.168), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

con los círculos en 3, 4 y 5. Aunque es evidente que el material mostrado en la Figura A.2.2 es heterogéneo, cuando el REV se desplaza sólo ligeramente, el valor de la porosidad no cambia significativamente. En el límite de muy pequeños desplazamientos del centroide del REV, la curva resultante de la porosidad como función de la localidad espacial es suave. Esta es la naturaleza del volumen promediado y es una de las razones para usar el concepto del REV para representar la porosidad. La suavidad de la curva es importante ya que permite que la función que representa la porosidad pueda ser derivada matemáticamente. Dicho esto, se puede decir que tomando promedios móviles de variables claves (como porosidad) se puede trabajar con funciones continuas que son convenientes desde una perspectiva matemática.

Pero, ¿qué sucederá si se reduce el tamaño del REV? Eventualmente el volumen de control contendrá a un espacio hueco (poro) o a un sólido, haciendo que la definición de porosidad carezca de sentido. La muestra debería contener una cantidad de poros y sólidos estadísticamente representativa. Cuando son seleccionadas muestras de tamaño muy pequeño, la determinación de la porosidad es bastante errática, de hecho, cuando el volumen del REV tiende a 0, la porosidad se vuelve o 1 ó 0, dependiendo de si el REV está ocupado por un espacio vacío o un grano. Esto sugiere que, a medida que se seleccionan muestras de mayor tamaño la estimación del valor de la porosidad se estabiliza, sin embargo, si el REV es demasiado grande podría darse el caso de que la escala de heterogeneidad más grande enmascare la variabilidad espacial de la pequeña escala (que también debe contribuir a la estimación de la porosidad). Para una ecuación como la de conservación de masa, el REV debe ser de un tamaño tal que

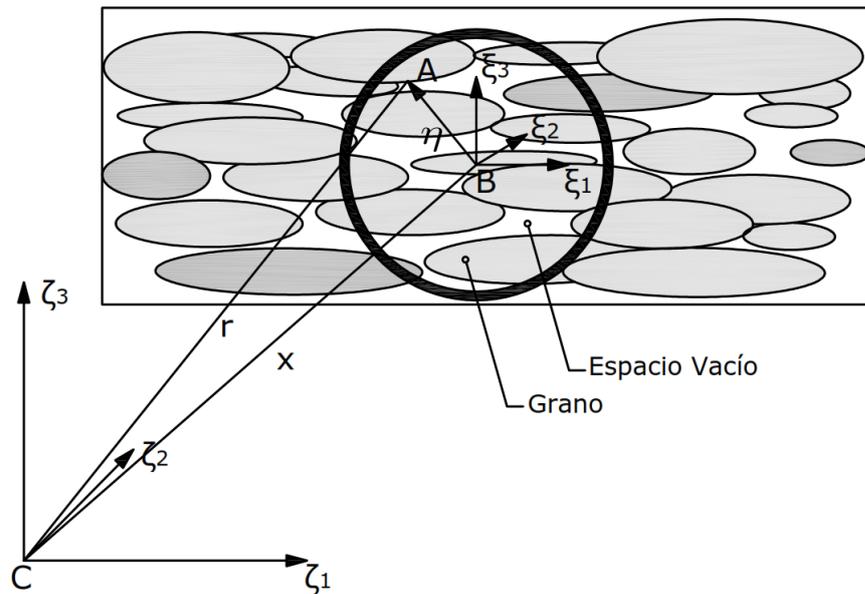


Figura A.2.3. Relación entre las coordenadas locales ξ y las coordenadas globales ζ . El círculo es el REV y los óvalos representan un tipo de sólido
 Fuente: Adaptado de *Subsurface Hydrology* (p.170), por G. F. Pinder y M. A. Celia, 2006.

todos los parámetros físicos se encuentren correctamente representados.

Para iniciar el análisis será de ayuda considerar el esquema de la Figura A.2.3. El círculo es el REV y el punto B es el centro del REV.

Hasta este punto no se ha considerado el problema de determinar en qué fase un punto dado (por decir, A de la Figura A.2.3) se encuentra. Puede encontrarse en la fase fluida o en la fase sólida. Se conoce su ubicación con respecto al sistema coordenado global ζ , pero se desconoce si ese punto en particular se encuentra en la fase sólida o en la fase fluida. Para resolver esta dificultad, se introduce un concepto muy importante, la *función de distribución de fase* $\gamma_\alpha(\underline{r}, t)$ ¹². El subíndice α identifica a la fase con la función de distribución de fase, ésta puede ser la fase sólida s o la líquida l . La función de distribución de fase es binaria, es decir, puede adoptar valores 1 ó 0. Por ejemplo, si el punto de interés es (\underline{r}_0, t_0) , y éste se encuentra en la fase sólida, entonces $\gamma_s(\underline{r}_0, t_0) = 1$. Como el sólido y el líquido no pueden ocupar un mismo punto en el espacio $\gamma_l(\underline{r}_0, t_0) = 0$. Si por otro lado, el punto de interés cae en la fase líquida, entonces

¹²Se permite a $\gamma_\alpha(\underline{r}, t)$ ser una función del tiempo ya que su estado puede cambiar conforme varíe el tiempo. Ejemplo: el agua líquida puede congelarse y cambiar de la fase líquida a la sólida.

$\gamma_l(\underline{r}_0, t_0) = 1$ y $\gamma_s(\underline{r}_0, t_0) = 0$. La definición formal se presenta a continuación:

$$\gamma_l(\underline{r}, t) = \gamma_l(\underline{x} + \underline{\eta}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{r} \in dV_l \\ 0 & \text{si } \underline{r} \in dV_s \end{cases}, \quad (\text{A.2.10})$$

donde \underline{r} está definido como la suma vectorial de \underline{x} y $\underline{\eta}$.

Antes de ahondar en la derivación de la ecuación de conservación de masa en medios porosos se presentan operadores matemáticos de utilidad. El primer operador a definir es el *operador promediador de volumen*, este operador integra el volumen correspondiente a la fase α en el REV y lo divide entre el volumen del REV:

$$\langle f \rangle_\alpha(\underline{x}, t) \equiv \frac{1}{dV} \int_{dV} f(\underline{x} + \underline{\eta}, t) \gamma_\alpha(\underline{x} + \underline{\eta}, t) dv_\xi. \quad (\text{A.2.11})$$

El segundo operador es el *operador promediador de masa*, la función de este operador es integrar la masa correspondiente a la fase α en el REV y dividirla entre la masa de la fase α en el REV:

$$\begin{aligned} \bar{f}^\alpha(\underline{x}, t) &= \frac{1}{dV \langle \rho \rangle_\alpha(\underline{x}, t)} \int_{dV} \rho(\underline{x} + \underline{\eta}, t) f(\underline{x} + \underline{\eta}, t) \gamma_\alpha(\underline{x} + \underline{\eta}, t) dv_\xi. \\ &= \frac{\int_{dV} \rho(\underline{x} + \underline{\eta}, t) f(\underline{x} + \underline{\eta}, t) \gamma_\alpha(\underline{x} + \underline{\eta}, t) dv_\xi}{\int_{dV} \rho(\underline{x} + \underline{\eta}, t) \gamma_\alpha(\underline{x} + \underline{\eta}, t) dv_\xi}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.12})$$

Y por último, el operador promediador de volumen intrínseco, que integra el volumen de la fase α en el REV y lo divide entre el volumen de la fase α en el REV dV_α :

$$\langle f \rangle_\alpha^\alpha(\underline{x}, t) \equiv \frac{1}{dV_\alpha} \int_{dV} f(\underline{x} + \underline{\eta}, t) \gamma_\alpha(\underline{x} + \underline{\eta}, t) dv_\xi. \quad (\text{A.2.13})$$

Se puede verificar el cumplimiento de las siguientes ecuaciones que relacionan los operadores promediadores:

$$\langle f \rangle_\alpha(\underline{x}, t) = n_\alpha \langle f \rangle_\alpha^\alpha(\underline{x}, t), \quad (\text{A.2.14})$$

$$\langle \rho f \rangle_\alpha(\underline{x}, t) = \langle \rho \rangle_\alpha(\underline{x}, t) \bar{f}^\alpha(\underline{x}, t), \quad (\text{A.2.15})$$

donde $n_\alpha \equiv dV_\alpha/dV$ y es llamado *fracción de volumen de la fase α* .

Si se aplica el operador promediador de volumen a la ecuación de conservación de

masa (Ecuación (A.1.9)) se obtiene:

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle_{\alpha} + \langle \nabla \cdot \rho \underline{v} \rangle_{\alpha} = 0. \quad (\text{A.2.16})$$

El primer término de la Ecuación (A.2.16) puede escribirse como:

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle_{\alpha} - \frac{1}{dV} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{dA^{\alpha\beta}} \rho \underline{w}^{\alpha\beta} \cdot \underline{n}^{\alpha\beta} da, \quad (\text{A.2.17})$$

donde $dA^{\alpha\beta}$ es el área interfacial entre las fases α y β , $\underline{w}^{\alpha\beta}$ es la velocidad de interfase entre las fases α y β y $\underline{n}^{\alpha\beta}$ es el vector unitario normal a $dA^{\alpha\beta}$. El segundo término de la Ecuación (A.2.16) puede escribirse como:

$$\langle \nabla \cdot \rho \underline{v} \rangle_{\alpha} = \nabla \cdot \langle \rho \underline{v} \rangle_{\alpha} + \frac{1}{dV} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{dA^{\alpha\beta}} \rho \underline{v} \cdot \underline{n}^{\alpha\beta} da. \quad (\text{A.2.18})$$

Sumando las Ecuaciones (A.2.17) y (A.2.18) y ordenando:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle_{\alpha} + \nabla \cdot \langle \rho \underline{v} \rangle_{\alpha} = \frac{1}{dV} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{dA^{\alpha\beta}} \rho (\underline{w}^{\alpha\beta} - \underline{v}) \cdot \underline{n}^{\alpha\beta} da.$$

Aplicando la relación de la Ecuación (A.2.14) a $\langle \rho \rangle_{\alpha}$ y la relación de la Ecuación (A.2.15) a $\langle \rho \underline{v} \rangle_{\alpha}$, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\alpha} \langle \rho \rangle_{\alpha}^{\alpha} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle_{\alpha} \bar{\underline{v}}^{\alpha}) = \frac{1}{dV} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{dA^{\alpha\beta}} \rho (\underline{w}^{\alpha\beta} - \underline{v}) \cdot \underline{n}^{\alpha\beta} da.$$

Aplicando nuevamente la relación de la Ecuación (A.2.14) a $\langle \rho \rangle_{\alpha}$ se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\alpha} \langle \rho \rangle_{\alpha}^{\alpha} + \nabla \cdot (n_{\alpha} \langle \rho \rangle_{\alpha}^{\alpha} \bar{\underline{v}}^{\alpha}) = \frac{1}{dV} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{dA^{\alpha\beta}} \rho (\underline{w}^{\alpha\beta} - \underline{v}) \cdot \underline{n}^{\alpha\beta} da = F^{\alpha}, \quad (\text{A.2.19})$$

donde F^{α} es el término que considera el cambio de fase del fluido en el medio poroso. Si no se considera la posibilidad de que ocurra un cambio de fase, la Ecuación (A.2.19) queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{\alpha} \langle \rho \rangle_{\alpha}^{\alpha} + \nabla \cdot (n_{\alpha} \langle \rho \rangle_{\alpha}^{\alpha} \bar{\underline{v}}^{\alpha}) = 0. \quad (\text{A.2.20})$$

Si el medio poroso se encuentra saturado $n_{\alpha} = \phi_{\alpha}$ y la fase α corresponde a la del

líquido, la Ecuación (A.2.20) se puede reescribir del siguiente modo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi \langle \rho \rangle_l + \nabla \cdot \left(\phi \langle \rho \rangle_l \underline{v}^l \right) = 0 \quad (\text{A.2.21})$$

La Ecuación (A.2.21) es la forma generalmente aceptada de la *conservación de la masa de un fluido para un único fluido ocupando el medio poroso*.

La Ecuación (A.2.21) es similar a la Ecuación (A.1.9), esta similitud es de esperarse ya que ambas representan el concepto de la conservación de la masa. La Ecuación (A.2.21) escrita en notación simplificada se presenta a continuación:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho\underline{v}) = 0. \quad (\text{A.2.22})$$

APÉNDICE B

Códigos fuente escritos en C++

B.1 Códigos para el flujo monofásico

B.1.1 Solución Analítica - Medio Homogéneo

```
1  /*
2  * Simulation of 1D-Transient-Isotropic-Homogenous Groundwater
3  * Flow Equation by Analytical Solution .
4  * Author: Jhabriel Varela
5  * E-mail: jhabriel@gmail.com
6  * Applied and Scientific Computation Laboratory
7  * Date: July/2013
8  * Asunción — Paraguay
9  */
11 #include <iostream>
12 #include <armadillo> // Linear algebra library
13 #include <cmath>
14 #include <fstream>
15
16 using namespace std;
17 using namespace arma; // Linear algebra namespace
18
19 int main()
20 {
21     // Variables declarations
22     // System
23     double L = 1000.0;           // System Length [m]
24     double time = 0;            // Simulation Time [s]
25     // Physics parameters
26     double K = 1.00E-04;        // Hydraulic Conductivity [m/s]
27     double Ss = 9.95E-05;       // Specific Storage [1/m]
28     // Boundary conditions
29     double h_L = 100.0;         // Left Boundary [m]
30     double h_R = 0;            // Right Boundary [m]
31     // Auxiliar parameters
32     double KS_s = 0;
33     double A = 0;
34     double B = 0;
```

```

35 double C = 0;
   //Independent variables
37 double t = 0; // Time [s]
   //Dependent variable
39 double h = 0; // Hydraulic head [m]
   //Constants
41 double pi = 3.141592654;
   //Infinity sum counter
43 int n = 0;
   //Number of position points
45 int xPoints = 0;

47
   //Determination of K/Ss
49 KS_s = K/Ss;

51 cout << "Input the number of position points: ";
   cin >> xPoints;

53
   double xStep = L / (xPoints-1); // Calculus of spacial step size
55
   mat Pos(xPoints,1); Pos.fill(0); // Let's create the position vector
57
   for (int i=0; i <= xPoints-1; i++){
59     Pos(i) = i*xStep;}

61 cout << "Input the simulation time in seconds: ";
   cin >> t;

63
   ofstream hydHead; // Create the .txt
65 hydHead.open ("analytical.txt"); // Open the .txt

67 cout << "The sim. time is: " << t << " sec." << endl;

69 for (int i=0; i <= xPoints-1; i++)
   {
71     A = h_L * (1.0 - (Pos(i)/L));
       B = (2.0 * h_L)/pi;

73
       for (n = 1; n <= 100000; n++)
75         {
           C = C + (1.0/n)*double (exp((-KS_s*n*n*pi*pi*t)/(L*L)))
77           * double (sin(n*(pi/L)*Pos(i)));
         }

79
       h = A - B * C;
81     cout << h << endl; // Print in terminal
       hydHead << h << endl; // Print in .txt
83     h=0; A=0; B=0; C=0; // Let's re-initialize
       }

85
   hydHead.close(); // Close the .txt
87
   return 0;
89 }

```

B.1.2 Solución Numérica - Método Explícito - Medio Homogéneo

```

1  /*
2  * Simulation of 1D-Transient-Isotropic-Homogenous Groundwater
3  * Flow Equation by Explicit Finite Difference Method.
4  * Author: Jhabriel Varela
5  * E-mail: jhabriel@gmail.com
6  * National University of Asunción
7  * Applied & Scientific Computation Laboratory
8  * Date: July/2013
9  * Asunción — Paraguay
10 */
11
12 #include <iostream>
13 #include <armadillo>           // Linear Algebra library
14 #include <cmath>
15
16 using namespace std;
17 using namespace arma;         // Linear Algebra namespace
18
19 int main()
20 {
21     // Constants declarations
22
23     // System parameters
24     double length= 1000.0;     // System length [m]
25     double time;              // Simulation time [s]
26     // Nodes
27     int nOfExtNod;            // Total number of nodes [-]
28     int nOfIntNod;           // Internal nodes [-]
29     int nOfTimeNod;          // Time levels for time [-]
30     // Counters
31     int i = 0;                // Position counter [-]
32     int k = 0;                // Time counter [-]
33     // Physical Parameters
34     double Ss = 9.95E-05;     // Specific Storage [1/m]
35     double K = 1.00E-04;     // Hydraulic Conductivity [m/s]
36     // Time
37     double t = 0;            // Inicialización del conteo del tiempo
38     // Steps
39     double dt;                // Step size for time [s]
40     double dz;                // Step size for position [m]
41     // Boundary Conditions
42     double L = 100.0;         // Right boundary condition
43     double R = 0;             // Left boundary condition
44     // Auxiliar variables
45     double A, B, C;
46
47     // Number of nodes
48     cout << "Input the number of nodes for space: ";
49     cin >> nOfExtNod;
50     nOfIntNod = nOfExtNod - 2;
51     cout << "The number of internal nodes is:" << nOfIntNod << endl;
52     mat matnOfPoints(1,1);     matnOfPoints(0) = nOfExtNod;
53     matnOfPoints.save("nOfPoints.txt", raw_ascii);
54
55     // Step size for position

```

```
dx = length / (nOfExtNod - 1);
57 cout << "The spatial step size is: " << dx << endl;
mat matPos(1,1);          matPos(0) = dx;
59 matPos.save("dx.txt", raw_ascii);

61 // Step size for time
cout << "Input the simulation time [s]: ";
63 cin >> time;
mat matsimTime(1,1);      matsimTime(0) = time;
65 matsimTime.save("simTime.txt", raw_ascii);
cout << "Input the step size for the time [s]: ";
67 cin >> dt;              nOfTimeNod = time / dt;
cout << "The number of time levels is: " << nOfTimeNod << endl;
69

// Auxiliar Variables
71 A = K/(dz*dz);
B = Ss/dt;
73 C = A/B;

75 // Initialization of hydraulic head
mat H(nOfExtNod,1); H.fill(0);
77

ofstream file1; file1.open("explicit.txt");
79 ofstream file2; file2.open("time.txt");

81 for (k = 0; k <= nOfTimeNod - 1; k++)
{
83     if (k == 0){
        file2 << t << endl;
85     }
    t += dt;
87     cout << "The simulation time is: " << t << "s" << endl;
    file2 << t << endl;;
89     for (i = 0; i <= nOfExtNod - 1; i++)
    {
91         if (i == 0)
            H(i) = L;
93         else if ( i == nOfExtNod - 1)
            H(i) = R;
95         else
            H(i) = H(i) + C*(H(i+1) - 2*H(i) + H(i-1));
97     }
    file1 << H;
99     H.print(":");
}

101
file2.close();
103 file1.close();

105 return 0;
}
```

B.1.3 Solución Numérica - Método Implícito - Medio Homogéneo

```

2  /*
3  * Simulation of 1D-Transient-Isotropic-Homogenous Groundwater
4  * Flow Equation by Implicit Finite Difference Method.
5  * Author: Jhabriel Varela
6  * E-mail: jhabriel@gmail.com
7  * National University of Asunción
8  * Applied & Scientific Computation Laboratory
9  * Date: July/2013
10 * Asunción — Paraguay
11 */
12 #include <iostream>
13 #include <armadillo>           // Linear algebra library
14 #include <cmath>
15
16 using namespace std;
17 using namespace arma;       // Linear algebra library
18
19 int main()
20 {
21     // Variable Declarations
22     // System
23     double length= 1000.0;    // System Length [m]
24     double time;             // Simulation Time [s]
25     // Nodes
26     int nOfExtNod;           // Number of nodes [-]
27     int nOfIntNod;           // Number of internal nodes [-]
28     int nOfTimeNod;         // Number of time levels [-]
29     // Counters
30     int u=0;                 // Counter for create the answer vector
31     int k=0;                 // Counter for time loop
32     int i=0;                 // Counter for position loop
33     int a=0;                 // Rows index for coefficient matrix
34     int b=0;                 // Column index for coefficient matrix
35     //Parámetros Físicos
36     double Ss = 9.95E-05;    // Specific Storage [1/m]
37     double K = 1.00E-04;    // Hydraulic Conductivity [m/s]
38     // Steps
39     double t = 0;           // Time initialitazion
40     // Steps
41     double dt;              // Step size for time [s]
42     double dz;              // Step size for position [m]
43     // Auxiliar variables
44     double A,B,C,D;
45
46     // Number of nodes
47     cout << "Input the number of nodes for space: ";
48     cin >> nOfExtNod;
49     nOfIntNod = nOfExtNod - 2;
50     cout << "The number of internal nodes is: " << nOfIntNod << endl;
51
52     // Step size for position
53     dx = length / (nOfExtNod - 1);
54     cout << "The spatial step size is: " << dx << endl;

```

```

56 // Step size for time
cout << "Input the simulation time [s]: ";
58 cin >> time;
cout << "Input the step size for time [s]: ";
60 cin >> dt;
nOfTimeNod = time / dt;
62 cout << "The number of time levels is: " << nOfTimeNod << endl;

64 // Auxiliar parameters
A = K / (dz*dz);
66 B = Ss / dt;
C = -(2*A+B);
68 D = -B;

70 // Initialization of matrix and vectors
mat M(nOfIntNod, nOfIntNod); M.fill(0); // Coefficient matrix
72 mat H(nOfIntNod, 1); H.fill(0); // Unknown vector
mat L(nOfIntNod, 1); L.fill(100.0); // Left boundary
74 mat R(nOfIntNod, 1); R.fill(0); // Right boundary
mat N(nOfIntNod, 1); N.fill(0); // Constants vector
76 mat ANS(nOfExtNod, 1); ANS.fill(0); // Vector for plotting

78 ofstream file1;
file1.open ("implicit.txt");
80
82 // Coefficient matrix
84 for (a = 0; a <= nOfIntNod - 1; a++)
{
86     for (b = 0; b <= nOfIntNod - 1; b++)
    {
88         if (a == b)
            M(a,b) = C;
90         else if (abs(a-b) == 1)
            M(a,b) = A;
92         else
            M(a,b) = 0;
    }
94 }

96 // ITERATION LOOP

98 for (k = 0; k <= nOfTimeNod -1; k++)
{
100     t += dt;
    cout << "The simulation time is: " << t << "s" << endl;
102
104     for (i =0; i <= nOfIntNod - 1; i++)
    {
106         // Constants vector
        if (i == 0)
            N(i) = D * H(i) - A * L(i);
108         else if (i == nOfIntNod-1)
            N(i) = D * H(i) - A * R(i);
110         else
            N(i) = D * H(i);
112

```

```
114     // Solving the linear system by LU
      H = solve(M,N);
    }
116
    // Loop for building the answer vector in order to plot
118
    for (u = 0; u <= nOfExtNod - 1; u++)
120    {
      if (u == 0)
122        ANS(u) = L(0);
      else if (u == nOfExtNod - 1)
124        ANS(u) = R(0);
      else
126        ANS(u) = H(u-1);
    }
128
    file1 << ANS;
130 }
132 file1.close();
134 return 0;
}
```

B.1.4 Solución Numérica - Método Crank-Nicolson - Medio Homogéneo

```

1  /*
2   * Simulation of 1D-Transient-Isotropic-Homogenous Groundwater
3   * Flow Equation by Crank-Nicolson Finite Difference Method.
4   * Author: Jhabriel Varela
5   * E-mail: jhabriel@gmail.com
6   * National University of Asunción
7   * Applied & Scientific Computation Laboratory
8   * Date: July/2013
9   * Asunción — Paraguay
10  */
11
12  #include <iostream>
13  #include <armadillo>           // Linear algebra library
14  #include <cmath>
15
16  using namespace std;
17  using namespace arma;       // Linear algebra namespace
18
19  int main()
20  {
21      // Variable declarations
22      // Sytem
23      double length = 1000.0;   // Length system [m]
24      double time;             // Simulation time [s]
25      // Nodes
26      int nOfExtNod;           // Number of nodes
27      int nOfIntNod;           // Number of internal nodes
28      int nOfTimeNod;          // Number of time levels
29      // Counters
30      int u=0;                 // Counter for answer vector
31      int k=0;                 // Counter for time
32      int i=0;                 // Counter for position
33      int a=0;                 // Coefficient matrix row index
34      int b=0;                 // Coefficient matrix column index
35      // Physical parameters
36      double Ss = 9.95E-05;    // Specific Storage [1/m]
37      double K = 1.00E-04;     // Hydraulic Conductivity [m/s]
38      // Time
39      double t = 0;           // Time initialization
40      // Steps
41      double dt;              // Time step size [s]
42      double dz;              // Position step size [m]
43      // Auxiliar Parameters
44      double A,B,C;
45
46      // Number of nodes
47      cout << "Input the number of nodes for space: ";
48      cin >> nOfExtNod;
49      nOfIntNod = nOfExtNod - 2;
50      cout << "The number of internal nodes is: " << nOfIntNod << endl;
51
52      // Spatial step size
53      dz = length / (nOfExtNod - 1);
54      cout << "The step size for poosition is: " << dz << endl;
55

```

```

57 // Step size for time
58 cout << "Input the simulation time [s]: ";
59 cin >> time;
60 cout << "Input the step size for the time [s]: ";
61 cin >> dt;
62 nOfTimeNod = time / dt;
63 cout << "The number of time levels is: " << nOfTimeNod << endl;
64
65 // Auxiliar parameters
66 A = (2*Ss*dz*dz)/(dt*K);
67 B = -2*A;
68 C = -2*A;
69
70 // Matrix and vector initialization
71 mat M(nOfIntNod, nOfIntNod); M.fill(0); // Coefficient matrix
72 mat H(nOfIntNod, 1); H.fill(0); // Unknown vector
73 mat L(nOfIntNod, 1); L.fill(100.0); // Left Boundary vector
74 mat R(nOfIntNod, 1); R.fill(0); // Right Boundary vector
75 mat N(nOfIntNod, 1); N.fill(0); // Constants vector
76 mat ANS(nOfExtNod, 1); ANS.fill(0); // Answer vector
77
78 ofstream file1;
79 file1.open("crank.txt");
80
81 // Coefficient matrix
82 for (a = 0; a <= nOfIntNod - 1; a++)
83 {
84     for (b = 0; b <= nOfIntNod - 1; b++)
85     {
86         if (a == b)
87             M(a,b) = B;
88         else if (abs(a-b) == 1)
89             M(a,b) = 1;
90         else
91             M(a,b) = 0;
92     }
93 }
94
95 // ITERATION LOOP
96
97 for (k = 0; k <= nOfTimeNod - 1; k++)
98 {
99     t += dt;
100     cout << "Tiempo de simulación: " << t << "s" << endl;
101
102     for (i = 0; i <= nOfIntNod - 1; i++)
103     {
104         // Constant vector
105         if (i == 0)
106             N(i) = -C*H(i) - H(i+1) - 2.0*L(0);
107         else if (i == nOfIntNod - 1)
108             N(i) = -H(i-1) - C*H(i) - 2.0*R(0);
109         else
110             N(i) = -H(i-1) - C*H(i) - H(i+1);
111     }
112
113     // Solving the linear system via LU

```

```
113     H = solve(M,N);
115     // Loop for building the answer vector
117     for (u = 0; u <= nOfExtNod - 1; u++)
118     {
119         if (u == 0)
120             ANS(u) = L(0);
121         else if (u == nOfExtNod - 1)
122             ANS(u) = R(0);
123         else
124             ANS(u) = H(u-1);
125     }
126     file1 << ANS;
127 }
129 ANS.save("HIMP.txt", raw_ascii);
131 file1.close();
133 return 0;
}
```

B.1.5 Solución Numérica - Método Crank-Nicolson - Medio Heterogéneo

```

2  /*
3  * Simulation of 1D-Transient-Heterogeneous Groundwater
4  * Flow Equation by Crank-Nicolson Method.
5  * Author: Jhabriel Varela
6  * E-mail: jhabriel@gmail.com
7  * National University of Asunción
8  * Applied & Scientific Computation Laboratory
9  * Date: August/2013
10 * Asunción — Paraguay
11 */
12 #include <iostream>
13 #include <armadillo>           // Linear algebra library
14 #include <cmath>
15
16 using namespace std;
17 using namespace arma;         // Linear algebra library
18
19 // Calculus of  $K_{i+1/2}$ 
20 double CondMen(int contador, int nOfNod, double paso, mat vectorK)
21 {
22     double Kmenor = 0;
23     Kmenor = (2*paso) / (paso/vectorK(contador-1) +
24         paso/vectorK(contador));
25     return Kmenor;
26 }
27
28 // Calculus of  $K_{i-1/2}$ 
29 double CondMas(int contador, int nOfNod, double paso, mat vectorK)
30 {
31     double Kmayor = 0;
32     Kmayor = (2*paso) / (paso/vectorK(contador) +
33         paso/vectorK(contador+1));
34     return Kmayor;
35 }
36
37 // Calculus of average specific storage
38 double speSto (double solid_comp, double porosity, double water_comp,
39     double water_dens)
40 {
41     const double g = 9.81; // [m/s^2]
42     double Ss = water_dens*g*(solid_comp + porosity*water_comp);
43     return Ss;
44 }
45
46 int main()
47 {
48     // Variable declarations
49
50     // System
51     double L = 1000;           // System Length [m]
52     // Position variables
53     int i = 0;                 // Counter for position
54     double z = 0;              // Position [m]
55     int nOfNod;                // Number of nodes for position

```

```

56 double dz; // Step size por position [m]
// Time variables
58 int k; // Counter for time
int nOfTimeNod; // Number of nodes for time
60 double time; // Simulation time [s]
double t; // Time [s]
62 double dt; // Step size for time [s]
// Coefficient matrix index
64 int m=0; // Row index
int n=0; // Column index
66 // Physical parameters
double KGravel = 1.52E-02; // Hydraulic Cond. Gravel [m/s]
68 double KSand = 2.50E-04; // Hydraulic Cond. Sand [m/s]
double KClay = 2.01E-09; // Hydraulic Cond. Clay [m/s]
70 double compGravel = 1E-09; // Compressibility Gravel [Pa^-1]
double compSand = 1E-08; // Compressibility Sand [Pa^-1]
72 double compClay = 1E-07; // Compressibility Clay [Pa^-1]
double compWater = 4.4E-10; // Compressibility Water [Pa^-1]
74 double porGravel = .30; // Porosity Gravel [-]
double porSand = .39; // Porosity Sand [-]
76 double porClay = .45; // Porosity Clay [-]
double denWater = 1000; // Density Water [kg/m^3]
78 double Kimasmed = 0; // Harmonic K+1/2
double Kimenmed = 0; // Harmonic K-1/2
80 // Auxiliiar parameters
double A=0, B=0, C=0, D=0, E=0;
82 // Boundary conditions
double Left = 100; // Left Boundary [m]
84 double Right = 0.0; // Right Boundary [m]
// Counter for answer vector
86 int q=0;

88 // Specific Storage
double SsGravel = speSto(compGravel, porGravel, compWater, denWater);
90 double SsSand = speSto(compSand, porSand, compWater, denWater);
double SsClay = speSto(compClay, porClay, compWater, denWater);
92 double Ss = SsGravel;
ofstream file0; file0.open("Ss.txt"); file0 << Ss; file0.close();
94
ofstream file1;
96 file1.open("Hyd.txt");

98 // Number of nodes
cout << "Input the number of nodes for space: ";
100 cin >> nOfNod;
dz = L/(nOfNod - 1);
102 cout << "The spatial step size is: " << dz << "m" << endl;

104 // Step size for position
mat Pos(nOfNod,1); Pos.fill(0);
106 for (int i=0; i <= nOfNod-1; i++){
Pos(i) = i*dz;}
108 Pos.save("Pos.txt", raw_ascii);

110 // Step size for time
cout << "Input the simulation time [s]: ";
112 cin >> time;

```

```

cout << "Input the step size for time [s]: ";
114 cin >> dt;
nOfTimeNod = time / dt; // Number of time levels

116 // Calculus of Ki
// From 0.0 to 0.3 [m] is gravel
// From 0.3 to 0.7 [m] is sand
120 // From 0.7 to 1.0 [m] is clay

122 mat K(nOfNod,1); K.fill(0); // Initialization of Ki
K.print("K:");

124
cout << endl;

126 for (i = 0; i <= nOfNod - 1; i++)
128 {
z += dz;
130 cout << "The position is: " << z - dz << endl;

132 if (z-dz < 0.3*L){
K(i) = KGravel;
134 cout << "The material is gravel" << endl << endl;
}
136 else if (z-dz >= 0.3*L && z-dz < 0.7*L){
K(i) = KSand;
138 cout << "The material is sand" << endl << endl;
}
140 else{
K(i) = KClay;
142 cout << "The material is clay" << endl << endl;
}
144 }
K.fill(KGravel);
146 K.print("K:");

148 cout << endl;

150 mat kMenMed (nOfNod-2,1); // Initialization of K+1/2
mat kMayMed (nOfNod-2,1); // Initialization of K-1/2

152
154 for (i = 1; i <= nOfNod - 2; i++)
{
Kimenmed = CondMen(i, nOfNod, dz, K);
156 kMenMed(i-1) = Kimenmed;

Kimasmed = CondMas(i, nOfNod, dz, K);
158 kMayMed(i-1) = Kimasmed;
160 }

162 // Determination of constant auxiliar parameters
C = Ss/dt;
164 E = -C;

166 // Initialization of coefficient matrix
mat COEF(nOfNod-2,nOfNod-2); COEF.fill(0);
168 COEF.print("COEF:");

```

```

170 // Calculus of coefficient matrix
171 for (m = 0; m <= nOfNod -3; m++)
172 {
173     for (n =0; n <= nOfNod -3; n++)
174     {
175         // Determination of variable auxiliar parameters
176         A = kMayMed(m)/(dz*dz);
177         B = kMenMed(m)/(dz*dz);
178         D = -A-B-C;
179
180         if (m == n)
181             COEF(m,n) = D;
182         else if (m - n == -1)
183             COEF(m,n) = A;
184         else if (m - n == +1)
185             COEF(m,n) = B;
186         else
187             COEF(m,n) = 0;
188     }
189 }
190
191 // Initialization of vectors
192 mat UNKN(nOfNod-2,1);    UNKN.fill(0);    // Unknown vector
193 mat KNOW(nOfNod-2,1);    KNOW.fill(0);    // Constant vector
194 mat ANSW(nOfNod,1);    ANSW.fill(0);    // Answer vector
195
196 ofstream file2;
197 file2.open("time.txt");
198
199 // ITERATION LOOP
200
201 for (k = 0; k <= nOfTimeNod-1; k++)
202 {
203     t += dt;
204     file2 << t << endl;
205     cout << "The simulation time is: " << t << " s" << endl;
206
207     for (i = 0; i <= nOfNod -3; i++)
208     {
209         // Constants vector
210         if (i == 0)
211             KNOW(i) = E*UNKN(i) - kMenMed(i)/(dz*dz)*Left;
212         else if (i == nOfNod - 2)
213             KNOW(i) = E*UNKN(i) - kMayMed(i)/(dz*dz)*Right;
214         else
215             KNOW(i) = E*UNKN(i);
216     }
217
218     // Solving the linear system by LU
219     UNKN = solve(COEF,KNOW);
220
221     // Loop for building the answer vector in order to plot
222     for (q = 0; q <= nOfNod - 1; q++)
223     {
224         if (q == 0)
225             ANSW(q) = Left;

```

```
228     else if (q == nOfNod - 1)
        ANSW(q) = Right;
230     else
        ANSW(q) = UNKN(q-1);
    }
232
    file1 << ANSW;
234    ANSW.save("H5.txt", raw_ascii);
    }
236    file1.close();
    file2.close();
238
    return 0;
240 }
```

B.2 Códigos para el flujo bifásico

B.2.1 Solución Analítica - Buckley-Leverett

```

2  /*
3  * The Buckley–Leverett model to solve a two phase flow in porous media
4  *
5  * > One-dimensional drainage
6  * > Homogeneous porous medium
7  * > No source or sink terms
8  * > Horizontal Flow
9  * > Non-compressible flows and solid medium
10 *
11 * Author: Jhabriel Varela – jhabriel@gmail.com
12 * National University of Asuncion
13 * Scientific & Applied Computing Laboratory
14 * Date: November 2013
15 */
16 // Headers
17 #include <iostream>
18 #include <cmath>
19 #include <armadillo> // Linear algebra library
20
21 // Namespaces
22 using namespace std;
23 using namespace arma; // Linear algebra namespace
24
25 // Functions
26 // Effective Saturation
27 mat effSat (int nOfPoints, mat Sw, double Siw)
28 {
29     mat Swe(nOfPoints,1); Swe.fill(0);
30     for (int j = 0; j <= nOfPoints - 1; j++) {
31         Swe(j) = (Sw(j) - Siw) / (1.0 - Siw); }
32     return (Swe);
33 }
34
35 // Relative Permeability for Wetting Phase
36 mat kwett (int nOfPoints, mat Swe, double lambda)
37 {
38     mat krw(nOfPoints,1); krw.fill(0);
39     double pot; pot = (2+3*lambda)/(lambda);
40     for (int j = 0; j <= nOfPoints - 1; j++) {
41         krw(j) = pow(Swe(j), pot); }
42     return (krw);
43 }
44
45 // Maximum value of relative permeability for non-wetting phase
46 double maxkrn (double Siw)
47 {
48     double krnmax;
49     krnmax = 1.31 - 2.62 * Siw + 1.1 * Siw * Siw;
50     return (krnmax);
51 }

```

```

52 // Relative permeability for non-wetting phase
54 mat knonwett (int nOfPoints, mat Swe, double krnmax, double lambda)
55 {
56     mat krn(nOfPoints,1); krn.fill(0);
57     double pot; pot = (2+lambda)/lambda;
58     for (int j = 0; j <= nOfPoints - 1; j++) {
59         krn(j) = krnmax * pow((1-Swe(j)),2) * (1-pow(Swe(j),pot));
60     }
61     return (krn);
62 }
63 // Fractional flow
64 mat fractflow (int nOfPoints, mat krw, mat krn, double uw, double un)
65 {
66     mat fw(nOfPoints,1); fw.fill(0);
67     for (int j=0; j <= nOfPoints -1; j++)
68     {
69         fw(j) = 1 / (1+((uw*krn(j))/(un*krw(j))));
70     }
71     return (fw);
72 }
73 // Derivative of fractional flow
74 mat derfract (int nOfPoints, mat Sw, double Siw, double krnmax,
75             double uw, double un, double lambda)
76 {
77     double A = Siw;
78     double B; B = (uw * krnmax) / un;
79     double L = lambda;
80     double N = 2/L;
81     double M = 4/L;
82     mat dfw(nOfPoints,1); dfw.fill(0);
83     for (int j=0; j <= nOfPoints -1; j++)
84     {
85         dfw(j) = ((pow((A-Sw(j)),N)*((2-2*Sw(j))*pow((A-1),N)*pow(A,4)+
86             (3*Sw(j)*Sw(j)+2*Sw(j)-5)*pow((A-1),N)*pow(A,3)+(-9*Sw(j)*Sw(j)
87             +6*Sw(j)+3)*pow((A-1),N)*A*A+(-pow(Sw(j),4)+4*pow(Sw(j),3)+3
88             *Sw(j)*Sw(j)-6*Sw(j))*pow((A-1),N)*A+(pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)
89             +3*Sw(j)*Sw(j))*pow((A-1),N))+pow((A-Sw(j)),M)*((2*Sw(j)-2)
90             *pow(A,4)+(-6*Sw(j)*Sw(j)+4*Sw(j)+2)*pow(A,3)+(6*pow(Sw(j),3)-6
91             *Sw(j))*A*A+(-2*pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)+6*Sw(j)*Sw(j))*A+2
92             *pow(Sw(j),4)-2*pow(Sw(j),3)))*B*L+pow((A-Sw(j)),N)*((-2*Sw(j)
93             *Sw(j)+4*Sw(j)-2)*pow((A-1),N)*pow(A,3)+(4*pow(Sw(j),3)-6*Sw(j)
94             *Sw(j)+2)*pow((A-1),N)*A*A+(-2*pow(Sw(j),4)+6*Sw(j)*Sw(j)-4
95             *Sw(j))*pow((A-1),N)*A+(2*pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)+2*Sw(j)
96             *Sw(j))*pow((A-1),N)*B)/(((pow((A-Sw(j)),N)*((-2*pow(Sw(j),4)
97             +8*pow(Sw(j),3)-12*Sw(j)*Sw(j)+8*Sw(j)-2)*pow((A-1),N)*A*A
98             +(2*pow(Sw(j),5)-6*pow(Sw(j),4)+4*pow(Sw(j),3)+4*Sw(j)
99             *Sw(j)-6*Sw(j)+2)*pow((A-1),N)*A+(-2*pow(Sw(j),5)+8*pow(Sw(j),4)
100             -12*pow(Sw(j),3)+8*Sw(j)*Sw(j)-2*Sw(j))*pow((A-1),N))
101             +pow((A-Sw(j)),M)*((pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)+6*Sw(j)*Sw(j)-4
102             *Sw(j)+1)*A*A+(-2*pow(Sw(j),5)+8*pow(Sw(j),4)-12*pow(Sw(j),3)+8
103             *Sw(j)*Sw(j)-2*Sw(j))*A+pow(Sw(j),6)-4*pow(Sw(j),5)+6
104             *pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)+Sw(j)*Sw(j))+pow(Sw(j),4)-4
105             *pow(Sw(j),3)+6*Sw(j)*Sw(j)-4*Sw(j)+1)*pow((A-1),M)*A*A
106             +(-2*pow(Sw(j),4)+8*pow(Sw(j),3)-12*Sw(j)*Sw(j)+8*Sw(j)-2)
107             *pow((A-1),M)*A+(pow(Sw(j),4)-4*pow(Sw(j),3)+6*Sw(j)

```

```

110 *Sw(j)-4*Sw(j)+1)*pow((A-1),M)*B*B+(pow((A-Sw(j)),N)
*(2*Sw(j)*Sw(j)-4*Sw(j)+2)*pow((A-1),N)*pow(A,4)
+(-6*pow(Sw(j),3)+10*Sw(j)*Sw(j)-2*Sw(j)-2)*pow((A-1),N)
112 *pow(A,3)+(6*pow(Sw(j),4)-6*pow(Sw(j),3)-6*Sw(j)*Sw(j)+6*Sw(j))
*pow((A-1),N)*A*A+(-2*pow(Sw(j),5)-2*pow(Sw(j),4)+10*pow(Sw(j),3)
-6*Sw(j)*Sw(j))*pow((A-1),N)*A+(2*pow(Sw(j),5)-4*pow(Sw(j),4)+2
114 *pow(Sw(j),3))*pow((A-1),N)+pow((A-Sw(j)),M)*((-2*Sw(j)*Sw(j)+4
*Sw(j)-2)*pow(A,4)+(8*pow(Sw(j),3)-16*Sw(j)*Sw(j)+8*Sw(j))
116 *pow(A,3)+(-12*pow(Sw(j),4)+24*pow(Sw(j),3)-12*Sw(j)*Sw(j))*A*A+
(8*pow(Sw(j),5)-16*pow(Sw(j),4)+8*pow(Sw(j),3))*A-2*pow(Sw(j),6)
118 +4*pow(Sw(j),5)-2*pow(Sw(j),4))*B+pow((A-Sw(j)),M)*(pow(A,6)-6
*Sw(j)*pow(A,5)+15*Sw(j)*Sw(j)*pow(A,4)-20*pow(Sw(j),3)*pow(A,3)
120 +15*pow(Sw(j),4)*A*A-6*pow(Sw(j),5)*A*pow(Sw(j),6))*L);
122 }
return (dfw);
124 }

126 // Calculus of Swe evaluated in Swf
double SweEvalSwf (double Swf, double Siw)
128 {
double SweSwf;
130 SweSwf = (Swf - Siw)/(1 - Siw);
return (SweSwf);
132 }

134 // Calculus of fw evaluated in Swf
double fwEvalSwf (double SweSwf, double krnmax, double uw, double un,
136 double lambda)
{
138 double fwSwf;
double B = (uw*krnmax)/(un);
140 double P = (2+lambda)/lambda;
double R = (2+3*lambda)/lambda;
142 fwSwf = 1 / (1 + ((B*pow((1-SweSwf),2)*(1-pow(SweSwf,P)))/
pow(SweSwf,R)));
144 return (fwSwf);
}

146 // Calculus of derivative of fw evaluated in Swf
double dfwEvalSwf (double Swf, double Siw, double krnmax,
148 double uw, double un, double lambda)
150 {
double A = Siw;
152 double B = (uw * krnmax) / un;
double L = lambda;
154 double N = 2/L;
double M = 4/L;
156 double dfwSwf;
dfwSwf= ((pow((A-Swf),N))*((2-2*Swf)*pow((A-1),N)*pow(A,4)+
158 (3*Swf*Swf+2*Swf-5)*pow((A-1),N)*pow(A,3)+(-9*Swf*Swf
+6*Swf+3)*pow((A-1),N)*A*A+(-pow(Swf,4)+4*pow(Swf,3)+3
160 *Swf*Swf-6*Swf)*pow((A-1),N)*A+(pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)
+3*Swf*Swf)*pow((A-1),N))+pow((A-Swf),M)*((2*Swf-2)
162 *pow(A,4)+(-6*Swf*Swf+4*Swf+2)*pow(A,3)+(6*pow(Swf,3)-6
*Swf)*A*A+(-2*pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)+6*Swf*Swf)*A+2
164 *pow(Swf,4)-2*pow(Swf,3))*B*L+pow((A-Swf),N)*((-2*Swf
*Swf+4*Swf-2)*pow((A-1),N)*pow(A,3)+(4*pow(Swf,3)-6*Swf

```

```

166     *Swf+2)*pow((A-1),N)*A*A+(-2*pow(Swf,4)+6*Swf*Swf-4
    *Swf)*pow((A-1),N)*A+(2*pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)+2*Swf
168     *Swf)*pow((A-1),N)*B)/(((pow((A-Swf),N)*(-2*pow(Swf,4)
    +8*pow(Swf,3)-12*Swf*Swf+8*Swf-2)*pow((A-1),N)*A*A
170     +(2*pow(Swf,5)-6*pow(Swf,4)+4*pow(Swf,3)+4*Swf
    *Swf-6*Swf+2)*pow((A-1),N)*A+(-2*pow(Swf,5)+8*pow(Swf,4)
172     -12*pow(Swf,3)+8*Swf*Swf-2*Swf)*pow((A-1),N)
    +pow((A-Swf),M)*((pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)+6*Swf*Swf-4
174     *Swf+1)*A*A+(-2*pow(Swf,5)+8*pow(Swf,4)-12*pow(Swf,3)+8
    *Swf*Swf-2*Swf)*A+pow(Swf,6)-4*pow(Swf,5)+6
176     *pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)+Swf*Swf)+(pow(Swf,4)-4
    *pow(Swf,3)+6*Swf*Swf-4*Swf+1)*pow((A-1),M)*A*A
178     +(-2*pow(Swf,4)+8*pow(Swf,3)-12*Swf*Swf+8*Swf-2)
    *pow((A-1),M)*A+(pow(Swf,4)-4*pow(Swf,3)+6*Swf
180     *Swf-4*Swf+1)*pow((A-1),M)*B*B+(pow((A-Swf),N)
    *((2*Swf*Swf-4*Swf+2)*pow((A-1),N)*pow(A,4)
182     +(-6*pow(Swf,3)+10*Swf*Swf-2*Swf-2)*pow((A-1),N)
    *pow(A,3)+(6*pow(Swf,4)-6*pow(Swf,3)-6*Swf*Swf+6*Swf)
184     *pow((A-1),N)*A*A+(-2*pow(Swf,5)-2*pow(Swf,4)+10*pow(Swf,3)
    -6*Swf*Swf)*pow((A-1),N)*A+(2*pow(Swf,5)-4*pow(Swf,4)+2
186     *pow(Swf,3))*pow((A-1),N)+pow((A-Swf),M)*((-2*Swf*Swf+4
    *Swf-2)*pow(A,4)+(8*pow(Swf,3)-16*Swf*Swf+8*Swf)
188     *pow(A,3)+(-12*pow(Swf,4)+24*pow(Swf,3)-12*Swf*Swf)*A*A+
    (8*pow(Swf,5)-16*pow(Swf,4)+8*pow(Swf,3))*A-2*pow(Swf,6)
190     +4*pow(Swf,5)-2*pow(Swf,4))*B+pow((A-Swf),M)*(pow(A,6)-6
    *Swf*pow(A,5)+15*Swf*Swf*pow(A,4)-20*pow(Swf,3)*pow(A,3)
192     +15*pow(Swf,4)*A*A-6*pow(Swf,5)*A+pow(Swf,6))*L);
    return (dfwSwf);
194 }

196 // Calculus of the position back and forward of Swf
double posdetdel (int nOfPoints, double Swf, mat Sw)
198 {
    double bef;
200     for (int j=0; j <= nOfPoints-1; j++) {
        if (Sw(j) < Swf)
202             bef = j+1; }
    return (bef);
204 }

206 // Modification of Sw in order to plot
mat modSw (double nOfPoints, double bef, double Swf, mat Sw)
208 {
    mat Swdis;    Swdis = Sw;
210     Swdis.insert_rows(bef,1);
    Swdis(bef) = Swf;
212     Swdis.insert_rows(nOfPoints+1,1);
    Swdis(nOfPoints+1) = 1.0;
214     return (Swdis);
}

216 // Modification of dfw in order to plot
218 mat moddfw (double nOfPoints, double bef, double dfwSwf, mat dfw)
{
220     mat dfwdis;    dfwdis = dfw;
    dfwdis.insert_rows(bef,1);
222     dfwdis(bef) = dfwSwf;

```

```

224   for (int j=bef; j <= nOfPoints; j++)
225   {
226       dfwdis(j) = dfwSwf;
227   }
228   dfwdis.insert_rows(nOfPoints+1,1);
229   dfwdis(nOfPoints+1) = dfwSwf;
230   return (dfwdis);
231 }
232 // Main function
233 int main()
234 {
235     // Constant declarations
236     const double Siw = 0.20;          // Residual water saturation
237     mat SiwMat(1,1);      SiwMat(0) = Siw;
238     const double lambda = 2.0;      // Pores size distribution index
239     mat lambdaMat(1,1);    lambdaMat(0) = lambda;
240     double krnmax;          // Maximum value for non-rel.perm.
241
242     // Size steps
243     int nOfPoints;          // Number of points
244     double range;          // Saturation range
245     double deltaS;         // Size step for the saturation
246
247     //Carga de viscosidades
248     double uw = 1.0;       // Wetting phase viscosity [cP]
249     double un = 10.0;      // Non-wetting phase viscosity [cP]
250
251     // Input of number of points
252     cout << "Input the number of points: ";
253     cin >> nOfPoints;
254
255     ofstream file1;
256     file1.open("nOfPoints.txt");
257     file1 << nOfPoints;
258     file1.close();
259
260     // Saturation range for drainage
261     range = (1 - Siw);
262
263     // Size step for saturation
264     deltaS = range / (nOfPoints - 1);
265
266     // Creation of Sw
267     mat Sw(nOfPoints,1); Sw.fill(0);
268     for (int i = 0; i <= nOfPoints - 1; i++) {
269         Sw(i) = Siw + deltaS*(i); }
270
271     // Creation of Sn
272     mat Sn(nOfPoints,1); Sn.fill(0);
273     Sn = 1 - Sw;
274
275     // Determination of krnmax
276     krnmax = maxkrn(Siw);
277
278     ofstream file2;

```

```

280 file2.open("krnmax.txt");
file2 << krnmax;
282 file2.close();

284 // Effective saturation of wetting phase
mat Swe(nOfPoints,1); Swe.fill(0);
286 Swe = effSat(nOfPoints, Sw, Siw);

288 // Relative permeability for wetting phase
mat krw(nOfPoints,1); krw.fill(0);
290 krw = kwett(nOfPoints, Swe, lambda);

292 // Relative permeability for non-wetting phase
mat krn(nOfPoints,1); krn.fill(0);
294 krn = knonwett(nOfPoints, Swe, krnmax, lambda);

296 // Fractional flow for wetting phase
mat fw(nOfPoints,1); fw.fill(0);
298 fw = fractflow(nOfPoints, krw, krn, uw, un);

300 // Fractional flow for non-wetting phase
mat fn(nOfPoints,1); fn.fill(0);
302 fn = 1 - fw;

304 // Derivative of fractional flow for wetting phase
mat dfw(nOfPoints,1); dfw.fill(0);
306 dfw = derfract(nOfPoints, Sw, Siw, krnmax, uw, un, lambda);

308 // Input of Swf
double Swf;
310 cout << "Please input Swf[.39]: ";
cin >> Swf; mat Swfmat(1,1); Swfmat(0) = Swf;
312

// Swe evaluated in Swf
314 double SweSwf = SweEvalSwf(Swf, Siw);

// fw evaluated in Swf
316 double fwSwf = fwEvalSwf(SweSwf, krnmax, uw, un, lambda);
318 mat fwSwfmat(1,1); fwSwfmat(0) = fwSwf;

// dfw evaluated in Swf
320 double dfwSwf = dfwEvalSwf(Swf, Siw, krnmax, uw, un, lambda);
322 mat dfwSwfmat(1,1); dfwSwfmat(0) = dfwSwf;

324 // Position back and forward of Sef
double bef = posdetdel(nOfPoints, Swf, Sw);
326 double aft = bef + 1;

328 cout << "The positions back and forward are: " << bef << " and "
<< aft << endl;
330

// Sw modified
332 mat Swdis(nOfPoints+2,1);
Swdis = modSw(nOfPoints, bef, Swf, Sw);
334

// dfw modified
336 mat dfwdis;

```

```
dfwdis = moddfw(nOfPoints, bef, dfwSwf, dfw);
338
// System parameters
340 double velTot = 1.0/31530000; // total darcy vel. [m/s]
mat matVelTot(1,1); matVelTot(0) = velTot;
342 double Largo = 1; // system length [m]
mat matLargo(1,1); matLargo(0) = Largo;
344 double Por = .15; // rock porosity [-]
mat matPor(1,1); matPor(0) = Por;
346 double simTime = 3.0000E+06; // simulation time [s]
mat matSimTime(1,1); matSimTime(0) = simTime;
348
// Dimensionless time
350 double tD = (velTot*simTime)/(Largo*Por);
352
// Dimensionless position
mat xD(nOfPoints+2,1); xD.fill(0);
354
// Solving the BL equation
356 xD = tD * dfwdis;
358
// Let's save the vectors in order to plot
Swdis.save("output/SwBL10.txt", raw_ascii);
360 xD.save("output/xDBL10.txt", raw_ascii);
362 return 0;
}
```

B.2.2 Solución Numérica - Algoritmo ImpES

```

1  /*
   * An ImpES approach to solve a two phase flow in porous media
   *
   * > One-dimensional drainage
   * > Heterogeneous porous medium
   * > Horizontal Flow (Gravitationals effects have been neglected)
   * > Non-compressible flows and solid medium
   * > Discretization: Cell Centered Finite Volume Method
   * > Two Dirichlet boundary conditions
   *
   * Author: Jhabriel Varela – jhabriel@gmail.com
   * National University of Asuncion
   * Scientific & Applied Computing Laboratory
   * Date: December 2013
   *
   * Boundary conditions:
   * > Left Boundary: Dirichlet Conditions
   * > Right Boundary: Dirichlet Conditions
   *
   * Initial Conditions: Same as Right Boundary
   *
   */
23
   // Headers
25 #include <iostream>
   #include <cmath>
27 #include <armadillo> // Linear Algebra library
29
   // Namespaces
   using namespace std;
31 using namespace arma; // Linear Algebra namespace
33
   // Functions
35 // Condition for printing output parameters
   bool frecCond (int w, int pFrec, double simTime, double dt)
37 {
   bool FE = true;
39   if (int(((w+1)*dt)) % int((1.0/pFrec)*simTime) == 0)
       FE = true;
41   else
       FE = false;
43   return FE;
   }
45
   // Harmonic Average for Intrinsic Permeability
47 mat harmPerm (int nOfCells, mat k)
   {
49   mat hak(nOfCells-1,1); hak.fill(0);
   for (int i=0; i <= nOfCells-2; i++){
51     hak(i) = 2.0 / ((1.0/k(i)) + (1.0/k(i+1)));}
   return hak;
53 }
55 // Effective Saturation

```

```

57 mat effeSat (int nOfCells, double Siw, mat Sw)
58 {
59   mat Swe(nOfCells,1);      Swe.fill(0);
60   for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
61     Swe(i) = (Sw(i) - Siw) / (1.0 - Siw);}
62   return Swe;
63 }
64 // Relative Permeability for Wetting Phase
65 mat relaWet (int nOfCells, mat Swe, mat alpha)
66 {
67   mat krw(nOfCells,1);      krw.fill(0);
68   for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
69     krw(i) = pow(Swe(i),((2+3*alpha(i))/alpha(i)));}
70   return krw;
71 }
72 // Relative Permeability for Nonwetting Phase
73 mat relaNon (int nOfCells, double Siw, mat Swe, mat alpha)
74 {
75   double krnmax = 1.31 - 2.62*Siw + 1.1*Siw*Siw;
76   mat krn(nOfCells,1);      krn.fill(0);
77   for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
78     krn(i) = krnmax * pow((1.0-Swe(i)),2.0)
79       * (1.0 - pow(Swe(i),((2.0+alpha(i))/alpha(i))));}
80   return krn;
81 }
82 // Upstream Mobilities for Wetting Phase
83 mat upstMobWet (int nOfCells, mat pw, mat mobWet)
84 {
85   mat upMobWet(nOfCells-1,1);  upMobWet.fill(0);
86   for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
87     if (pw(j) >= pw(j+1))
88       upMobWet(j) = mobWet(j);
89     else
90       upMobWet(j) = mobWet(j+1);}
91   return upMobWet;
92 }
93 // Harmonic Mobilities for Wetting Phase
94 mat harmMobWet (int nOfCells, mat mobWet)
95 {
96   mat haMobWet(nOfCells-1,1);  haMobWet.fill(0);
97   for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
98     haMobWet(j) = 2.0 / ((1.0/mobWet(j))+(1.0/mobWet(j+1)));}
99   return haMobWet;
100 }
101 // Arithmetic Mobilities for Wetting Phase
102 mat arithMobWet (int nOfCells, mat mobWet)
103 {
104   mat arMobWet(nOfCells-1,1);  arMobWet.fill(0);
105   for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
106     arMobWet(j) = 0.5 * (mobWet(j) + mobWet(j+1));}
107   return arMobWet;
108 }

```

```

113 // Upstream Mobilities for Nonwetting Phase
115 mat upstMobNon (int nOfCells, mat pn, mat mobNon)
116 {
117     mat upMobNon(nOfCells-1,1);    upMobNon.fill(0);
118     for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
119         if (pn(j) >= pn(j+1))
120             upMobNon(j) = mobNon(j);
121         else
122             upMobNon(j) = mobNon(j+1);}
123     return upMobNon;
124 }
125
126 // Harmonic Mobilities for Nonwetting Phase
127 mat harmMobNon (int nOfCells, mat mobNon)
128 {
129     mat haMobNon(nOfCells-1,1);    haMobNon.fill(0);
130     for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
131         haMobNon(j) = 2.0 / ((1.0/mobNon(j)) + (1.0/mobNon(j+1)));}
132     return haMobNon;
133 }
134
135 // Arithmetic Mobilities for Nonwetting Phase
136 mat arithMobNon (int nOfCells, mat mobNon)
137 {
138     mat arMobNon(nOfCells-1,1);    arMobNon.fill(0);
139     for (int j=0; j <= nOfCells-2; j++){
140         arMobNon(j) = 0.5 * (mobNon(j) + mobNon(j+1));}
141     return arMobNon;
142 }
143
144 // Capillary Pressure
145 mat capPress (int nOfCells, double pEntry, mat Swe, mat alpha)
146 {
147     mat pcap(nOfCells,1);    pcap.fill(0);
148     for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
149         pcap(i) = pEntry * pow(Swe(i),(-1/alpha(i)));}
150     return pcap;
151 }
152
153 // Wetting Phase Velocity
154 mat darWet (int nOfCells, double dx, mat k, mat pw, mat upMobWet)
155 {
156     mat velWet(nOfCells-1,1);    velWet.fill(0);
157     for (int i=0; i <= nOfCells-2; i++) {
158         velWet(i) = -(k(i)/dx) * upMobWet(i) * (pw(i+1)-pw(i));}
159     return velWet;
160 }
161
162 // Nonwetting Phase Velocity
163 mat darNon (int nOfCells, double dx, mat k, mat pn, mat upMobNon)
164 {
165     mat velNon(nOfCells-1,1);    velNon.fill(0);
166     for (int i=0; i <= nOfCells-2; i++) {
167         velNon(i) = -(k(i)/dx) * upMobNon(i) * (pn(i+1)-pn(i));}
168     return velNon;
169 }

```

```

171 // Total Darcy Velocities
mat velDar (int nOfCells, double dx, mat hak, mat pn, mat pcap,
173 mat haMobTot, mat haMobWet)
{
175 mat darVel(nOfCells-1,1); darVel.fill(0);
for (int i=0; i <= nOfCells-2; i++) {
177 darVel(i) = -(hak(i)/dx) * ((haMobTot(i)*(pn(i+1)-pn(i))) -
(haMobWet(i)*(pcap(i+1)-pcap(i))));}
179 return darVel;
}
181
183 // Main function
185 int main()
{
187 // Declaration of constants
const double uw = 0.001; // [Pa.s] Wetting Phase Viscosity
189 mat matWetVis(1,1); matWetVis(0) = uw;
const double un = 0.01; // [Pa.s] Non-Wetting Phase Visc.
191 mat matNonVis(1,1); matNonVis(0) = un;
const double pEntry = 20000; // [Pa] Capillary Entry Pressure
193 mat matPreEnt(1,1); matPreEnt(0) = pEntry;
const double Siw = 0.20; // [-] Residual Wett-Phase Satur.
195 mat matSiw(1,1); matSiw(0) = Siw;
const double Por = .15; // [-] Rock Porosity
197 mat matPor(1,1); matPor(0) = Por;
199 // System Length
double Length;
201 cout << "Input the system Length [km]: ";
cin >> Length; Length = Length * 1000;
203 mat matLength(1,1); matLength(0) = Length;
205 // Number Of Cells Input
207 // Cells
int nOfCells;
209 cout << "Input the number of Cells (Including Ghost Cells): ";
cin >> nOfCells;
211 mat matNOfCells(1,1); matNOfCells(0) = nOfCells;
213 // Number Of Cells Vector
mat matCells(nOfCells,1); matCells.fill(0);
215 for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
matCells(i) = i;}
217 matCells.print("Cells");
219 // Length Step
221 // Length Step
double dx;
223 dx = Length/(nOfCells-1);
mat matLStep(1,1); matLStep(0) = dx;
225 // Length Vector

```

```

227 mat matPos(nOfCells,1);          matPos.fill(0);
    for (int i=0; i <= nOfCells-1; i++){
229     matPos(i) = i*dx;}
    matPos.print("matPos");
231
    // Time Step
233
    // Simulation Time
235 double simTime;
    cout << "Input the simulation time [years]: ";
237 cin >> simTime;          simTime = simTime*31500000;
    mat matSimTime(1,1);          matSimTime(0) = simTime;
239
    // Time Step
241 double dt;
    cout << "Input the time step [s] (Recommended: 1e3s): ";
243 cin >> dt;
    mat matTimeStep(1,1);          matTimeStep(0) = dt;
245
    // Print Frecuency
247 int pFrec;
    cout << "How many times do you want to print?: ";
249 cin >> pFrec;
    mat matPFrec(1,1);          matPFrec(0) = pFrec;
251
    // Time Levels
253 int tLevel;
    tLevel = simTime / dt;
255 cout << tLevel << endl;
257
    // Non Time-Dependent Parameters
259
    // Pore Size Distribution Index
    mat alpha(nOfCells,1);          alpha.fill(2);
261
    // Intrinsic Permeability
263 mat k(nOfCells,1);          k.fill(1e-15);
265
    // Harmonic Mean for Intrinsic Permeability
    mat hak(nOfCells-1,1);          hak.fill(0);
267 hak = harmPerm(nOfCells,k);
269
    // Boundary & Initial Conditions
271
    // Wetting Phase Saturation
    mat Sw(nOfCells,1);
273 Sw.fill(.999);          // [-] Initial Condition
    Sw(0) = .25;          // [-] Left Boundary
275 Sw(nOfCells-1)= .999;          // [-] Right Boundary
277
    // Non Wetting Phase Saturation
    mat Sn(nOfCells,1);          Sn.fill(0);
279 Sn = 1-Sw;
281
    // Effective Saturation for Wetting Phase
    mat Swe(nOfCells,1);          Swe.fill(0);
283 Swe = effeSat(nOfCells, Siw, Sw);

```

```

285 // Relative Permeability for Wetting Phase
    mat krw(nOfCells,1);          krw.fill(0);
287 krw = relaWet(nOfCells, Swe, alpha);

289 // Relative Permeability for Nonwetting Phase
    mat krn(nOfCells,1);          krn.fill(0);
291 krn = relaNon(nOfCells, Siw, Swe, alpha);

293 // Mobility for Wetting Phase
    mat mobWet(nOfCells,1);        mobWet.fill(0);
295 mobWet = krw / uw;
    mobWet.print("mobWet:");

297 // Mobility for Nonwetting Phase
299 mat mobNon(nOfCells,1);        mobNon.fill(0);
    mobNon = krn / un;

301 // Pressure of Nonwetting Phase
303 mat pn(nOfCells,1);
    pn.fill(1000000);              // [Pa] Initial Condition
305 pn(0) = 1000000;                // [Pa] Left Boundary
    pn(nOfCells-1) = 1000000;     // [Pa] Right Condition
307

309 // Capillary Pressures
    mat pcap(nOfCells,1);          pcap.fill(0);
    pcap = capPress(nOfCells, pEntry, Swe, alpha);
311

313 // Pressure of Wetting Phase
    mat pw(nOfCells,1);            pw.fill(0);
    pw = pn - pcap;
315

317 // Time Dependent Parameters Initialization
319 mat haMobWet(nOfCells-1,1);      haMobWet.fill(0);
    mat haMobNon(nOfCells-1,1);    haMobNon.fill(0);
    mat haMobTot(nOfCells-1,1);    haMobTot.fill(0);
321 mat upMobWet(nOfCells-1,1);      upMobWet.fill(0);
    mat upMobNon(nOfCells-1,1);    upMobNon.fill(0);
323 mat upMobTot(nOfCells-1,1);      upMobTot.fill(0);
    mat upfw(nOfCells-1,1);        upfw.fill(0);
325 mat arMobWet(nOfCells-1,1);      arMobWet.fill(0);
    mat arMobNon(nOfCells-1,1);    arMobNon.fill(0);
327 mat arMobTot(nOfCells-1,1);      arMobTot.fill(0);
    mat arfw(nOfCells-1,1);        arfw.fill(0);
329 mat u(nOfCells-1,1);            u.fill(0);

331 // ITERATION LOOP

333 ofstream file0;
    file0.open("output/printTime.txt");
335

337 ofstream file1;
    file1.open("output/vectSw.txt");

339 ofstream file2;
    file2.open("output/vectpn.txt");

```

```

341 ofstream file3;
343 file3.open("output/vectpw.txt");

345 ofstream file4;
347 file4.open("output/vectpcap.txt");

349 ofstream file6;
351 file6.open("output/velWet.txt");

353 ofstream file7;
355 file7.open("output/velNon.txt");

357 ofstream file8;
359 file8.open("output/velTot.txt");

361 ofstream file9;
363 file9.open("output/3DSw.txt");

365 ofstream file10;
367 file10.open("output/mobWet.txt");

369 ofstream file11;
371 file11.open("output/mobNon.txt");

373 ofstream file12;
375 file12.open("output/mobTot.txt");

377 for (int w=0 ; w <= tLevel-1; w++){

379 // PHYSICAL PROPERTIES

381 bool frec = true; frec = frecCond(w, pFrec, simTime, dt);

383 if (w == 0){
385     file0 << 0 << endl;           //
387     file1 << Sw;                  //
389     file2 << pw;                  // Initial Conditions
391     file3 << pn;                  //
393     file4 << pcap;               //

395 if (frec == true){
397     cont = cont+1;
399     cout << "Loading ..." << (cont*100.00)/pFrec << "%" << endl;
401     file0 << (w+1)*dt << endl;}

403 // Effective Saturation for Wetting Phase
405 Swe = effeSat(nOfCells, Siw, Sw);

407 // Relative Permeability for Wetting Phase
409 krw = relaWet(nOfCells, Swe, alpha);

411 // Relative Permeability for Nonwetting Phase
413 krn = relaNon(nOfCells, Siw, Swe, alpha);

415 // Mobility for Wetting Phase
417 mobWet = krw / uw;

```

```

399 // Mobility for Nonwetting Phase
mobNon = krn / un;

401 // Harmonic for Wetting Phase Mobilities
403 haMobWet = harmMobWet(nOfCells , mobWet);

405 // Harmonic for Nonwetting Phase Mobilities
haMobNon = harmMobNon(nOfCells , mobNon);

407 // Harmonic for Total Mobilities
409 haMobTot = haMobWet + haMobNon;

411 // Upstream for Wetting Phase Mobilities
upMobWet = upstMobWet(nOfCells , pw, mobWet);
413 if (frec == true){
file10 << upMobWet;}

415 // Upstream for Nonwetting Phase Mobilities
417 upMobNon = upstMobNon(nOfCells , pn, mobNon);
if (frec == true){
419 file11 << upMobNon;}

421 // Upstream for Total Mobilities
upMobTot = upMobNon + upMobWet;
423 if (frec == true){
file12 << upMobTot;}

425 // Upstream for Wetting Phase Fractional Flow
427 upfw = upMobWet / upMobTot;

429 // Arithmetic for Wetting Phase Mobilities
arMobWet = arithMobWet(nOfCells , mobWet);

431 // Arithmetic for Nonwetting Phase Mobilities
433 arMobNon = arithMobNon(nOfCells , mobNon);

435 // Arithmetic for Total Mobilities
arMobTot = arMobWet + arMobNon;

437 // Arithmetic for Wetting Phase Fractional Flow
439 arfw = arMobWet / arMobTot;

441 // Capillary Pressures
pcap = capPress(nOfCells , pEntry , Swe , alpha);

443 // THE PRESSURE EQUATION

445 // Coefficient Matrix

447 double in = nOfCells - 2;
449 mat A(in , in); A.fill(0);

451 for (int a=0; a <= in-1; a++)
{
453     for (int b=0; b <= in-1; b++)
        {

```

```

455     if (a == b)
456         A(a,b) = -(hak(a)*haMobTot(a) + hak(a+1)*haMobTot(a+1));
457     else if (a-b == 1)
458         A(a,b) = hak(a)*haMobTot(a);
459     else if (b-a == 1)
460         A(a,b) = hak(a+1)*haMobTot(a+1);
461     else
462         A(a,b) = 0;
463 }
464 }
465
466 // Constants Vector
467
468 mat C(in,1);                C.fill(0);
469
470 C(0) = -hak(0)*haMobTot(0)*pn(0)
471        +hak(0)*haMobWet(0)*pcap(0)
472        -(hak(0)*haMobWet(0)+hak(1)*haMobWet(1))*pcap(1)
473        +hak(1)*haMobWet(1)*pcap(2);
474
475 for (int j=1; j <= in-2; j++)
476 {
477     C(j) = +hak(j)*haMobWet(j)*pcap(j)
478            -(hak(j)*haMobWet(j)+hak(j+1)*haMobWet(j+1))*pcap(j+1)
479            +hak(j+1)*haMobWet(j+1)*pcap(j+2);
480 }
481
482 C(in-1) = -hak(in)*haMobTot(in)*pn(in+1)
483           +hak(in-1)*haMobWet(in-1)*pcap(in-1)
484           -(hak(in-1)*haMobWet(in-1)+hak(in)*haMobWet(in))*pcap(in)
485           +hak(in)*haMobWet(in)*pcap(in+1);
486
487 // Solving The Linear System by LU
488
489 mat X(in,1);                X.fill(0);
490 X = solve(A,C);
491
492 // Non-wetting Phase Pressures
493 for (int i=1; i <= in; i++){
494     pn(i) = X(i-1);}
495
496 // Pressures of Wetting Phase
497 pw = pn - pcap;
498
499 if (frec == true){
500     file2 << pn;
501     file3 << pw;
502     file4 << pcap;}
503
504 // Total Darcy Velocity
505 mat u(nOfCells-1,1);        u.fill(0);
506 u = velDar(nOfCells, dx, hak, pn, pcap, haMobTot, haMobWet);
507 if (frec == true){
508     file8 << u;}
509
510 // Wetting Phase Darcy Velocity

```

```

513 mat velWet(nOfCells-1,1);          velWet.fill(0);
velWet = darWet(nOfCells, dx, hak, pw, haMobWet);
if (frec == true){
515     file6 << velWet;}

517 // Nonwetting Phase Darcy Velocity
mat velNon(nOfCells-1,1);          velNon.fill(0);
519 velNon = darNon(nOfCells, dx, hak, pn, haMobNon);
if (frec == true){
521     file7 << velNon;}

523 // THE SATURATION EQUATION

525 for (int j=0; j <= in-1; j++)
{
527     Sw(j+1) = (dt/(Por*dx)) *
                (upfw(j)*u(j)
529                 -upfw(j+1)*u(j+1)
                 -(1/dx)*(hak(j)*arfw(j)*arMobNon(j))*pcap(j)
531                 +(1/dx)*(hak(j)*arfw(j)*arMobNon(j) +
                 hak(j+1)*arfw(j+1)*arMobNon(j+1))*pcap(j+1)
533                 -(1/dx)*(hak(j+1)*arfw(j+1)*arMobNon(j+1))*pcap(j+2))
                + Sw(j+1);
535 }

537 if (frec == true){
    file1 << Sw;}

539 // New non-Wetting Phase Saturation Values
541 Sn = 1 - Sw;

543 }

545 file0.close();          //
546 file1.close();          //
547 file2.close();          //
548 file3.close();          //
549 file4.close();          //
550 file6.close();          //
551 file7.close();          //   Closing .txt output files
552 file8.close();          //
553 file9.close();          //
554 file10.close();         //
555 file11.close();         //
556 file12.close();         //

557 // Saving Vectors to plot
559 matLength.save("output/L.txt",raw_ascii);
matNOfCells.save("output/Cells.txt",raw_ascii);
561 matLStep.save("output/dx.txt",raw_ascii);
matPos.save("output/Pos.txt",raw_ascii);
563 k.save("output/k.txt",raw_ascii);
matWetVis.save("output/uw.txt",raw_ascii);
565 matNonVis.save("output/un.txt",raw_ascii);
matSiv.save("output/Siv.txt",raw_ascii);
567 matPreEnt.save("output/pEnt.txt",raw_ascii);
matSimTime.save("output/SimTime.txt",raw_ascii);

```

```
569 matTimeStep.save("output/dt.txt",raw_ascii);
    Sw.save("output/Sw.txt",raw_ascii);
571 Sn.save("output/Sn.txt",raw_ascii);
    upMobWet.save("output/upMobWet.txt",raw_ascii);
573 upMobNon.save("output/upMobNon.txt",raw_ascii);
    upMobTot.save("output/upMobTot.txt",raw_ascii);
575 upfw.save("output/upfn.txt",raw_ascii);
    pcap.save("output/pcap.txt",raw_ascii);
577 pn.save("output/pn.txt",raw_ascii);
    pw.save("output/pw.txt",raw_ascii);
579 u.save("output/ut.txt",raw_ascii);

581 return 0;
}
```

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. American Elsevier Publishing Company, Inc.
- Brooks, R. H. & Corey, A. T. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers, Colorado State University*, (March).
- Buckley, S. E. & Leverett, M. (1942). Mechanism of fluid displacement in sands. *Trans. AIME*, 146(107), 1–7.
- Burden, R. & Faires, J. (2010). *Numerical analysis*. Cengage Learning.
- Burdine, N. (1953). Relative permeability calculations from pore size distribution data. *Journal of Petroleum Technology*, 5(3), 71–78.
- Chavent, G. & Jaffré, J. (1986). *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation: single phase, multiphase and multicomponent flows through porous media*. Access Online via Elsevier.
- Chen, Z., Huan, G., & Ma, Y. (2006). *Computational methods for multiphase flows in porous media*, volume 2. Siam.
- Corey, A. T. (1954). The interrelation between gas and oil relative permeabilities. *Producers monthly*, 19(1), 38–41.
- Douglas Jr, J., Peaceman, D., & Rachford Jr, H. (1959). A method for calculating multi-dimensional immiscible displacement. *Trans. AIME*, 216, 297–308.
- F. Doster, E. K. . J. N. (2013). Multi-phase multi-component flow including capillary pressure and bouyancy: A robust implicit pressure explicit mass finite volume method.
- Fatt, I. & Dykstra, H. (1951). Relative permeability studies. *Journal of Petroleum Technology*, 3(9), 249–256.
- Freeze, R. A. & Cherry, J. A. (1977). *Groundwater*. Prentice-Hall.

- Hubbert, M. K. (1940). The theory of ground-water motion. *The Journal of Geology*, 785–944.
- Hubbert, M. K. & Willis, D. G. (1957). Mechanics of hydraulic fracturing1. *US Geological Survey*, 210, 153–168.
- Kampala, R. C. (2005). Lineamientos para el manejo de las aguas subterráneas a fin de mantener las características ecológicas de los humedales. Resolución IX.1 Anexo C ii.
- Kleppe, J. (2003). Buckley-leverett analysis. TPG4150 Reservoir Recovery Techniques 2003.
- Kleppe, J. (2013). Handout note 3: Review of relative permeabilities and capillary pressures. TPG4150 Reservoir Recovery Techniques 2013.
- Leluch, S. A.-V. (1972). On the solvability of an initial boundary-value problem in a model of dynamics of media with internal degrees of freedom. *Dynamics of Continuous Medium, Institute of Hydrodynamics, Novosibirsk*, (12), 26–51.
- Niño, Y. (2002). Método de los volúmenes finitos. MODELACION NUMERICA EN INGENIERIA HIDRAULICA Y AMBIENTAL.
- Pinder, G. F. & Celia, M. A. (2006). *Subsurface hydrology*. John Wiley & Sons.
- Sánchez, J. (2011). Ley de darcy y conductividad hidráulica. Departamento de Geología - Universidad de Salamanca (España).
- Sánchez, J. (2013). Conceptos de hidrogeología. Departamento de Geología - Universidad de Salamanca.
- Savioli, D. G. (2006). Notas sobre el modelo de buckley-leverett. Universidad de Buenos Aires.
- Standing, M. (1975). Notes on relative permeability relationships. *Proc., University of Trondheim, NTH, Norway*.
- Szymkiewicz, A. (2007). Numerical simulation of one-dimensional two-phase flow in porous media. *Arch. Hydro Eng. Environ. Mech*, 54, 117–136.
- Versteeg, H. K. (1995). *An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method, 2/E*. Pearson Education India.
- Zhang, Y. (2011). Groundwater flow and solute transport modeling. Dept. of Geology

& Geophysics - University of Wyoming.