



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL

**MÉTODO LAGRANGIANO MULTIESCALA PARA LA SIMULACIÓN DEL  
TRANSPORTE DE SOLUTOS EN MEDIOS PERMEABLES**

**TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA  
INGENIERÍA, MENCIÓN RECURSOS Y MEDIO AMBIENTE HÍDRICO**

**MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL**

**JOAQUÍN MIGUEL CORTÍNEZ VILLALOBOS**

PROFESOR GUÍA:  
PAULO HERRERA RICCI

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
CARLOS ESPINOZA CONTRERAS  
YARKO NIÑO CAMPOS  
JORGE SILVA SANCHEZ

SANTIAGO DE CHILE  
2015

Resumen de la tesis para optar a:  
Título de Ingeniero Civil y Grado de  
Magíster en Ciencias de la Ingeniería,  
Mención Recursos y Medio Ambiente Hídrico  
Por: Joaquín Miguel Cortínez Villalobos  
Fecha: Enero 2015  
Profesor Guía: Sr. Paulo Herrera Ricci

## MÉTODO LAGRANGIANO MULTIESCALA PARA LA SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE SOLUTOS EN MEDIOS PERMEABLES

Debido a su naturaleza geológica, los acuíferos presentan gran variabilidad de los parámetros hidrogeológicos en cortas distancias. Sin embargo, debido a restricciones computacionales y a la imposibilidad de medir parámetros a pequeña escala, la modelación de estos sistemas usualmente se realiza utilizando grillas numéricas con celdas de tamaño mucho mayor que la escala de la heterogeneidad del acuífero, lo que afecta la representación de los campos de velocidades simulados, los cuales no contienen toda la información de pequeña escala o alta frecuencia. El impacto en la simulación del transporte de solutos se traduce en menores tasas de mezcla y dilución, lo cual puede generar menores tasas de reacción en el caso de transporte reactivo.

Actualmente, se afronta este problema a través de métodos basados en el enfoque estocástico, en donde se utilizan conceptos probabilísticos para describir el flujo y el transporte en acuíferos. La teoría de la macrodispersión se basa en la descripción del movimiento de los solutos a través de las propiedades estadísticas del medio y busca cuantificar los efectos no modelados numéricamente. El coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo ( $D_b(t)$ ) está basado en esta teoría, y está definido de manera de capturar solo las fluctuaciones de velocidad de la escala inferior a la grilla numérica, modelando el efecto de éstas sobre la tasa temporal de deformación de plumas de soluto. Mientras se ha comprobado que la utilización del  $D_b(t)$  reproduce la deformación de plumas bajo ciertos supuestos, su uso para representar la mezcla de solutos no se ha intentado hasta ahora.

El objetivo de esta tesis es estudiar la posibilidad de extender la teoría del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo a procesos de mezcla para diversas condiciones de transporte. Para ello, se proponen dos metodologías para obtener un coeficiente de macrodispersión efectivo basado en el concepto del  $D_b(t)$  para caracterizar correctamente la tasa global de mezcla. La primera metodología propone un coeficiente de macrodispersión efectivo que es constante, mientras que la segunda metodología propone un coeficiente que evoluciona temporalmente con la simulación.

Los resultados obtenidos señalan que ambas metodologías son aplicables y presentan mejoras a la estimación de los procesos relacionados a la mezcla ocurridos en el medio permeable cuando se utiliza campos de velocidad que han perdido parte de su variabilidad numérica, obteniendo resultados satisfactorios para una amplia cantidad de parámetros y condiciones de transporte. Este trabajo permitió extender el concepto del  $D_b(t)$  a procesos de mezcla, donde la metodología de cálculo podría utilizarse con aplicaciones futuras en remediación o estudios de ingeniería. A futuro, el método propuesto podría ser verificado y mejorado con datos reales de sitios contaminados.

*Dedicado a  
mi familia*

## Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimientos a las siguientes personas y entidades, los cuales contribuyeron a completar este proceso que termina:

- Mi familia, por todos los esfuerzos realizados y el apoyo entregado.
- Al profesor guía, Paulo Herrera por el tema de investigación, por su motivación, disposición y contribuciones a la investigación durante el desarrollo de la tesis. Gracias por todo!
- Special thanks to Professor Albert Valocchi, without his help, the final result of the thesis wouldn't have been the same, and surely Paulo agrees with me on this matter, he was a professor for us both.
- A los miembros que integran la comisión, profesores Carlos Espinoza y Yarko Niño, por su importancia en mi formación académica y profesional, y al Señor Jorge Silva, por su buena disposición e interés por integrar este proyecto.
- A los profesores del departamento de Ingeniería Civil, en especial a los profesores de hidráulica de los cuales fui alumno. Además, aprovecho de agradecer al profesor Claudio Romero por su ayuda y buena onda, y al profesor Hector Urrutia por todo el conocimiento entregado.
- Mis compañeros del grupo de investigación con los que compartí durante estos años, espero que sigan creciendo en número y que por fin tengamos página web!
- No puedo olvidar a mis amig@s, en especial con los que he compartido durante estos últimos años y me han ayudado incondicionalmente, gracias!
- Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto Fondecyt #11110228, por las becas de "Viaje a congresos Magister RHMA" y de arancel del departamento de Ingeniería Civil de la Universidad de Chile.

# Tabla de contenido

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>III</b>
<b>Índice de tablas</b>	<b>VIII</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>IX</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Revisión de la literatura . . . . .	5
1.2.1. Antecedentes . . . . .	5
1.2.2. Modelo matemático . . . . .	9
1.2.3. Hidrogeología estocástica . . . . .	10
1.2.4. Tensor de macrodispersión . . . . .	10
1.3. Objetivos . . . . .	14
1.3.1. Objetivo principal . . . . .	14
1.3.2. Objetivos específicos . . . . .	14
1.4. Metodología del estudio . . . . .	15
1.5. Organización del documento . . . . .	17
<b>2. Metodología</b>	<b>18</b>
2.1. Algoritmo numérico . . . . .	18
2.2. Generación de escenarios de simulación . . . . .	20
2.3. Escalamientos temporales para procesos de mezcla . . . . .	23
2.3.1. Escalamiento para evaluar $D_b(t_\alpha)$ . . . . .	23
2.3.2. Escalamiento para evaluar $D_b(t_{mix})$ . . . . .	25

2.4.	Parámetros utilizados en el análisis . . . . .	30
2.4.1.	Momentos espaciales del soluto . . . . .	31
2.4.2.	Índice de dilución (Dilution Index) . . . . .	32
2.4.3.	Disipación escalar (scalar dissipation) . . . . .	33
2.4.4.	Coefficientes adicionales . . . . .	34
<b>3.</b>	<b>Estudios preliminares</b>	<b>35</b>
3.1.	Variabilidad de las simulaciones numéricas . . . . .	35
3.1.1.	Variabilidad del momento espacial de segundo orden . . . . .	36
3.1.2.	Variabilidad de la mezcla y dilución . . . . .	40
3.1.3.	Análisis y comentarios . . . . .	43
3.2.	Momentos espaciales para distintos grados de la heterogeneidad del medio . .	43
3.2.1.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	46
3.2.2.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	47
3.2.3.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	48
3.2.4.	Análisis y comentarios . . . . .	49
<b>4.</b>	<b>Transporte conservativo</b>	<b>50</b>
4.1.	Introducción . . . . .	50
4.2.	Definición de escenarios simulados . . . . .	51
4.3.	Momentos espacial de segundo orden ( $S_{xx}$ ) . . . . .	54
4.3.1.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	55
4.3.2.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	56
4.3.3.	Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	57
4.3.4.	Análisis y comentarios . . . . .	58
4.4.	Resultados de la dilución y mezcla . . . . .	59
4.4.1.	Índice de dilución para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	60
4.4.2.	Índice de dilución para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	61
4.4.3.	Índice de dilución para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	62
4.4.4.	Disipación escalar para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	63
4.4.5.	Disipación escalar para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	64
4.4.6.	Disipación escalar para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	65

4.4.7. Análisis y comentarios . . . . .	66
<b>5. Transporte reactivo</b>	<b>69</b>
5.1. Introducción . . . . .	69
5.2. Definición de escenarios simulados . . . . .	70
5.3. Resultados del transporte reactivo . . . . .	71
5.3.1. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	72
5.3.2. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	73
5.3.3. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	74
5.3.4. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ . . . . .	75
5.3.5. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ . . . . .	76
5.3.6. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ . . . . .	77
5.3.7. Análisis y comentarios . . . . .	78
<b>6. Conclusiones y recomendaciones</b>	<b>81</b>
6.1. Conclusiones . . . . .	81
6.2. Recomendaciones . . . . .	83
<b>Bibliografía</b>	<b>85</b>
<b>Anexos</b>	<b>91</b>
A.1. Estudio de las escalas involucradas en la dispersión . . . . .	91
A.2. Pluma ergódica delgada de contaminante . . . . .	95
A.3. Análisis del momento espacial de segundo orden para plumas pequeñas . . . . .	98
A.3.1. Momento espacial de segundo orden para las plumas . . . . .	100
A.3.2. Coeficiente de dispersión . . . . .	102
A.3.3. Variabilidad de las plumas para distintos valores de $\lambda_c$ . . . . .	104
A.4. Coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo . . . . .	106
A.5. Procesos de mezcla y reacción . . . . .	112
A.5.1. Derivación de transporte reactivo desde transporte conservativo . . . . .	112
A.5.2. Aplicación de las condiciones de borde e iniciales . . . . .	114
A.6. Métodos numéricos utilizados . . . . .	116
A.6.1. Smoothed Particle Hydrodynamics ( <i>SPH</i> ) . . . . .	116

A.6.2. Random Walk Particle-Tracking (RWPT) . . . . .	118
A.7. Comparación del método numérico de resolución: Pollock vs Explícito . . . . .	120
A.8. Resultados adicionales . . . . .	121
A.8.1. Tasa de disipación escalar (Scalar dissipation rate) . . . . .	121
A.8.2. Función de densidad de probabilidad de la concentración, $t \cdot U/I_Y =$ 35 y 70 . . . . .	124
A.9. Trabajo presentado en la AGU 2013 . . . . .	130

# Índice de tablas

2.1. Valores de $f_m$ calibrados para $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	26
3.1. Parámetros utilizados para las simulaciones de variabilidad. . . . .	36
3.2. Parámetros utilizados para las simulaciones de los momentos espaciales de la posición para distintos grados de heterogeneidad del medio permeable. . . . .	45
4.1. Parámetros utilizados en el transporte conservativo. . . . .	52
4.2. Series simuladas para cada experimento. . . . .	52
4.3. Valores del coeficiente de dispersión local y de macrodispersión de bloque efectivo utilizados. . . . .	53
4.4. Valores del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en el tiempo asintótico. . . . .	54
5.1. Valores del número de Damköhler ( $Da_d$ ) . . . . .	70
5.2. Parámetros utilizados en el transporte reactivo. . . . .	71
A.1. Parámetros utilizados en la prueba de los efectos dispersivos en un campo de velocidad uniforme. . . . .	92
A.2. Resumen de los coeficientes y parámetros involucrados en la simulación . . . . .	94
A.3. Parámetros de prueba de plumas locales. . . . .	99

# Índice de figuras

1.1. Comparación de los campos de velocidad y plumas de soluto para distintos tamaños de la discretización. . . . .	3
1.2. Comparación entre plumas de solutos generada con un CFV y un CGV para el transporte reactivo, luego de recorrer 50 escalas representativas del medio.	4
1.3. Comparación de la pluma de solutos bajo distintas condiciones y parámetros del transporte. . . . .	7
1.4. Esquema explicativo de las escalas importantes en la modelación de solutos.	11
2.1. Esquema explicativo del método SPH y RWPT. . . . .	19
2.2. Modelo conceptual del transporte conservativo. . . . .	19
2.3. Esquema conceptual del modelo numérico. . . . .	21
2.4. Comparación entre campos de velocidad real, el modelado y las fluctuaciones de velocidad . . . . .	22
2.5. Coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo para la dirección principal del movimiento versus el tiempo adimensional para distintos valores de $\sigma_Y^2$ y $\lambda_c$ .	24
2.6. $D_b(t)$ versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 25, considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	27
2.7. $D_b(t)$ versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 100, considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	28
2.8. $D_b(t)$ versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 250, considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	28
2.9. $D_b(t)$ versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 2500, considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	29
2.10. $D_L^e(t)$ versus tiempo adimensional para varios número de Péclet, considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	30
3.1. Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para 100 simulaciones de distintos campos $\ln(K)$ con $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y$ y para el promedio, considerando distintos números de realizaciones para su cálculo. . . . .	37

3.2.	Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para 100 simulaciones de distintos campos $\ln(K)$ con $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$ y para el promedio, considerando distintos números de realizaciones para su cálculo. . . . .	37
3.3.	Momento espacial de segundo orden del soluto para 10 realizaciones distintas del $\ln(K)$ y el valor promedio, considerando distintos $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , para un CFV con $\lambda_f = 0,2 \cdot I$ de largo. . . . .	39
3.4.	Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para distintos $\lambda_c$ asumiendo $\sigma_Y^2 = 0,2$ . . . . .	40
3.5.	Resultados de la varianza de la concentración obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones con $\sigma_Y^2 = 1$ , considerando un valor de $Pe = 25$ para distintos tamaños de la discretización de la grilla numérica y el uso de coeficientes de macrodispersión. . . . .	41
3.6.	Resultados de la varianza de la concentración obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones con $\sigma_Y^2 = 1$ , considerando un valor de $Pe = 2500$ para distintos tamaños de la discretización de la grilla numérica y el uso de coeficientes de macrodispersión. . . . .	42
3.7.	Comparación de campos logarítmicos de conductividad hidráulica y de velocidad, los cuales presentan distintos grados de heterogeneidad, con valores de $\sigma_Y^2 = (1; 3; 6)$ . . . . .	44
3.8.	Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad, $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ de largo. . .	46
3.9.	Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad, $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$ de largo. .	47
3.10.	Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad, $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$ de largo. .	48
4.1.	Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	55
4.2.	Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	56

4.3.	Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	57
4.4.	Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	60
4.5.	Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	61
4.6.	Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	62
4.7.	Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, para valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	63
4.8.	Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, para valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	64
4.9.	Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, para valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	65
5.1.	Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con $\sigma_Y^2 = 1$ para diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	72
5.2.	Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con $\sigma_Y^2 = 1$ para diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	73
5.3.	Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con $\sigma_Y^2 = 1$ para diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	74
5.4.	Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con $\sigma_Y^2 = (3; 6)$ para diferentes valores de $Pe = (25; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	75

5.5. Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con $\sigma_Y^2 = (3; 6)$ para diferentes valores de $Pe = (25; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	76
5.6. Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con $\sigma_Y^2 = (3; 6)$ para diferentes valores de $Pe = (25; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	77
A.1. Índice de dilución para un campo de velocidades uniforme, considerando distintos valores del número de Péclet y razones de los coeficientes de dispersión.	93
A.2. Evolución de una línea de contaminante asumiendo un valor de $Pe = 25$ , para distintos estados temporales luego del inicio. . . . .	95
A.3. Evolución de una línea de contaminante asumiendo un valor de $Pe = 2500$ , para distintos estados temporales luego del inicio. . . . .	96
A.4. Disipación escalar adimensional por su valor inicial versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas	96
A.5. Momento espacial de segundo orden adimensional por su valor inicial para concentraciones mayores a $\epsilon = 10^{-3}$ versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas. . . . .	97
A.6. Índice de dilución adimensional por su valor máximo versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas	97
A.7. Momento espacial de segundo orden adimensional versus tiempo adimensional, considerando distintos números de partículas para representar una pluma de solutos. . . . .	100
A.8. Comparación del momento espacial de segundo orden adimensional entre distintas realizaciones de plumas pequeñas y una pluma regional, para dos formas iniciales de distribución. . . . .	101
A.9. Comparación del momento espacial de segundo orden adimensional entre distintas realizaciones de plumas pequeñas y una pluma regional, para dos formas iniciales de distribución. . . . .	101
A.10. Comparación del coeficiente de dispersión del promedio de las realizaciones para las plumas locales respecto al resultado de una pluma ergódica, para el caso 1. . . . .	103
A.11. Comparación del coeficiente de dispersión del promedio de las realizaciones para las plumas locales respecto al resultado de una pluma ergódica, para el caso 2. . . . .	103
A.12. Momento espacial de segundo orden para plumas locales con distinta posición inicial del centro de masa a lo largo de una coordenada Y correspondiente al eje transversal al dirección principal de flujo, considerando que $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$ .	105

A.13. Coeficiente $D_b(t)$ versus el tiempo para distintos valores de $\lambda$ considerando $\sigma_Y^2 = 1$ . . . . .	110
A.14. Comparación entre los métodos de resolución numérica Pollock y Explícito . . . . .	120
A.15. Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	121
A.16. Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	122
A.17. Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. . . . .	123
A.18. Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización. . . . .	124
A.19. Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización. . . . .	125
A.20. Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización. . . . .	126
A.21. Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización. . . . .	127
A.22. Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización. . . . .	128
A.23. Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de $Pe = (25; 100; 250; 2500)$ y un CGV con una discretización de $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$ de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización. . . . .	129

# Nomenclatura

$D_b(t)$ : Coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo (Block-effective macrodispersion coefficient) evaluado en un tiempo  $t$ .

$CGV$ : Campo grueso de velocidades, no logra capturar toda la heterogeneidad del sistema.

$CFV$ : Campo fino de velocidades, logra capturar toda la heterogeneidad del sistema.

$D_L$ : Coeficiente de dispersión local.

$D_\infty$ : Coeficiente de macrodispersión

$\lambda_f$ : Longitud característica de una celda de una grilla fina del campo de velocidades.

$\lambda_c$ : Longitud característica de una celda de una grilla gruesa del campo de velocidades.

$t_\alpha$ : Tiempo constante característico del procesos de mezcla y dilución para un set de parámetros del problema.

$t_{mix}$ : Tiempo adaptable característico de la mezcla y dilución.

$Pe$ : Número de Péclet.

$Y$ : Campo logarítmico de conductividad hidráulica  $\ln(K)$ .

$I_Y$ : Escala integral del campo de conductividad hidráulica.

$\bar{Y}$ : Fluctuaciones de media cero capturada por la grilla numérica.

$\tilde{Y}$ : Fluctuaciones de media cero pertenecientes a la escala inferior a la grilla numérica.

$I_{\tilde{Y}}$ : Escala integral de la escala inferior de la grilla numérica.

$\sigma_Y^2$ : Varianza de  $Y$ , que es el campo de conductividad hidráulica log-normal.

$m_Y$ : Media del campo de conductividad hidráulica log-normal

$C_Y$ : Covarianza del campo de conductividad log-normal

$U$ : Velocidad media del campo de velocidad en la dirección principal del movimiento.

$\sigma_u^2$ : Varianza de las fluctuaciones de la escala inferior de la grilla numérica del campo de velocidades.

$X_{cm}$ : Posición del centro de masa de la pluma según la coordenada X.

$S_{xx}$ : Momento espacial de segundo orden de la pluma de solutos en el eje principal del movimiento.

$C_{peak}$ : Concentración máxima en el dominio para un tiempo dado.

$\sigma_C^2$ : Varianza de la concentración de un compuesto C.

$E$ : Entropía o volumen ocupado por la pluma diluida, relacionado al índice de dilución.

$SL$ : Largo de suavizado (Smoothing length), largo característico del método SPH.

$k_r$ : Tasa de reacción

*Spreading*: Es definido como la tasa de deformación de la pluma en las distintas direcciones y puede ser medido a través de la tasas de cambio del momento espacial de segundo orden del soluto.

$SD$ : Disipación escalar (Scalar Disipation).

$SDR$ : Tasa de disipación escalar (Scalar Disipation Rate).

$E$ : Índice de dilución (Dilution Index).

$SPH$ : Smoothed Particles Hydrodynamics method.

$RW$ : Random Walk Particle Tracking method.

$SRF$ : Función aleatoria espacial (Space Random Function).

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

El transporte de solutos en aguas subterráneas ha ganado importancia en la actualidad, por la mayor preocupación existente respecto a la contaminación de los acuíferos debido a causas antropogénicas o naturales, en conjunto con un mayor interés en optimizar el manejo de los recursos hídricos. Es por este motivo que se han desarrollado y utilizado modelos matemáticos y numéricos complejos como herramientas adicionales para la toma de decisiones y la estimación de los procesos que ocurren en los medios permeables.

Debido a la naturaleza geológica de los acuíferos naturales, estos presentan gran variabilidad de los parámetros que definen al medio poroso permeable (información de la composición del suelo, conductividad hidráulica, transmisividad hidráulica, porosidad del suelo, coeficientes de almacenamiento, parámetros estadísticos de la distribución del medio, concentraciones de especies involucradas, niveles de salinidad, nivel freático de la napa, entre otros) en distancias relativamente cortas del terreno (escala de los metros). Lo anterior dificulta la estimación de los parámetros y de los procesos físicos, químicos o biológicos que ocurren en el medio. Por lo tanto, si es que se desea caracterizar al medio poroso fielmente, así como los procesos que ocurren en él, es necesaria una descripción con un alto nivel de detalle (Juanes y Tchelepi, 2008). Debido a las dimensiones de las zonas de estudio, y la gran variabilidad presente de los parámetros que lo definen, la toma de muestras para caracterizar completamente al acuífero se vuelve inviable por factores principalmente económicos (Rubin, 2003).

Esta incertidumbre asociada en la caracterización de las propiedades del medio poroso, ha llevado a los investigadores en el área a tratar los efectos de la heterogeneidad del medio y la predicción de la incertidumbre asociada a éste, describiéndolo como un proceso estocástico (Dagan, 1989). Este tipo de enfoque toma las variables hidrogeológicas como funciones aleatorias espaciales (Space Random Functions, SRFs), lo que consiste en emplear un modelo matemático para modelar la variabilidad espacial usando herramientas estadísticas como es la media, la varianza, o una función de distribución de probabilidades.

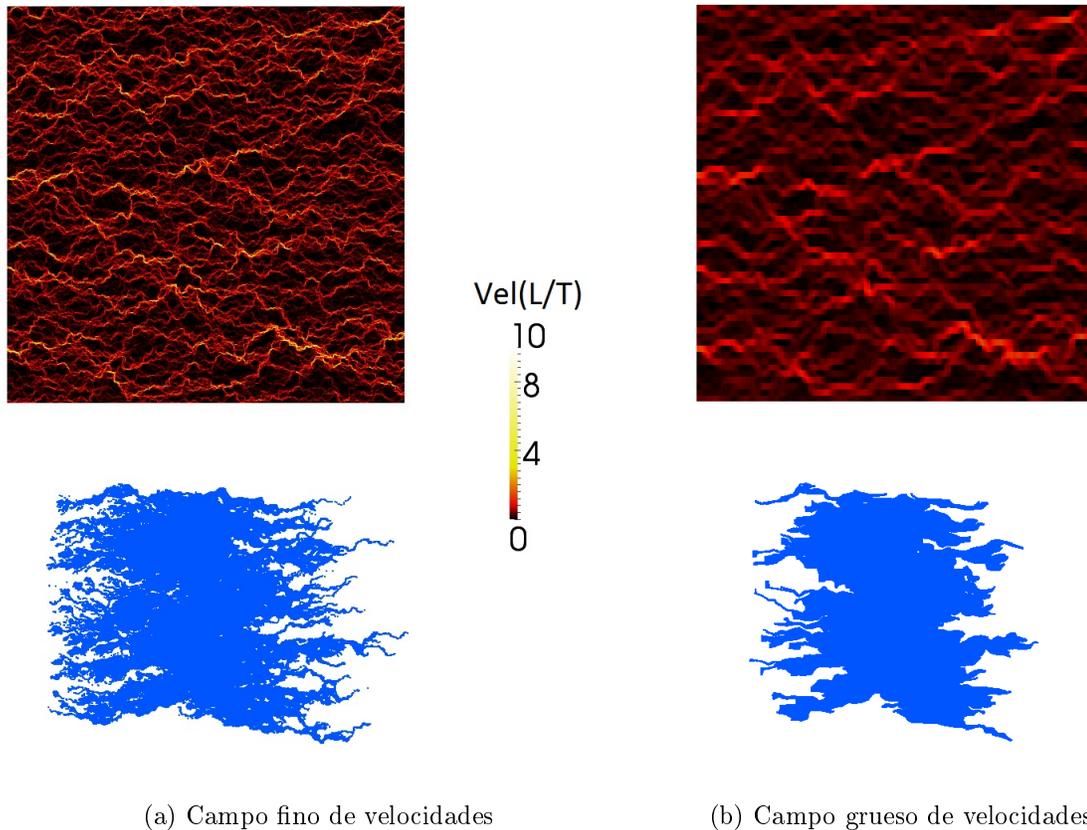
Esta información del campo de velocidad que no es capturada por el modelo numérico es muy importante cuando se caracterizan los procesos que ocurren en la pequeña escala del terreno (escala inferior al tamaño de la grilla numérica), como es la deformación de la pluma de soluto producto de la heterogeneidad, que ocurre en la escala de los metros (producto de las fluctuaciones de velocidad y puede ser cuantificado a través de la tasas de cambio del momento espacial de segundo orden de la pluma), o en el caso de los procesos químicos y biológicos los cuales ocurren en la escala molecular (Dagan, 1989).

Las reacciones químicas y la mezcla de solutos ocurren en una pequeña interfaz muy irregular, donde existe intercambio de masa entre los distintos compuestos cuando ocupan un mismo lugar simultáneamente para un tiempo dado (Cirpka y Valocchi, 2007). Esta interfaz no es correctamente representada al existir una pérdida de la variabilidad numérica, por ejemplo cuando se ha filtrado el campo de velocidad asociado al medio heterogéneo en estudio, el cual ha sido homogeneizado como consecuencia de la falta de información de pequeña escala espacial, siendo infactible caracterizarlo completamente. Es un factor crítico cuando se evalúan procesos de mezcla, tales como la reacción, difusión o dilución en el medio poroso, obteniéndose una estimación errada respecto a la solución real del sistema correspondiente a un medio que captura completamente toda la heterogeneidad. La tasa de mezcla de las reacciones muy rápidas, en general, es controlada por la tasa a la cual los reactantes se mezclan al entrar en contacto, por lo tanto la mezcla está fuertemente controlada por las grandes variaciones del flujo en pequeñas distancias, generada por los complejos patrones de heterogeneidad del medio poroso real (Chiogna et al., 2012; de Dreuzy et al., 2012).

La Figura 1.1 corresponde a una comparación de un caso de transporte conservativo resuelto para dos campos de velocidades generado a partir de un mismo campo de conductividad hidráulica el cual tiene una distribución logarítmica y se designa como  $Y = \ln(K)$ , el campo de la izquierda en la Figura 1.1 utiliza un *campo fino de velocidades* (CFV) compuesto por celdas de tamaño suficientemente pequeño para capturar completamente la heterogeneidad del medio, y el de la derecha utiliza un *campo grueso de velocidades* (CGV) generado a partir de un proceso de upscaling<sup>1</sup> que asegura la conservación de masa donde las celdas son 16 veces más largas que las del campo original, perdiendo parte de su variabilidad y por lo tanto no captura completamente la heterogeneidad del medio. En la Figura 1.1 los gráficos superiores corresponden al campo de velocidades, el gráfico de la izquierda presenta un mayor detalle de la distribución de las velocidades y canales de flujo, con una marcada presencia de velocidades muy altas o bajas distribuidas en el dominio, en comparación con el gráfico de la derecha, el cual cuenta con una menor resolución y detalle de la distribución. En los gráficos inferiores se presentan las respectivas plumas de soluto resueltas utilizando los campos de velocidad anteriormente señalados luego de recorrer alrededor de 30 escalas integrales ( $I_Y$ , es explicado más adelante en detalle) del terreno desde la posición inicial. La Figura 1.1a presenta una forma más irregular en comparación a la Figura 1.1b, donde la pluma tiene un contorno suavizado debido a la pérdida de variabilidad, lo que se traduce en una estimación errónea al utilizar un campo de velocidades que no captura completamente la heterogeneidad del medio.

---

<sup>1</sup>upscaling, u homogeneización, es el proceso de reemplazar un medio heterogéneo por uno con menor resolución disminuyendo el número de celdas al representarlo numéricamente.



(a) Campo fino de velocidades

(b) Campo grueso de velocidades

Figura 1.1: Los gráficos superiores representan la magnitud del campo de velocidades, y los gráficos inferiores representan la pluma de solutos luego de un tiempo de simulación desde el inicio. Los gráficos de la izquierda corresponden a un campo fino de velocidades (CFV) (Figura 1.1a) en comparación con un campo grueso de velocidades correspondiente al gráfico de la derecha (CGV) (Figura 1.1b) que tiene un largo de discretización 16 veces más grande.

La Figura 1.2 representa la comparación de dos plumas de solutos para el transporte reactivo, indicando la distribución de las concentraciones en el dominio luego de recorrer alrededor de 50 escalas integrales del medio. El gráfico de la izquierda es generada a partir de un CFV y el gráfico de la derecha es generada utilizando un CGV (con celdas 256 veces más grandes). Es posible apreciar que para un mismo tiempo de simulación los solutos presentan una misma tendencia general de movimiento, visualizado a través de las curvaturas y distribución a grandes rasgos de la pluma, sin embargo al observar en el detalle y compararlas a una escala pequeña, presentan una distribución de las concentraciones distintas. Debido a que la mezcla es afectada por la deformación de la pluma y ocurre en una pequeña interfaz donde los solutos entran en contacto pudiendo reaccionar y mezclarse, resulta vital la descripción en detalle de la pequeña escala para reproducir correctamente las tasas de mezcla y la producción de compuestos. Según de Dreuzy et al. (2012) “las fluctuaciones de velocidad crean un potencial para la mezcla, ya que generan desorden y un mayor área de contacto entre aguas residentes e invasoras”. Por lo tanto, la pérdida de heterogeneidad influye directamente en los procesos químicos, físicos y biológicos que ocurren en el transporte de solutos en medios porosos permeables. Además, el gráficos de la izquierda, presenta un mayor desorden en su

distribución y abarca un área de dilución y mezcla de mayor tamaño en comparación el gráfico de la derecha, el cual presenta un contorno suavizado en sus extremos. Estas diferencias reflejadas en la evolución de la forma de la pluma y distribución de las concentraciones son producto de la pérdida de variabilidad del campo de velocidades contenido en el modelo, lo que repercute en las estimaciones.

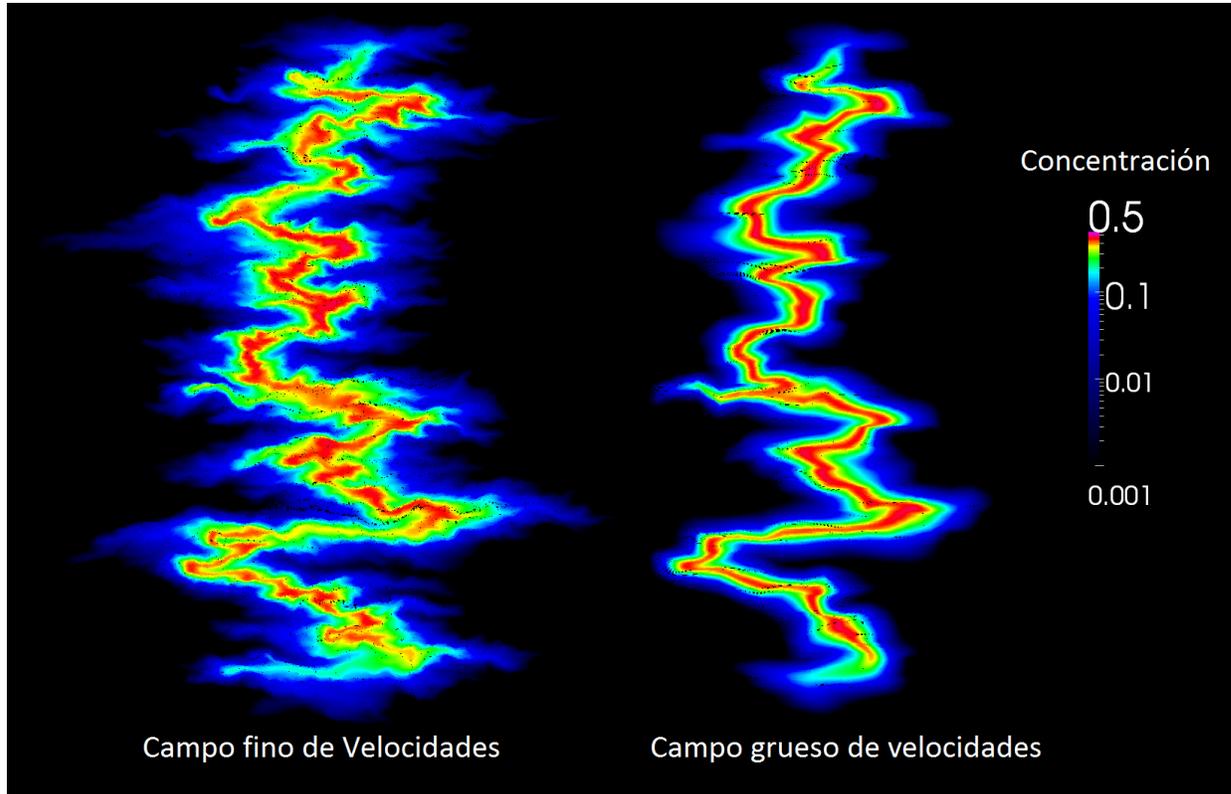


Figura 1.2: Comparación entre plumas de solutos generada con un CFV y un CGV para el transporte reactivo, luego de recorrer 50 escalas representativas del medio.

En esta tesis se estudia la factibilidad de reproducir la tasa global de mezcla cuando se ha perdido variabilidad numérica debido a la utilización de CGV en problemas de transporte de solutos en medios porosos permeables, bajo distintos grados de heterogeneidad. Para esto, se utiliza un coeficiente efectivo de macrodispersión, basado en el concepto del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo (block-effective macrodispersion coefficient,  $D_b(t)$ ), derivado por Rubin et al. (1999). Este coeficiente incluye la variabilidad que no es capturada por el campo de velocidades, si son conocidos los parámetros estadísticos del campo de conductividad hidráulica. Este  $D_b$  ha sido empleado para estimar correctamente la deformación de la pluma de solutos siempre y cuando, el grado de heterogeneidad sea bajo, sin embargo no se han podido estimar correctamente los procesos de mezcla al emplearlo, sobrestimándolos significativamente. Por lo tanto, se busca presentar una metodología de cálculo de dicho coeficiente, el cual funcione para una amplia cantidad de condiciones de transporte y parámetros de flujo de mayor complejidad a las resueltas actualmente en la literatura, y que logre reproducir correctamente los procesos de mezcla.

## 1.2. Revisión de la literatura

En esta sección se revisan los estudios más relevantes para el desarrollo de esta investigación, considerando la teoría matemática involucrada en el problema y describiendo las ecuaciones que gobiernan el transporte conservativo y reactivo en medios heterogéneos permeables.

### 1.2.1. Antecedentes

La caracterización de la distribución de la heterogeneidad y de las propiedades hidráulicas para la descripción del subsuelo es una tarea difícil. Los complejos patrones de flujo debido a la variabilidad espacial y la imposibilidad de representarlos completamente, lleva a una incertidumbre asociada al transporte de soluto en un medio permeable. La heterogeneidad del medio determina la dispersión de los solutos en el subsuelo y puede aumentar las tasas de mezcla y reacciones. En el largo plazo, la heterogeneidad geológica debería incrementar la tasa de dilución, debido a que la variabilidad espacial del campo de velocidades tenderá a deformar las plumas y volverlas más irregulares (Kitanidis, 1994).

Uno de los estudios más importantes *in-situ* es el caso del MADE (Macrodispersion Experiment site) (Zheng et al., 2011). Diversos autores han concluido que pese al gran esfuerzo para caracterizar correctamente la heterogeneidad del acuífero utilizando una gran resolución para representar la escala espacial, al resolver el transporte de solutos mediante las “Ecuaciones de Advección-Dispersión” (EAD) no se ha obtenido la solución esperada (Fernández-García et al., 2008). Esto, debido a la importancia de la resolución espacial no capturada por el modelo que esta relacionado directamente con la escala integral del medio, indicando que es necesario compensar la falta de variabilidad si se desea estimar correctamente el transporte (Feehley et al., 2000; Liu et al., 2004).

Debido a los motivos anteriormente expuestos, los investigadores han desarrollado métodos basados en el enfoque estocástico, utilizando conceptos probabilísticos para describir el flujo y el transporte en los medios reales. En este enfoque, las variables espaciales son tratadas como procesos estocásticos (Gelhar y Axness, 1983; Dagan, 1989; Rubin, 2003).

Para incluir los efectos no modelados al momento de describir el comportamiento de los solutos en medios heterogéneos se utiliza el concepto de la “macrodispersión” (Dagan, 1984, 1989; Rubin et al., 1999, 2003; Rubin, 2003; De Barros y Rubin, 2011), teoría que está basada en el método de los momentos espaciales de la pluma. Los tensores de macrodispersión fueron desarrollados para estudiar el transporte de solutos utilizando la ecuación clásica de advección-dispersión en medios con campos de velocidad que presentan variabilidad espacial. El coeficiente de macrodispersión toma en cuenta toda la heterogeneidad del acuífero (Dagan, 1989), y no diferencia entre escalas involucradas.

Estudios de Gelhar y Axness (1983) y Dagan (1984, 1989) entre otros, han estudiado la apli-

cación de esta teoría en la estimación de la dispersión para plumas ergódicas<sup>2</sup>. Estos trabajos han demostrado los mecanismos de la macrodispersión, explicando las tasas a las cuales la dispersión existe en formaciones heterogéneas a escala del terreno, y han sugerido metodologías para calcular las tasas de dispersión utilizando el enfoque estocástico, correlacionando la variabilidad espacial de las velocidades o de la conductividad del medio. Debido a que este coeficiente no distingue entre escalas involucradas en el problema, al implementarse utilizando los típicos métodos de resolución numérica basados en la EAD, se sobrestiman las tasas de mezclas afectando a los distintos procesos involucrados en el transporte, siendo posible estimar correctamente la evolución del momento espacial de segundo orden del soluto, no así los procesos de mezcla.

Por otro lado, gracias a los trabajos de Rubin et al. (1999) y Rubin (2003), el cual deriva una forma evolucionada de dicho coeficiente, que lleva por nombre “macrodispersión de bloque efectivo” (block-effective macrodispersion coefficient), es posible capturar la heterogeneidad del medio que no logra representar la grilla numérica de velocidades, debido a la utilización de una discretización numérica de mayor longitud a la requerida para representar con toda la resolución necesaria la variabilidad del campo de velocidades del medio heterogéneo. Este coeficiente toma en cuenta los efectos no modelados de la heterogeneidad del campo de velocidades, pudiendo ser utilizados cuando la conductividad hidráulica es modelada a través de un valor efectivo (De Barros y Rubin, 2011).

Utilizando este coeficiente es posible estimar correctamente los momentos especiales de la pluma de solutos cuando el medio permeable cuenta con un grado bajo a medio de heterogeneidad, propiedad caracterizada por la varianza del campo de conductividades hidráulica (i.e.,  $\sigma_Y^2 < 1$ ). Este rango de validez se debe a que la teoría de la macrodispersión está basada en el método de las perturbaciones (Dagan, 1989), que asume que los términos de mayor orden al cuadrático, para la varianza de  $\ln(K)$ , son despreciados al asumir que  $\sigma_Y^2 < 1$ .

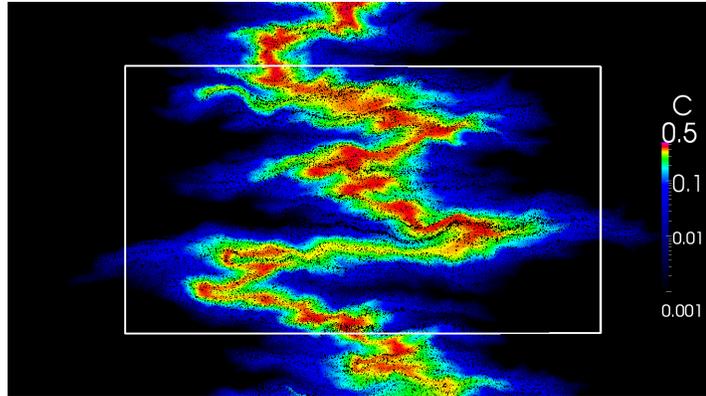
Para la derivación de  $D_b(t)$ , Rubin et al. (1999) utilizaron filtros paso-alto sobre la covarianza que describe el campo de flujo, resultado que sustituyeron en la expresión derivada por Dagan (1989) para estimar el coeficiente de macrodispersión. Posteriormente Rubin et al. (2003) extendieron la utilización del coeficiente propuesto para ser aplicado a plumas de contaminante con menores dimensiones (caso no-ergódico), con el fin de cubrir una mayor cantidad de casos y condiciones del transporte no analizadas en trabajos anteriores. Este enfoque requiere que la heterogeneidad contenida en la escala de la grilla numérica sea resuelta completamente por ésta, y que la variabilidad no capturada se encuentre contenida en la escala

---

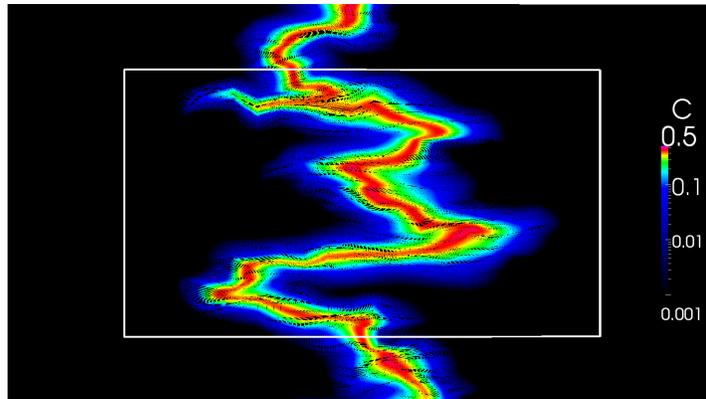
<sup>2</sup>La condición de ergodicidad es una equivalencia entre el conjunto de experimentos y la estadística espacial. Ocurre cuando todos los estados del sistema, en este caso los patrones de la variabilidad espaciales, son precedidos por una función aleatoria espacial (Space Random Function, SRF) del modelo (explicado anteriormente), y son observados en un solo experimento. La ergodicidad operacional es una condición menos restrictiva. Una variable que se dice ergódica puede serlo operacionalmente respecto a una estadística dada, si la variación de los coeficientes tiene una media espacial pequeña y ésta se vuelve a su vez más pequeña si la escala total del dominio crece. Bajo condiciones ergódicas, los coeficientes de macrodispersión son conocidos de manera determinista (Rubin, 2003).

inferior a la grilla numérica de velocidades (Nowak y Cirpka, 2006).

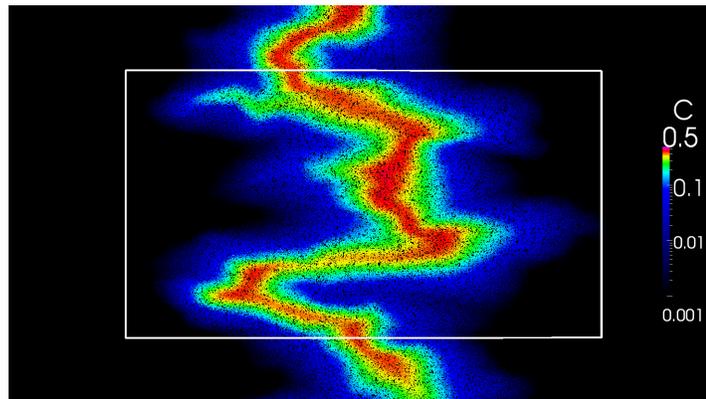
La Figura 1.3 es un acercamiento realizado a una misma zona del dominio para tres plumas de solutos bajo transporte reactivo, estos experimentos se diferencian según la cantidad de variabilidad capturada por el campo de velocidades y por la inclusión de coeficientes  $D_b(t)$ .



(a) Campo fino de velocidades



(b) Campo grueso de velocidades



(c) CGV incluyendo un coeficiente macrodispersivo

Figura 1.3: Comparación de la pluma de solutos bajo distintas condiciones y parámetros del transporte.

La Figura 1.3a corresponde a la pluma de solutos resuelta utilizando un CFV, la Figura 1.3b está generada utilizando un CGV y la Figura 1.3c está generada utilizando un CGV con la adición del coeficiente macrodispersivo  $D_b$ . Al igual que en la Figura 1.2, existen marcadas diferencias en la distribución de la concentración en la pequeña escala del terreno para los distintos casos analizados, sin embargo al utilizar un coeficiente de macrodispersión (ver Figura 1.3c) se obtiene una área de mezcla mucho mayor en comparación al caso sin coeficientes de macrodispersión adicionales, utilizando un CGV (ver Figura 1.3b), y similar en área al caso resuelto utilizando un CFV (Figura 1.3a). Al resolver el transporte utilizando un CGV adicionando el coeficiente  $D_b$ , resultado que corresponde a la Figura 1.3c, no se logra reproducir en detalle la forma de la pluma, como son sus contornos, prolongaciones y distribución de la concentración a escala pequeña respecto a la resolución obtenida utilizando un CFV, debido a que este último al capturar completamente la heterogeneidad del medio posee un nivel de detalle mucho mayor, lo que afecta la forma en la que se distribuye el soluto. Sin embargo, al agregar dispersión adicional al movimiento de la pluma de solutos a través del coeficiente de macrodispersión se consigue un aumento del área de mezcla y dilución, lo que se traduce en un incremento de las tasas global de mezcla y una mayor producción de compuestos.

Se ha encontrado que los modelos en medios heterogéneos permeables (utilizando coeficientes de macrodispersión para cuantificar la mezcla de solutos) sobrestiman significativamente las tasas de dilución y reacción observadas en el terreno (Kitanidis, 1994; Cirpka, 2002; Lawrence y Rubin, 2007; Kapoor et al., 1997; Rajee y Kapoor, 2000). En el trabajo de Cirpka (2002) y de los autores Janssen et al. (2006), los cuales utilizaron coeficientes de dispersión efectivos que actúan en la escala local del problema (Dentz et al., 2000b), para mejorar la cantidad de mezcla obtenida en transporte reactivo, para una sola condición de transporte y considerando un medio con un grado de heterogeneidad muy bajo, obteniendo como resultado la correcta estimación de la mezcla pero errando en la modelación de la deformación de la pluma de solutos producto de las fluctuaciones de velocidad, lo cual es cuantificado a través del momento espacial de segundo orden del soluto.

A diferencia de los modelos utilizados por los autores anteriores, Herrera et al. (2009) ha propuesto un modelo basado en el enfoque Lagrangiano multi-escala para la simulación del transporte de solutos en medios permeables, el cual utiliza dos coeficientes de dispersión para evaluar separadamente los efectos de las distintas escalas involucradas en el problema. Un primer coeficiente representa la dispersión en la escala local, mientras que el segundo, representa los efectos adicionales de la heterogeneidad que no han sido capturados, empleando un coeficiente de macrodispersión. Por las razones anteriormente expuestas, este modelo numérico será utilizado en el desarrollo de la presente tesis.

## 1.2.2. Modelo matemático

La descarga específica en un medio permeable saturado a partir de la ley de Darcy se define como  $\mathbf{q}$  [ $LT^{-1}$ ]:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla\phi \quad (1.1)$$

donde  $\mathbf{q}$  tiene unidades de velocidad y representa la tasa de flujo volumétrico por unidad de área,  $\mathbf{K}$  [ $LT^{-1}$ ] es el tensor que representa la conductividad hidráulica, y  $\phi$  [ $L$ ] es la carga hidráulica.

Utilizando la ecuación (1.1) bajo condiciones estacionarias, además de asumir conservación de masa en el volumen de control seleccionado, se puede obtener la ecuación de flujo para aguas subterráneas en régimen estacionario (Bear, 1988):

$$\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla\phi) = 0 \quad (1.2)$$

Utilizando la ecuación (1.2) y asumiendo la ley de Fick, es posible derivar la ecuación diferencial que describe el transporte reactivo en la escala local, asumiendo porosidad constante (Bear, 1988; Steefel y MacQuarrie, 1996):

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C_k) - \mathbf{v} \cdot \nabla C_k + R_k(c) \quad k = 1, \dots, m \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = R_k(c) \quad k = m + 1, \dots, M \quad (1.4)$$

$C_k$  es la concentración de la especie  $k$  de soluto en una partícula de fluido [ $ML^{-3}$ ],  $t$  [ $T$ ] es el tiempo,  $v=q/\theta$  [ $LT^{-1}$ ] es la velocidad de poros con porosidad  $\theta$  [-],  $\mathbf{D}$  es el coeficiente de dispersión hidrodinámica [ $L^2T^{-1}$ ],  $R_k$  [ $ML^{-3}T^{-1}$ ] es la tasa total de reacción de la especie  $k$ ,  $c=(C_1, \dots, C_M)$  es el vector de concentraciones,  $m$  es el número de especies o componente en la fase acuosa (especies móviles), y  $M$  es el número total de especies en el medio. La ecuación (1.3) describe el cambio de concentraciones debido a la mezcla, advección y reacciones químicas.

Para un medio poroso que presenta isotropía espacial, el tensor de dispersión (Scheidegger, 1961; Bear, 1988),  $\mathbf{D}$  puede ser calculado con la siguiente fórmula:

$$D_{ij} = (\alpha_T|v| + D^m)\delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T)\frac{v_i}{v_j}|v| \quad (1.5)$$

donde  $\alpha_L$  y  $\alpha_T$  son las dispersividades longitudinales y transversales [ $L$ ],  $D^m$  es la difusión molecular [ $L^2T^{-1}$ ], y  $\delta_{ij}$  es el delta de Kronecker. En la mayoría de los casos  $\alpha_T/\alpha_L \ll 1$ .

### 1.2.3. Hidrogeología estocástica

La dificultad para caracterizar el medio poroso y la incertidumbre asociada a éste, han llevado a los investigadores en el área a tratar los efectos asociados a la heterogeneidad del medio a través de un modelo hidrogeológico donde las variables son caracterizadas como “funciones aleatorias espaciales” (*SRF*), que es un modelo matemático empleado para modelar la variabilidad espacial usando herramientas estadísticas, como es el valor esperado, la varianza, o una función de distribución de probabilidades.

Definido lo anterior, es posible describir geoestadísticamente un acuífero (Dagan, 1989, 1984; Rubin et al., 1999, 2003; Rubin, 2003; De Barros y Rubin, 2011). La descripción más común para caracterizar un medio permeable es representándolo como un campo log-normal de conductividades hidráulicas definido como  $Y = \ln(K)$ , con un valor esperado  $m_Y$ , una varianza  $\sigma_Y^2$ , una función de correlación del medio  $C_Y$  y una longitud característica llamada escala integral  $I_Y$ . En esta tesis se consideró un medio isotrópico en 2-D, el cual tiene una función de correlación exponencial con la siguiente forma:

$$C_Y(r) = \sigma_Y^2 \exp \left[ - \sqrt{\left( \frac{r_1^2}{I_{Y,1}^2} + \frac{r_2^2}{I_{Y,2}^2} \right)} \right] \quad (1.6)$$

donde  $I_{Y,1}$  y  $I_{Y,2}$  son las escalas integrales del campo log-normal para las direcciones  $x_1$  y  $x_2$ , respectivamente. Algunas dimensiones y escalas importantes en la modelación hidrogeológica son apreciables en la Figura 1.4, como son: las dimensiones del dominio ( $x_i$ ), las dimensiones de soluto ( $l_i$ ), escala integral del medio ( $I_{Y,i}$ ) tamaño de la discretización ( $\lambda_i$ ), posición del centro de masa de la pluma en el tiempo ( $R(t)$ ), etc.

Una vez definidos los parámetros básicos en la modelación de solutos en medios permeables a través del enfoque estocástico, es posible describir las principales características y coeficientes derivados de la teoría de la macrodispersión.

### 1.2.4. Tensor de macrodispersión

La modelación de la migración de solutos en el espacio utilizando coeficientes de difusión y/o dispersión es un concepto comúnmente utilizado. Este enfoque está basado en la ley de Fick, la cual postula que el flujo es proporcional al gradiente de concentraciones. La constante de proporcionalidad es un coeficiente de difusión molecular o dispersión. En el caso de la difusión

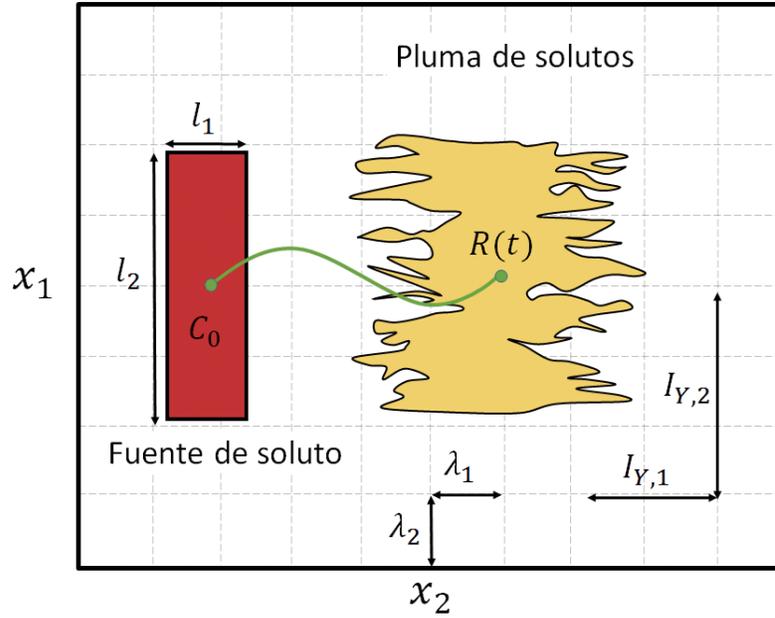


Figura 1.4: Esquema explicativo de las escalas importantes en la modelación de solutos.

molecular se considera un valor isotrópico del coeficiente de difusión  $D_{m,ij} = D_m \delta_{ij}$  para modelar los flujos dispersivos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} (D_{m,ij} \frac{\partial C}{\partial x_i}) \quad (1.7)$$

Es posible conocer de manera determinista el valor de la concentración  $C$ . Debido a que la escala característica del dispositivo para medir la concentración  $C$  en laboratorio, genera promedios espaciales de mayor longitud a la característica del proceso (mayor a la longitud molecular), por lo tanto la medición obtenida representa el promedio de un elevado número de partículas o moléculas que componen la muestra, siendo posible describir el movimiento del conjunto de ellas de manera determinista (McComb, 1992).

Los coeficientes de dispersión son introducidos en la hidráulica de aguas subterráneas, para modelar el transporte de solutos en medios permeables basándose en la analogía con la difusión molecular. Para el transporte de solutos a través de la ecuación de conservación de masa se tiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i C) = \frac{\partial}{\partial x_j} (D_{L,ij} \frac{\partial C}{\partial x_i}) \quad (1.8)$$

La ecuación (1.8) es llamada comúnmente *ecuación de Advección-Dispersión* (EAD) y modela el transporte a la escala de Darcy, donde  $D_{L,ij}$  modela las fluctuaciones de velocidad a escala de poros y su interacción con la difusión molecular, y  $V_i$  es la distribución de velocidades conocida. Si la velocidad es nula se rescata la ecuación (1.7).

Cuando se modela el transporte a la escala real del terreno, es posible reconocer heterogeneidades, las cuales pueden tener grandes dimensiones y presentar variaciones significativas a lo largo de su extensión. En este caso se puede garantizar una mejor estimación entre las mediciones y lo predicho por la ecuación (1.8) al utilizar los coeficientes de macrodispersión (Rubin, 2003). El transporte es modelado a través de una variación de la ecuación (1.8) al promediar sobre un volumen mayor:

$$\frac{\partial \langle C \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \langle C \rangle_L) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (D_{L,ij} + D_{\infty,ij}) \frac{\partial \langle C \rangle_L}{\partial x_i} \right] \quad (1.9)$$

donde  $D_{\infty,ij}$  ( $i, j = 1, \dots, m$ ), es el tensor de macrodispersión y modela las fluctuaciones de velocidad a la escala de Darcy,  $\langle C \rangle_L$  es el valor esperado de la concentración promediado en un volumen de escala  $L$ ,  $U$  es el vector de velocidad media del fluido y se asume una porosidad uniforme del medio. El coeficiente de dispersión  $D_{\infty,ij}$  en la ecuación (1.9) toma en cuenta los efectos pertenecientes a las grandes escalas de heterogeneidad que existen en los sitios reales, y por lo tanto, se agrega el prefijo de “*Macro*” a este coeficiente. La variabilidad de la velocidad, en conjunto con el coeficiente de dispersión local, son los principales mecanismos responsables de la deformación de la pluma de solutos en formaciones heterogéneas (Michalak y Kitanidis, 2000).

Además, es posible notar que no existen diferencias conceptuales entre las ecuaciones (1.8) y (1.9), aunque en esta última se reconoce la concentración  $C$  explícitamente como una función aleatoria, por lo cual es necesario considerar que la concentración media es, además, el valor promedio de ellas. De la ecuación (1.9) se desprende que en cualquier situación excepto cuando el campo de flujo es conocido de manera determinista, la concentración no puede ser obtenida de la misma manera.

La ecuación de difusión es una herramienta muy utilizada actualmente para las simulaciones y estimaciones del comportamiento de solutos en medios permeables. Para aplicaciones ingenieriles, la escala asociada a la heterogeneidad del terreno es mucho más grande que la escala asociada a las muestras *in-situ*, por lo tanto la concentración no es predicha correctamente por (1.8), obteniéndose un comportamiento no-Fickiano o anómalo, causado principalmente por la heterogeneidad de los terrenos (Rubin, 2003). Otro punto importante para la utilización de la EAD al modelar los momentos espaciales de los solutos, es la dependencia de la solución con las escalas del cuerpo de solutos simulado, la cual debe ser mucho mayor a la longitud característica de la heterogeneidad del medio ( $L_{pluma} \gg I_Y$ ). Por lo tanto, la EAD no puede ser utilizada para predecir lo que ocurre en un experimento de terreno o laboratorio de manera determinista, y su uso conlleva a grandes errores en la estimación de los procesos que ocurren en el medio (Rubin, 2003).

Dagan (1984) derivó el tensor de macrodispersión para el enfoque Lagrangiano, al considerar una pluma de solutos transportada en el medio como un grupo de partículas, obteniéndose el desplazamiento total de la partícula  $p$  en el tiempo  $t$ ,  $X_p(t)$  dado por:

$$X_p(t) = \int_0^t V_p(t') dt' \quad (1.10)$$

donde  $V_p$  es la velocidad Lagrangiana. Con esto es posible relacionar estadísticamente el desplazamiento de las partículas con el tensor de macrodispersión:

$$D_{\infty,ij} = \frac{1}{2} \frac{dX_{ij}(t)}{dt} \quad (1.11)$$

donde  $X_{ij} = \langle X_i - \langle X_i \rangle \rangle \langle X_j - \langle X_j \rangle \rangle$  es el tensor de covarianza y además representa el tensor del momento espacial del soluto.

Si se cumple la condición obtenida por Kitanidis (1988), de que la escala de la pluma en la dirección transversal al flujo medio sea grande en extensión respecto a la escala de la heterogeneidad del medio, es posible definir bajo estas condiciones el tensor de dispersión basado en el movimiento estadístico de las partículas, como es definido en la ecuación (1.11).

Según el trabajo de Quinodoz y Valocchi (1990), se describe la dependencia de la distancia normal de la pluma a la dirección principal de flujo. En su trabajo presentan la evolución del momento espacial de segundo orden del soluto, valor computado para distintas longitudes normales de ésta versus un tiempo adimensionalizado. Los resultados corresponden a un campo hidráulico de conductividades  $\ln(K)$ , el cual es isotrópico, con una covarianza exponencial y con un valor de la varianza del campo de conductividades de  $\sigma_Y^2 = 0,5$ . El cuerpo de soluto corresponde a una inyección instantánea de una línea de contaminante de largo  $l_2$  en la dirección normal al flujo. El modelo de flujo es en dos dimensiones, con cargas hidráulicas constantes en los bordes, lo que corresponde a una metodología similar a los estudios presentados en esta tesis, con una dirección de flujo principal. El transporte fue resuelto en Quinodoz y Valocchi (1990) utilizando un método basado en partículas, donde se simuló una realización para los distintos tamaños de  $l_2$ , simulando condiciones donde la pluma es ergódica y otras donde no. El resultado de sus simulaciones muestra que la curva teórica  $\langle S_{11} \rangle$  tiene una pendiente igual a  $2D_{11}$ . Además se observa que cuando el valor de  $l_2$  crece, la solución numérica es cada vez más cercana a la solución analítica. Por lo tanto, se puede considerar que el valor de  $l_2 = 90 \cdot I_Y$  asegura que la pluma resultante cumpla la condición de ergodicidad. Este resultado fue utilizado para definir las simulaciones que se presentan en los Capítulos 3, 4 y 5.

Para un tiempo suficientemente grande la concentración media del conjunto de soluciones tienen una distribución espacial Gaussiana, con los momentos dependientes de la estadística del campo aleatorio de velocidades (Dagan, 1989). La diferencia entre las concentraciones de las plumas individuales y su valor promedio del conjunto de realizaciones, es una cantidad aleatoria con una varianza tendiendo a cero para un tiempo muy grande, si se aplica el teorema central del límite (Dagan, 1989). Por lo tanto, las plumas individuales debería tender al límite Gaussiano de la media del conjunto de realizaciones para tiempos grandes de simulación. Esto explica la importancia del conjunto de realizaciones para la teoría estocástica.

Rubin et al. (1999) y Rubin (2003) extendieron el concepto de la macrodispersión para el caso en que parte de la heterogeneidad del campo de velocidades es representada en la grilla numérica, siendo posible tomar en cuenta los efectos no modelados de la heterogeneidad del campo de velocidades utilizando el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo (block-effective macrodispersion coefficient,  $D_b(t)$ ), el cual permite estimar correctamente la deformación de la pluma de solutos (cuantificado por el momento espacial de segundo orden) cuando  $\sigma_Y^2 < 1$ . Para la derivación del  $D_b(t)$  se puede revisar el libro de Rubin (2003), o el Anexo A.4, donde se explica en detalle la derivación del coeficiente. Diversos estudios (Kitanidis, 1994; Cirpka, 2002; Lawrence y Rubin, 2007; Kapoor et al., 1997; Raje y Kapoor, 2000) señalan que la utilización de coeficientes de macrodispersión está limitada a la estimación de los momentos espaciales de la pluma de solutos y, al utilizarse en transporte reactivo en medios heterogéneos permeables, se sobrestima significativamente las tasas de dilución y reacción observadas en el terreno. Sin embargo, algunos autores como Cirpka (2002) han utilizado coeficientes de dispersión corregidos para reproducir la tasa de mezcla en problemas de inyecciones puntuales y en medios con una baja heterogeneidad con valores de  $\sigma_Y^2 = 0,25$ , obteniendo una correcta estimación de la mezcla y una subestimación al cuantificar la deformación de la pluma de solutos.

En esta tesis se estudia la posibilidad de utilizar el  $D_b$  planteado por Rubin et al. (1999) y Rubin (2003) (revisar Anexo A.4 donde se presenta la derivación completa de este coeficiente) para la correcta estimación de los procesos de mezcla y reacción, considerando diversas condiciones de transporte y parámetros del problema.

## 1.3. Objetivos

### 1.3.1. Objetivo principal

El principal objetivo de esta tesis es estudiar la factibilidad del uso del “coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo” ( $D_b(t)$ ) para modelar procesos de mezcla en el transporte conservativo y reactivo de solutos en medios permeables heterogéneos.

### 1.3.2. Objetivos específicos

1. Estudiar los alcances de la utilización de coeficientes de macrodispersión cuando se emplean campos de velocidad que no contienen completamente la variabilidad numérica de pequeña escala, siendo incapaces de reproducir toda la heterogeneidad del medio.
2. Diseñar y validar una metodología que permita obtener un coeficiente  $D_b$  que logre reproducir la tasa de mezcla global del problema, mediante el cálculo de los tiempos característicos de los procesos de mezcla y dilución, para diversas condiciones de trans-

porte y parámetros del problema analizado.

3. Utilizar un modelo numérico que logre solucionar problemas de transporte reactivo y conservativo en medios permeables heterogéneos, y que permita evaluar la metodología propuesta como forma de representación de los procesos de deformación y mezcla de la pluma de solutos.

## 1.4. Metodología del estudio

En esta sección se presenta la metodología de trabajo, indicando cómo se estudió y enfocó la tesis. En un primer lugar se realizó una extensa revisión bibliográfica, buscando las investigaciones afines más relevantes, evaluando las metodologías utilizadas en ellas, así como los avances e ideas más importantes presentadas a la fecha, revisando exhaustivamente los coeficientes y parámetros utilizados. Con lo anterior se pudo generar un modelo conceptual del problema a resolver.

Posteriormente se trabajó con el modelo numérico de los autores Herrera et al. (2009, 2010) basado en el enfoque Lagrangiano de partículas, verificando y explorando los límites de validez y sus cualidades. Para esto, se realizaron diversas pruebas con el fin de evaluar las soluciones obtenidas y compararlas con la solución analítica del problema, verificando su exactitud. Una vez comprobado lo anterior, se buscó reproducir una serie de resultados encontrados en la literatura, relacionados al transporte de solutos en medios heterogéneos y homogéneos. Se comprobó que el modelo numérico era capaz de reproducir los resultados de la literatura satisfactoriamente, corroborando la validez del método.

Una vez comprobado lo anterior, se definió que el objetivo de las simulaciones fuera la comparación del efecto que tiene el tamaño de la discretización de la grilla numérica de velocidad sobre los procesos de mezcla, reacción y variación de los momentos espaciales del soluto en el medio. Para esto se generó una grilla fina de velocidades, la cual contiene toda la información del medio heterogéneo y, por lo tanto, puede considerarse el caso base. Esta solución es comparada con una serie de grillas de velocidades filtradas (homogeneizada por un proceso de upscaling) con un tamaño del bloque de la celda mayor una cierta cantidad de veces, perdiendo variabilidad numérica, lo que repercute en la representación de los procesos de mezcla que ocurren en el medio permeable. Para mejorar esta solución se utilizó un coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo ( $D_b(t)$ ).

Definido lo anterior y basándose en una recopilación de datos de la literatura, se generaron experimentos para distintos niveles de heterogeneidad del medio y una amplia cantidad de condiciones y parámetros de transporte, buscando los casos más representativos entre todas las combinaciones de parámetros y coeficientes involucrados en el problema.

Comprobado el efecto que tiene utilizar el  $D_b(t)$  en la representación de los momentos espaciales de la pluma para cuantificar la deformación de ésta, se estudió la implementación de un coeficiente de macrodispersión efectivo basado en el concepto del  $D_b(t)$  para la correcta

estimación de los procesos de mezcla y reacción. Para ello se utilizaron distintos escalamientos temporales con el fin de obtener un coeficiente de dispersión efectivo, el cual está basado en los parámetros del problema. Luego de una larga comprobación y un gran número de simulaciones, se logró establecer dos enfoques distintos para estimar la tasa global de mezcla correctamente. El primero corresponde a una fórmula matemática basada en los parámetros del transporte involucrados, obteniéndose un tiempo de mezcla el cual es constante, mientras que el segundo enfoque asume que el tiempo en el cual se evalúa el  $D_b$ , depende del tiempo de simulación y de los parámetros involucrados en el problema. Estos coeficientes son llamados  $D_b(t_\alpha)$  y  $D_b(t_{mix})$ , respectivamente.

Paralelamente se realizaron diversos experimentos adicionales con tal de comprobar el efecto que tienen las distintas variables involucradas, revisando los supuestos y condiciones establecidas para el experimento principal. Estos estudios preliminares abarcaron análisis tales como la variabilidad entre realizaciones individuales respecto al promedio del sistema, el método numérico de resolución, análisis de los momentos espaciales de plumas locales, efecto del campo de velocidades uniforme, etc.

Posteriormente se procedió a generar las simulaciones principales aplicando los parámetros definidos en los pasos previos. Uno de estos fue el número de Péclet, definido como la relación entre el tiempo característico de la difusión respecto al tiempo característico de la advección:

$$Pe = \frac{U \cdot I_Y}{D_L} \quad (1.12)$$

donde  $U$  es la velocidad media en la dirección principal del flujo,  $I_Y$  es la escala integral, y  $D_L$  es el coeficiente de dispersión local.

Para estudiar el coeficiente  $D_b$ , se evaluaron valores de  $Pe = [25; 100; 250; 2500]$  con el objetivo de reproducir distintos tipos de transporte, desde uno puramente difusivo (números de Péclet pequeños) hasta un caso principalmente advectivo (valores altos del número de Péclet), incluyendo el transporte en transición entre estos casos señalados. Con el fin de analizar cómo influyen los distintos grados de heterogeneidad del medio permeable, se emplearon valores de  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , permitiendo evaluar medios con una heterogeneidad baja-media (valores de  $\sigma_Y^2 \leq 1$ ) y medios con una alta heterogeneidad (valores de  $\sigma_Y^2 \geq 3$ ). Además, se estableció un largo de la escala característica de la heterogeneidad del medio  $I_Y = 0,5$  [m], y un tamaño del largo de la celda del campo fino de velocidades igual a  $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y$ , que corresponde al largo de la escala de Darcy (valor igual a 0,1 [m]). Esto último asegura que toda la información de la heterogeneidad del medio quede contenida y sea resuelta por la grilla numérica, al cumplirse la relación  $\lambda_f/I_Y \leq 0,25$  (Rubin et al., 1999).

Para cada valor de  $\sigma_Y^2$ , se generaron múltiples realizaciones estadísticamente equivalente del campo de conductividad hidráulica utilizando un valor  $\lambda_f$  constante. Luego, se resolvió el problema de flujo en régimen estacionario, obteniéndose los campos de velocidad para cada realización dadas las condiciones de borde del sistema. Estos campos fueron filtrados mediante un método que asegura la conservación de masa, evaluando distintos tamaños de  $\lambda_c$ , con el objetivo de analizar y comparar como afecta la pérdida de variabilidad del campo

de velocidades a los procesos de mezcla, tomando valores de  $\lambda_c = [8; 16; 32] \cdot \lambda_f$ .

Luego, se resolvió el transporte conservativo de solutos utilizando el modelo numérico *NAPA* (Herrera, 2009), comparando el resultado obtenido al utilizar una grilla fina de velocidades con respecto al utilizar una grilla gruesa de velocidades, con y sin coeficientes de macrodispersión adicionales (más detalles serán explicados en capítulos posteriores). El transporte reactivo fue derivado desde el caso conservativo, aplicando el cambio de variables utilizado por Cirpka y Valocchi (2007), modelándose la producción de un compuesto de una reacción bimolecular.

Los resultados obtenidos fueron evaluados de manera individual para cada realización y en su conjunto con los campos que comparten la misma estadística. Para esto se utilizaron distintos parámetros encontrados en la literatura para describir la deformación espacial de la pluma y la mezcla del sistema, como por ejemplo: momentos espaciales del soluto, varianza de la concentración, concentración media, etc.

## 1.5. Organización del documento

Este trabajo está compuesto por seis capítulos y anexos que contienen resultados adicionales.

El Capítulo 1 corresponde a la introducción y motivación de esta Tesis de Magister. En el Capítulo 2 se explica el modelo numérico utilizado, definiendo cuáles son los escenarios simulados y el problema que se busca resolver. Se presenta también la derivación propuesta para obtener el tiempo característico de la mezcla, valor que se utiliza para calcular el coeficiente  $D_b(t)$  efectivo y que es empleado en las simulaciones. Además, se presentan los coeficientes utilizados para comparar los resultados obtenidos. En el Capítulo 3 se presentan los resultados preliminares del estudio, los cuales sirvieron de base para definir los parámetros y condiciones de las simulaciones para el transporte conservativo y reactivo. En el Capítulo 4 se presentan los resultados obtenidos al simular transporte conservativo incluyendo parámetros para cuantificar la deformación y mezcla de la pluma de solutos, además de un análisis de estos resultados. En el Capítulo 5 se presenta los resultados del transporte reactivo, para distintos parámetros y grados de heterogeneidad incluyendo análisis de los resultados obtenidos. Finalmente, en el Capítulo 6 se presentan las conclusiones del estudio realizado, incluyendo los resultados más importantes obtenidos en esta investigación además de las recomendaciones.

En los anexos de la investigación se presentan resultados complementarios a los presentados en el texto principal. Estos experimentos y análisis tratan temas como la variabilidad entre simulaciones realizadas, el efecto de las dimensiones de la pluma, comparación de distintos esquemas de resolución numérica, análisis de la variación del momento espacial de segundo orden para plumas pequeñas, resultados adicionales de los experimentos del caso conservativos principales e información teórica complementaria al estudio. Finalmente, se incluye el trabajo presentado en la conferencia American Geophysical Union Fall Meeting 2013 en San Francisco, EEUU, que lleva por nombre: “Effective grid-dependent dispersion coefficient for conservative and reactive transport simulations in heterogeneous porous media”.

# Capítulo 2

## Metodología

### 2.1. Algoritmo numérico

En este capítulo se enuncian las principales características y particularidades del método numérico empleado, del enfoque propuesto y de los escenarios simulados. Para las simulaciones numéricas se utilizó el software libre llamado *NAPA* (Herrera, 2009), el cual resuelve transporte conservativo o reactivo en medios permeables heterogéneos u homogéneos. Este programa utiliza distintos métodos numéricos de resolución como es *Smoothed Particles Hydrodynamics* (SPH) y *Random Walk Particle Tracking* (RWPT), basados en el enfoque Lagrangiano, donde se simula el transporte de solutos representado a través de una nube de partículas en el medio poroso permeable. Las partículas cuentan con masa y volúmenes puntuales dados, pudiendo interactuar con las partículas vecinas que se encuentren relativamente cerca en procesos de mezcla como el intercambio de masa, dilución, reacciones, etc. (Herrera et al., 2009).

Además, tiene la particularidad de utilizar dos coeficientes de dispersión para cuantificar los efectos que ocurren en las distintas escalas de la grilla numérica. Utilizando SPH (ver Figura 2.1a) se modela el coeficiente de dispersión local ( $D_L$ ) representando lo que ocurre en la escala local de la grilla, a través de la interacción de las partículas, las cuales pueden mezclarse, intercambiar masa o reaccionar, cuando entran en contacto en una pequeña interfaz de mezcla, con RWPT (ver Figura 2.1b) se representa lo que ocurre en la macro-escala, resuelto por un coeficiente de macrodispersión, asumiendo que el movimiento de las partículas tiene una componente determinista, resuelta por la grilla numérica de velocidades, y una componente estocástica, que simula un movimiento aleatorio para recrear la heterogeneidad no capturada por el modelo.

Se simuló y comparó la evolución de uno o varios compuestos en el tiempo, bajo distintas condiciones de transporte en un modelo de flujo *quasi* 1-D, el cual será explicado en detalle en la próxima sección.

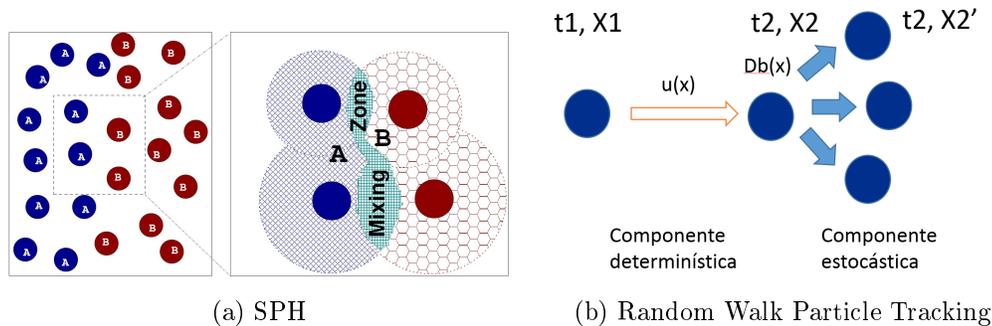


Figura 2.1: Esquema explicativo del método SPH y RWPT respectivamente, extraído de (Herrera et al., 2009). El gráfico de la izquierda representa como actúa el método SPH en un situación con dos contaminantes, A y B respectivamente, estos son modelados numéricamente como partículas, las cuales intercambian masa, pudiendo producirse mezcla, dilución o reacciones, cuando los compuestos se encuentran muy cerca, en una pequeña interfaz de contacto donde se produce la mezcla. El gráfico de la derecha describe el mecanismo de acción del método RWPT para el movimiento de una partícula. Conocida la posición y la velocidad de la partícula en un tiempo, es posible calcular el movimiento de manera determinista, sin embargo, la partícula da un salto aleatorio desde esta nueva posición, dado por una componente macrodispersiva, recreando la heterogeneidad no capturada por el campo de velocidades e incluyéndola en el modelo.

Las simulaciones del transporte conservativo se enfocan en la descripción de la dilución y movimiento de los solutos en el medio, como se representa en la Figura 2.2.

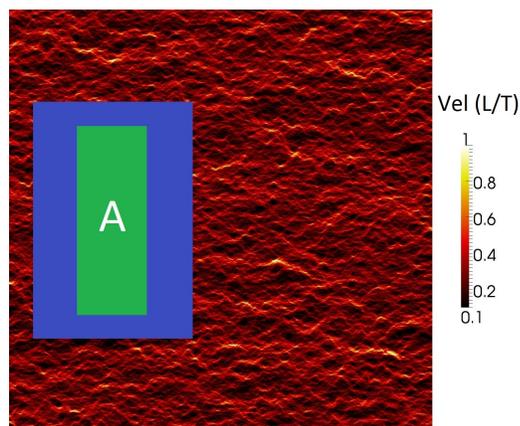


Figura 2.2: Modelo conceptual del transporte conservativo.

Donde  $A$  es un compuesto conservativo, el cual es afectado por la dilución en el tiempo. En azul se presenta la zona de exterior de partículas, las que tienen concentración inicial nula y buscan representar la dilución en el medio, en verde la posición inicial del compuesto  $A$  con concentración inicial unitaria. En el fondo se aprecia el campo de velocidades normalizado por su valor máximo.

Para el transporte reactivo, se simuló una reacción bimolecular instantánea e irreversible, la

cual tiene la siguiente forma:



donde  $A$  y  $B$  son compuestos con una concentración inicial dada y forman un producto  $C$  al reaccionar. Con  $m, n$  y  $p$  los coeficientes de estequiometría de la reacción. En este caso se cuantifica la producción promedio del compuesto  $C$ .

Utilizando la metodología descrita por Cirpka y Valocchi (2007) (más información sobre el método en el Anexo A.5.1), es posible derivar desde los resultados del transporte conservativo al caso del transporte reactivo.

Se estimó los resultados procesando los datos obtenidos para las realizaciones individuales y para el promedio de todas ellas en cada tiempo de simulación. Las distintas realizaciones generadas difieren en la distribución de los campos sintéticos de conductividad hidráulica los cuales están definidos a través de los mismos parámetros estadísticos del medio, como la varianza ( $\sigma_Y^2$ ), el valor esperado ( $m_Y$ ), la función de covarianza ( $C_Y$ ) y la escala integral ( $I_Y$ ) del medio. Asumiendo lo anterior, es posible encontrar un comportamiento característico de la pluma y de los procesos que ocurren en medios que comparten la estadística, siendo posible analizar cómo cambian los momentos espaciales del soluto, la dilución y la mezcla bajo las mismas condiciones de transporte.

## 2.2. Generación de escenarios de simulación

Para generar las simulaciones del transporte de solutos con el modelo numérico definido anteriormente, es necesario generar una serie de campos de conductividad hidráulica sintéticos  $Y = \ln(K)$ , los cuales están definidos a través de los parámetros estadísticos. Una vez generados los  $\ln(K)$ , se calculan los campos de velocidad (ver Figura 2.3b) resolviendo el flujo en régimen permanente en el medio utilizando un algoritmo iterativo incorporado en *NAPA*, para la resolución del sistema matricial de ecuaciones de flujo. Es necesario asignar condiciones de borde del problema, en éste caso, carga constante en dos bordes, simulando flujo de izquierda a derecha, y condiciones impermeables en el borde superior e inferior. Es posible filtrar estos campos de velocidad mediante un proceso de upscaling que garantiza la conservación de masa, promediando las celdas que contienen la nueva discretización de la grilla numérica, obteniéndose un campo de velocidad producto del promedio de las celdas más pequeñas, perdiendo parte de la variabilidad del campo de velocidades original. Esta variabilidad afecta directamente los procesos de transporte, como se ha indicado en los capítulos previos.

Una vez resueltos los patrones de flujo del medio, es posible resolver el problema de transporte mediante los métodos numéricos SPH y RWPT utilizando las rutinas incorporadas en *NAPA*, para uno o más solutos, los cuales tienen características y parámetros iniciales dados (largo,

alto y ancho, distribución de concentraciones, etc.). En cada tiempo de simulación, se puede conocer la posición de las partículas que componen los solutos, determinando fácilmente la tasa de deformación del contaminante en el tiempo, en problemas de transporte conservativo o reactivo según se desee, simulando los procesos de mezcla a través del coeficiente de dispersión local (i.e., dilución, reacción, etc.). Además, es posible incorporar los efectos macrodispersivos de la heterogeneidad del medio, utilizando un coeficiente de dispersión adicional. A modo de ejemplo, en la Figura 2.3c se muestra en rojo la condición inicial de la pluma en el dominio, y en azul la misma pluma luego de un tiempo de iniciada la simulación, donde la pluma ha cambiado de forma debido a la heterogeneidad del medio.

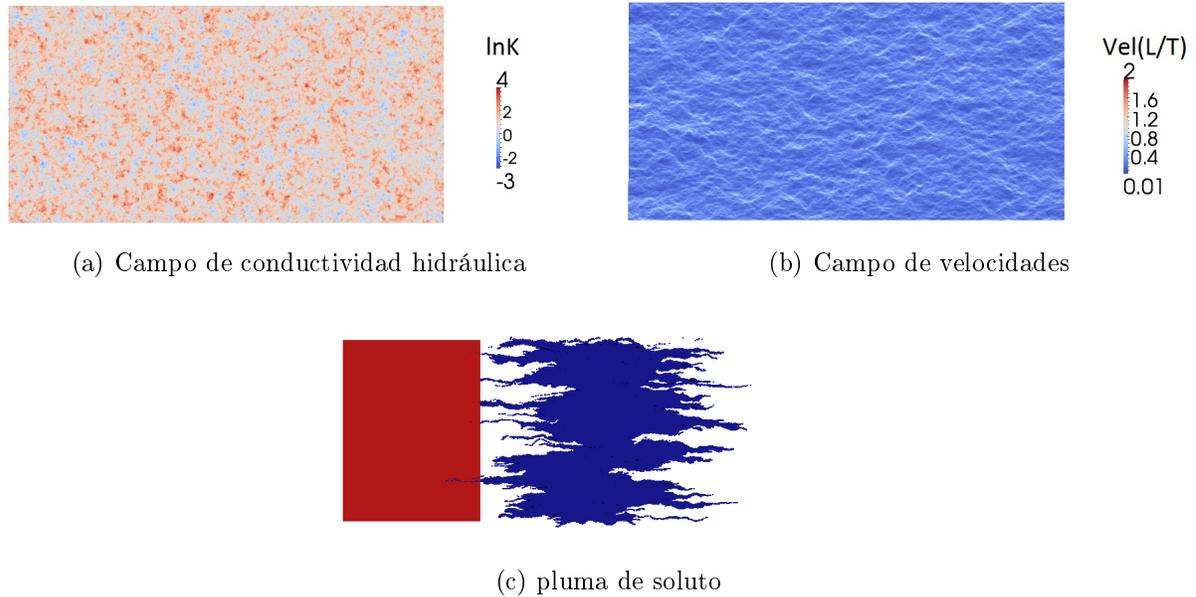


Figura 2.3: Esquema conceptual del modelo numérico, (a)  $\ln K$  (b) Campo de velocidad (c) Movimiento del soluto, en rojo el estado inicial y en azul la pluma luego de un tiempo desde el inicio de la simulación.

La cantidad de variabilidad capturada por la grilla numérica depende del tamaño de la discretización seleccionada y de la longitud característica de la heterogeneidad del medio. Según Rubin et al. (1999), cuando se mantiene la siguiente relación entre el tamaño de la discretización ( $\lambda$ ) y la escala integral ( $I_Y$ ):  $\lambda/I_Y \leq 0,25$ ; la heterogeneidad es capturada y resuelta completamente por la grilla numérica.

La Figura 2.4 corresponde a la comparación de tres campos de velocidad. El primer gráfico de arriba hacia abajo, corresponde al campo real de velocidades cuando se logra capturar toda la heterogeneidad del medio, el segundo gráfico es el campo de velocidades resuelto por una grilla numérica con celdas de mayor tamaño, suponiendo que esta no contiene completamente la heterogeneidad, y el tercer gráfico corresponde a la diferencia entre los dos casos anteriores; lo que representa la información desconocida perteneciente a la escala inferior a la grilla numérica. Como es apreciable, la información no capturada por el modelo numérico y existente en el medio real no es despreciable y afecta los procesos ocurridos en los medios permeables. Estas fluctuaciones son desconocidas y son capturadas utilizando un coeficiente  $D_b(t)$ .

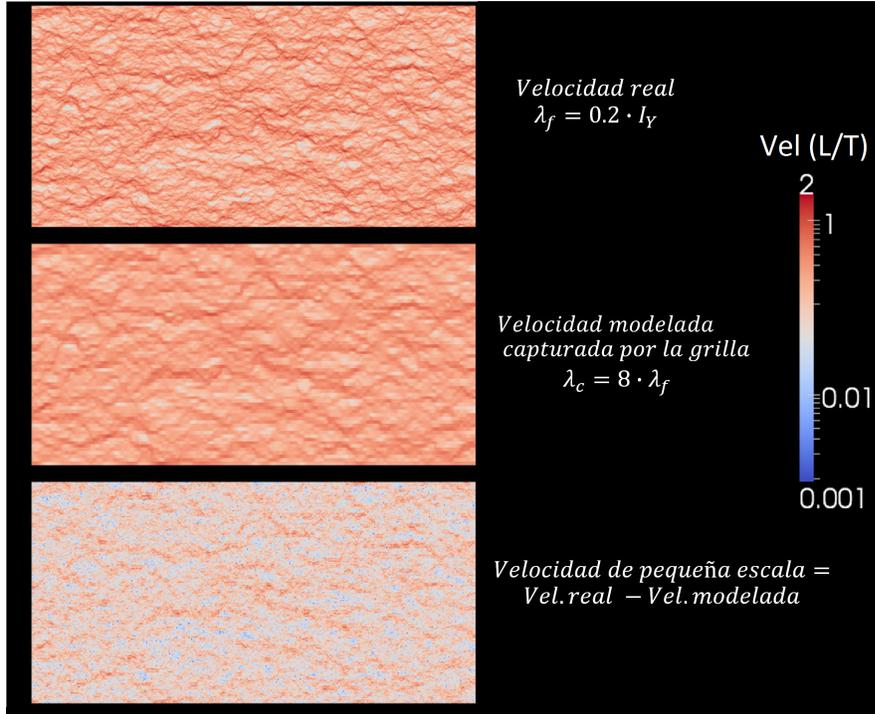


Figura 2.4: Comparación entre campos de velocidad real, el modelado y las fluctuaciones correspondientes a la escala inferior a la grilla numérica.

Este caso es común en la elaboración de modelos del subsuelo debido a que las formaciones naturales presentan tamaños que van desde la escala de los metros hasta los kilómetros de distancia (Bear, 1988), por lo que la gran mayoría de las situaciones no se cuenta con el número necesario de muestras, siendo imposible reconstruir un modelo que capture totalmente la heterogeneidad del medio (i.e., CFV).

Para las simulaciones se seleccionó un campo de conductividades log-normal, con una función de correlación exponencial para la covarianza, que tiene la siguiente forma:

$$C_Y(r) = \sigma_Y^2 \exp\left(-\frac{|r|}{\lambda}\right) \quad (2.2)$$

donde  $\sigma_Y^2$  es la varianza del campo de conductividad hidráulica log-normal,  $|r|$  es la distancia entre dos puntos y  $\lambda$  es la longitud de correlación. Estos campos se diferencian de los Gaussianos al tener patrones de distribución de las velocidades menos persistentes y son menos suavizados (mayores diferencia entre las velocidades extremas).

Para definir el dominio, se seleccionó un medio cuadrado de largo  $L_{x,1} = L_{y,1} = 204,8 \cdot I_Y$ , el cual tiene dimensiones suficientemente grandes para modelar plumas muy largas en la dirección normal al flujo, y poder simular un tiempo suficientemente largo, sin que el soluto salga del dominio. Luego para el CFV se asume que  $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y = 0,1$  [m], valor que corresponde a la escala de Darcy (Dagan, 1989), considerado el caso real con el cual se compara el resto de los casos simulados.

Para la pluma de solutos, se establece un largo mínimo en la dirección normal al flujo, de

al menos  $90 \cdot I_Y$ , cumpliendo con la condición de ergodicidad requerida por el coeficiente de  $D_b(t)$ . Ya que bajo estas condiciones los coeficientes de macrodispersión son conocidos de manera determinista (Dagan, 1984; Rubin et al., 1999), siendo posible estimar el momento espacial de segundo orden, ya que la posición del centro de masa (momento de primer orden) es conocida para cada tiempo de simulación.

Definido el CFV se seleccionó tres valores de  $\lambda_c$  (también conocido como longitud de la zona de homogeneización) los cuales son múltiplos del valor  $\lambda_f$ , con lo que se procede a filtrar el campo de velocidad fino para generar una grilla de mayor grosor, pero con las mismas propiedades estadísticas. Los valores utilizados fueron  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ , otro con  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ , y el último con un valor de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ . Estos, con el fin de analizar cómo afecta la pérdida de variabilidad numérica a los procesos de mezcla y la deformación de la pluma de solutos, al compararlo con una solución base considerada la real.

## 2.3. Escalamientos temporales para procesos de mezcla

En esta sección se explican los dos escalamientos temporales propuestos para los procesos de mezcla, el primero se basó en la derivación de un tiempo característico,  $t_\alpha$ , el cual es constante para toda la simulación siendo posible obtener un coeficiente  $D_b(t_\alpha)$ , el cual relaciona los parámetros del transporte y del medio simulado.

El segundo método asume que el tiempo de mezcla ( $t_{mix}$ ) varía y evoluciona con el movimiento de la pluma al igual que el coeficiente  $D_b(t)$  respectivo. Además, ambos métodos asumen que los procesos de mezcla son representados por un coeficiente de macrodispersión efectivo, menor o igual al coeficiente de macrodispersión que caracteriza correctamente la deformación de la pluma de solutos.

### 2.3.1. Escalamiento para evaluar $D_b(t_\alpha)$

En esta sección se presenta cómo evaluar el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo para un tiempo constante  $t_\alpha$ , el cual se postuló como un tiempo característico de los procesos de mezcla, pudiendo calcularse en función de los parámetros de la pluma de solutos y del medio modelado.

La Figura 2.5 representa la componente longitudinal de  $D_b(t)$  en el tiempo, en función de distintos grados de heterogeneidad y discretización de la grilla numérica de velocidades. Esta figura puede ser utilizada para determinar gráficamente el valor del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo para diversos tiempos de simulación.

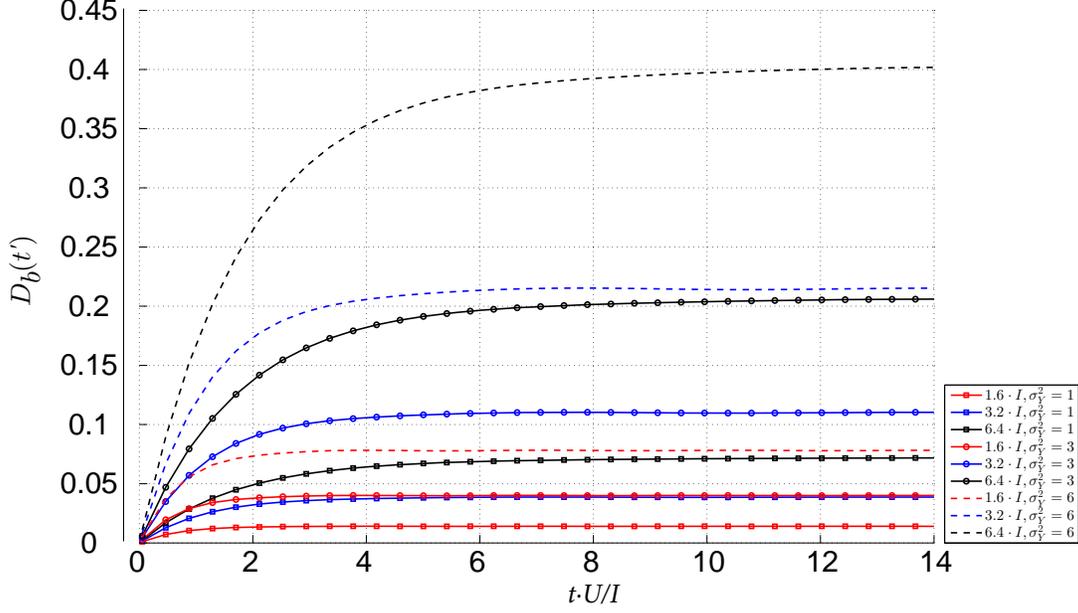


Figura 2.5: Coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo para la dirección principal del movimiento versus el tiempo adimensional para distintos valores de  $\sigma_Y^2$  y  $\lambda_c$ .

Para este escalamiento se asumió que la tasa a la cual se deforma la pluma de solutos debido a la dispersión local en un tiempo representativo de la advección en la escala inferior de la grilla numérica, está dado por:

$$S_{xx} = 2 \cdot D_L \cdot \frac{I_{\tilde{Y}}}{U} \quad (2.3)$$

De modo similar, se asume que la deformación de la pluma de solutos causada por el coeficiente  $D_b(t^*)$  en un tiempo  $t^*$  (que es un tiempo característico de la mezcla macrodispersiva), es representado por:

$$S_{xx} = 2 \cdot D_b(t^*) \cdot t^* \quad (2.4)$$

Luego, igualando las ecuaciones (2.3) y (2.4), queda lo siguiente:

$$D_b(t^*) \cdot t^* = \frac{D_L \cdot I_{\tilde{Y}}}{U} \cdot \gamma \quad (2.5)$$

donde  $D_b(t^*)$  es el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en un tiempo  $t^*$ ,  $U$  es la velocidad media en la dirección principal,  $D_L$  es el coeficiente de dispersión local,  $I_{\tilde{Y}}$  es la escala integral de las fluctuaciones pertenecientes a la escala inferior de la grilla numérica y  $\gamma$  es una constante adimensional relativa a las longitudes del dominio y heterogeneidad. Se descompuso  $D^b(t^*)$  como sigue:

$$D^b(t^*) = \sigma_u^2 \cdot t^* \quad (2.6)$$

donde  $\sigma_u^2$  representa la varianza de las fluctuaciones de velocidades no capturadas por la grilla numérica después del proceso de homogeneización y es posible de obtener mediante la resta de la varianza de la velocidad del campo real y la varianza del campo grueso de velocidades representado por la grilla numérica. Luego, reemplazando la ecuación (2.6) en la ecuación (2.5), fue posible despejar un tiempo característico de los procesos de mezcla que relaciona las distintas escalas involucradas.

$$t^* = \sqrt{\frac{D_L \cdot I_{\tilde{Y}}}{U} \cdot \frac{1}{\sigma_u^2}} \cdot \gamma' \quad (2.7)$$

Luego de un gran número de realizaciones y pruebas, se determinó que el coeficiente adimensional  $\gamma'$ , está relacionado con el tamaño de la discretización de la grilla gruesa de velocidades ( $\lambda_c$ ), y con la longitud característica de la heterogeneidad del medio ( $I_Y$ ), a través de la siguiente relación:

$$\gamma' = \frac{\lambda_c}{I_Y} \quad (2.8)$$

Finalmente, una vez determinados todos los coeficientes que componen la ecuación (2.7), es posible determinar el tiempo característico de los procesos de mezcla, reescribiéndolo como  $t_\alpha$ . Este tiempo representa el efecto de la heterogeneidad del medio y es reproducido al evaluar el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo en dicho tiempo:

$$t_\alpha = t^* = \frac{\lambda_c}{I_Y} \cdot \sqrt{\frac{D_L \cdot I_{\tilde{Y}}}{U} \cdot \frac{1}{\sigma_u^2}} \quad (2.9)$$

### 2.3.2. Escalamiento para evaluar $D_b(t_{mix})$

Al estudiar preliminarmente los resultados obtenidos utilizando  $D_b(\infty)$ , se determinó que funciona relativamente bien para cuantificar la mezcla para los casos donde el transporte es principalmente difusivo (Péclet pequeño) y el soluto ha recorrido decenas de escalas integrales desde el inicio. Para tiempos largos de simulación la mezcla puede explicarse puramente con los procesos dispersivos, ya que se destruye la heterogeneidad de la pluma de solutos (Kitanidis, 1994). Sin embargo, este coeficiente sobrestimó la mezcla desde los primeros pasos temporales. Trabajos de (Kitanidis, 1994; Cirpka, 2002; Lawrence y Rubin, 2007; Kapoor et al., 1997; Rajee y Kapoor, 2000) señalar que su utilización de coeficiente de macrodispersión está limitado a la estimación de los momentos espaciales del solutos y, al utilizarse en transporte reactivo en medios heterogéneos permeables, se sobrestima significativamente las tasas de dilución y reacción observadas en el terreno. Cuando el transporte advectivo pasa a ser el mecanismo principal ( $Pe \geq 100$ ), la utilización de  $D_b(\infty)$  sobrestima la mezcla independiente de los demás parámetros involucrados obteniéndose una solución alejada. Al utilizar  $D_b(t_\alpha)$ , se estimó correctamente la mezcla para un número considerable de casos estudiados

preliminarmente, existiendo en algunos imprecisión en la estimación de la mezcla inicial y en otros sobrestimación.

Debido a los antecedentes anteriores, se consideró necesario una corrección para calcular correctamente los procesos de mezcla utilizando el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo, buscando corregir la tasa de mezcla global del problema, estimando correctamente la dilución, reacciones y mezcla, desde los primeros pasos temporales de la simulación.

Se postuló que el tiempo para evaluar el  $D_b$  no debe ser único, como ocurre con  $D_b(t_\alpha)$ , sino que este tiempo debe variar, siendo función del tiempo de la simulación, y de los parámetros y características del problema. Además, este tiempo debe evolucionar hasta que el coeficiente macrodispersivo alcance su valor asintótico igual a  $D_b(\infty)$ , pero debe tardar un tiempo mayor o igual en alcanzar dicho máximo, que además es, la magnitud del coeficiente  $D_b$  que reproduce correctamente la tasa a la cual se deforma la pluma de soluto.

Por lo tanto, para un tiempo de simulación  $t_{sim}$ , el valor de coeficiente de macrodispersión que reproduce correctamente la mezcla debe ser calculado evaluando el coeficiente  $D_b$ , en un tiempo  $t_{mix} = t_{sim} \cdot \beta_m$ , obteniéndose un coeficiente  $D_b(t_{mix})$  que depende del tiempo de simulación. En este caso,  $\beta_m$  es una constante menor o igual a la unidad que retrasa la evolución del  $D_b$  original y depende de los parámetros del problema. Esta constante fue estimada a través de un proceso iterativo, que incluyó un gran número de simulaciones para ajustar correctamente su valor, bajo diversas condiciones y parámetros del transporte, y considerando campos de conductividad hidráulica con un grado de heterogeneidad medio-bajo ( $\sigma_Y^2 = 1$ ). En la Tabla 2.1, se presentan los valores de  $f_m$  que corresponde al recíproco de  $\beta_m$  (donde  $f_m = 1/\beta_m$ ), estimados para las condiciones y parámetros señalados.

Tabla 2.1: Valores de  $f_m$  calibrados para  $\sigma_Y^2 = 1$ . Para \* no se estimó debido a que la solución del  $D_b(\infty)$  subestima la mezcla.

Péclet	$1,6 \cdot I_Y$	$3,2 \cdot I_Y$	$6,4 \cdot I_Y$
25	1*	4	8
100	1*	16	32
250	40	40	40
2500	160	160	160

Se comprobó que para simulaciones en medios con un mayor grado de heterogeneidad (i.e.,  $\sigma_Y^2 = [3; 6]$ ), los valores de  $f_m$  estimados para heterogeneidades de  $\sigma_Y^2 = 1$ , reproducen correctamente los procesos de mezcla y dilución en medios con un grado superior de heterogeneidad, siendo posible utilizar los mismos valores.

De estos valores se observa una correlación para los casos donde la difusión o la advección domina el transporte. En los dos primeros números de Péclet (de 25 a 100), los valores de  $f_m$

siguen la siguiente fórmula, con  $C = 0,05$  constante:

$$f_m = \gamma' \cdot Pe \cdot C \quad (2.10)$$

mientras que en el siguiente rango de los números de Péclet (de 250 a 2500), se tiene un valor que depende de éste número, independiente del tamaño del bloque de la grilla que se esté evaluando:

$$f_m = 1,46 \cdot Pe^{0,6} \quad (2.11)$$

En las Figuras 2.6, 2.7, 2.8 y 2.9 se representan las curvas de los coeficientes de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en distintos tiempos,  $D_b(t_{sim})$  y  $D_b(t_{sim} \cdot \beta_m)$ , para distintos valores del número de Péclet versus el tiempo adimensional. En estas figuras se puede apreciar que el coeficiente de  $D_b(t_{mix} = t_{sim} \cdot \beta_m)$  evoluciona más lentamente a su valor asintótico, en comparación al coeficiente  $D_b(t_{sim})$ , y este comportamiento aumenta a medida que el número de Péclet crece.

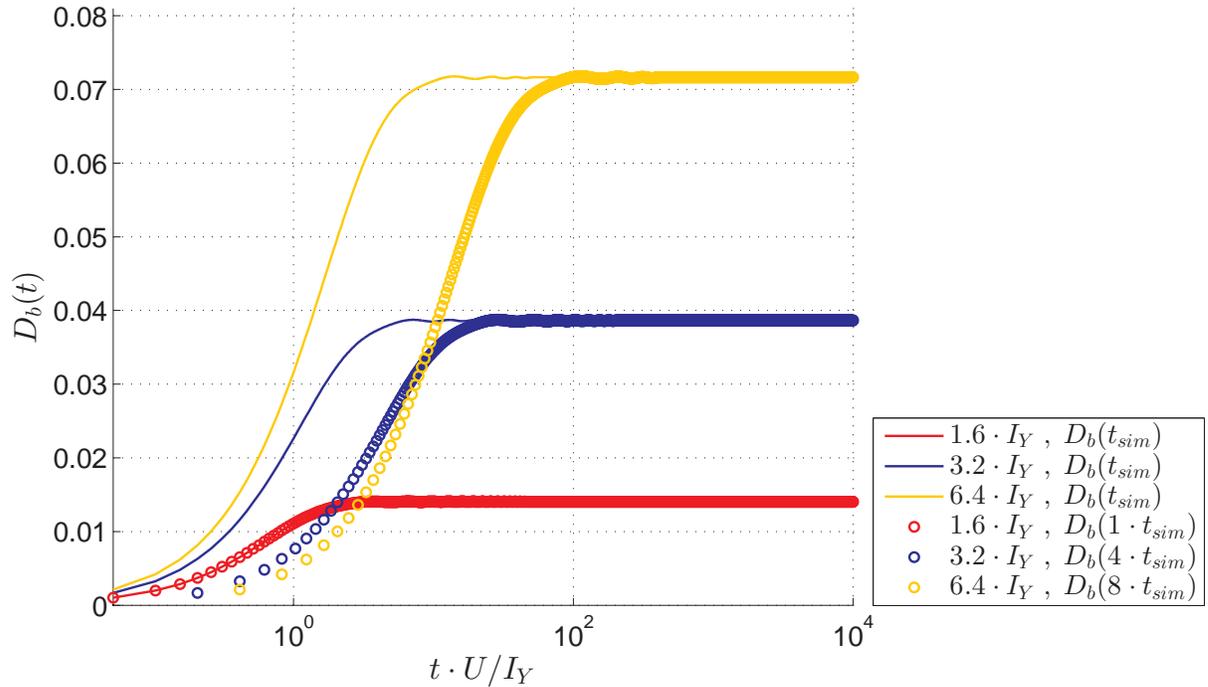


Figura 2.6:  $D_b(t)$  versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 25, considerando  $\sigma_Y^2 = 1$ .

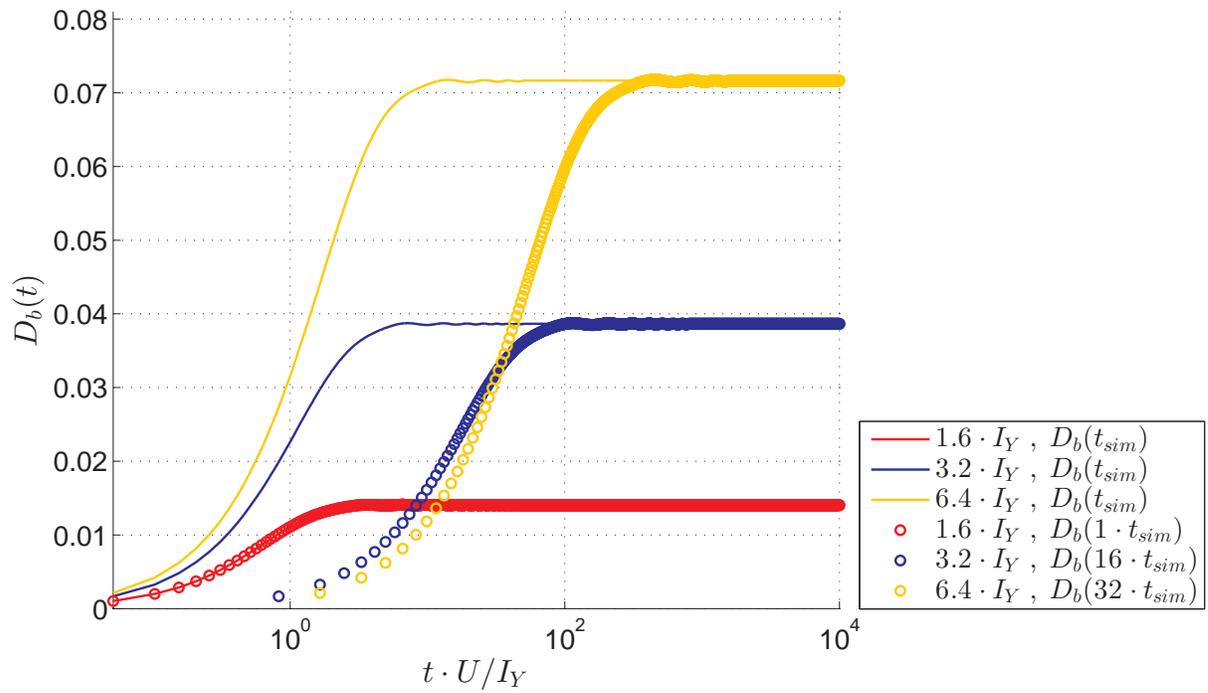


Figura 2.7:  $D_b(t)$  versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 100, considerando  $\sigma_Y^2 = 1$ .

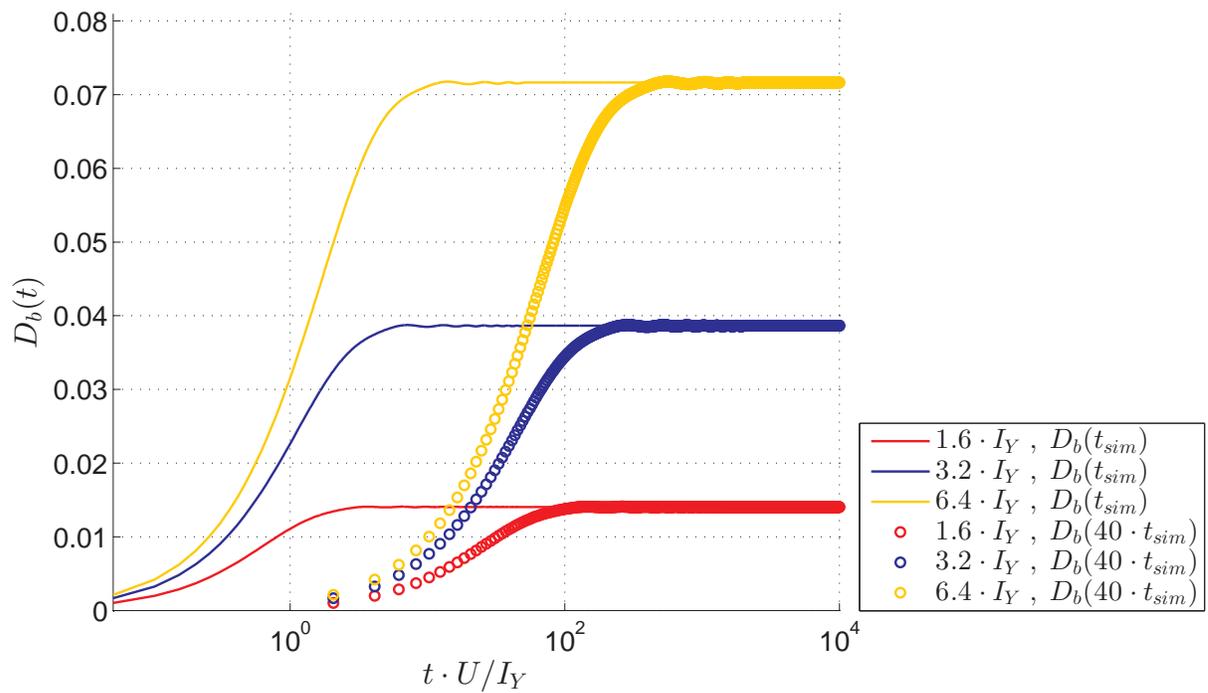


Figura 2.8:  $D_b(t)$  versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 250, considerando  $\sigma_Y^2 = 1$ .

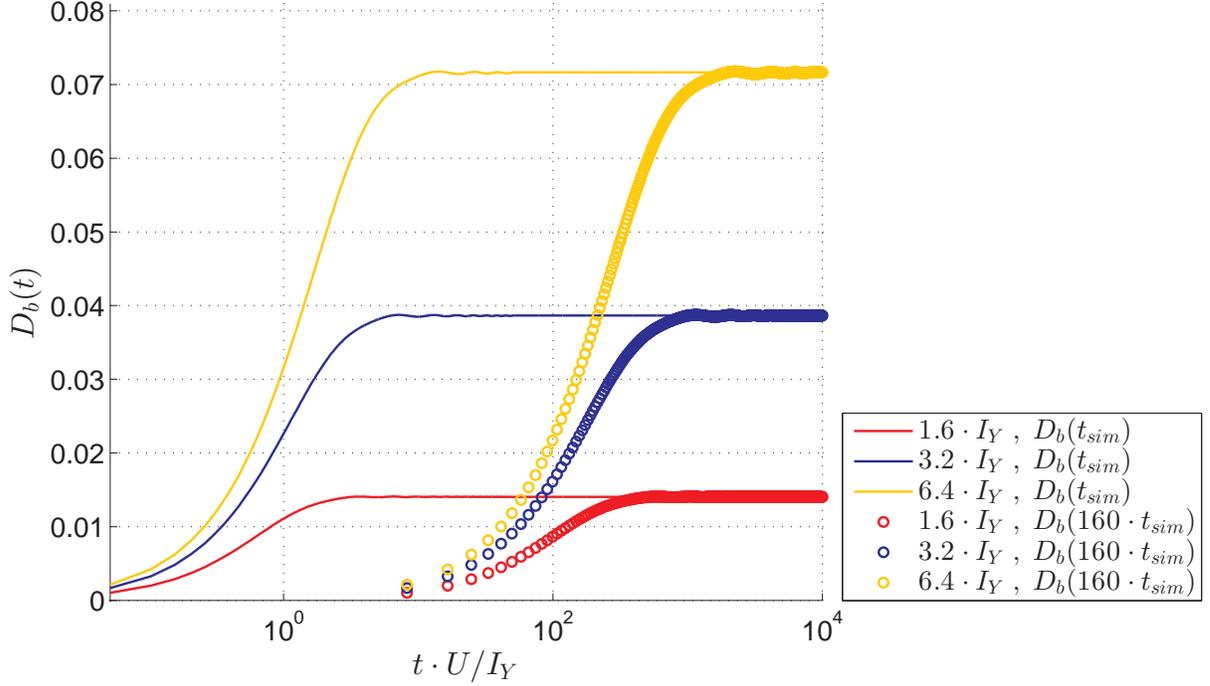


Figura 2.9:  $D_b(t)$  versus tiempo adimensional para un número de Péclet igual a 2500, considerando  $\sigma_Y^2 = 1$ .

La idea de que existe un coeficiente efectivo para la mezcla que depende del tiempo de simulación fue analizada por los autores Dentz et al. (2000b), los que proponen un coeficiente de dispersión local efectivo ( $D_L^e(t)$ ) para estimar correctamente la mezcla. Este coeficiente toma en cuenta los efectos de la heterogeneidad del medio, a través de los parámetros estadísticos que lo describen, y requiere conocer la velocidad media del flujo ( $U$ ), la longitud representativa del medio ( $I_Y$ ) y el coeficiente de dispersión local ( $D_L$ ). Se presenta a continuación la relación obtenida por los autores Dentz et al. (2000b) para una función de correlación exponencial del campo  $\ln(K)$ :

$$D_L^e(t) = \sigma_Y^2 U I_Y \left[ 1 - \left( 1 + \frac{2tD_L}{I_Y} \right)^{-\left(\frac{d-1}{2}\right)} \right] \quad (2.12)$$

donde  $d$  es el número de dimensiones del problema. Esta formulación es válida y está limitada a valores grandes del  $Pe$  (probado para  $Pe = 500$ ) y para tiempos mayores que la escala representativa de la advección ( $\tau_u = I_Y/U$ ) (Dentz et al., 2011). Esta formulación fue utilizada por Cirpka (2002) en un problema simplificado de transporte reactivo en un medio con una baja heterogeneidad ( $\sigma_Y^2 = 0,25$ ), pudiendo estimar la dispersión del soluto relativamente bien.

En la Figura 2.10 se presenta el coeficiente  $D_L^e(t)$  evaluado para distintos valores del número de Péclet. Es posible observar que a medida que aumenta el número de Péclet, la magnitud del coeficiente de dispersión local efectivo disminuye para un tiempo de simulación dado, y por lo tanto, tarda más tiempo en alcanzar su valor asintótico que corresponde al coeficiente de macrodispersión propuesto por Dagan (1984).

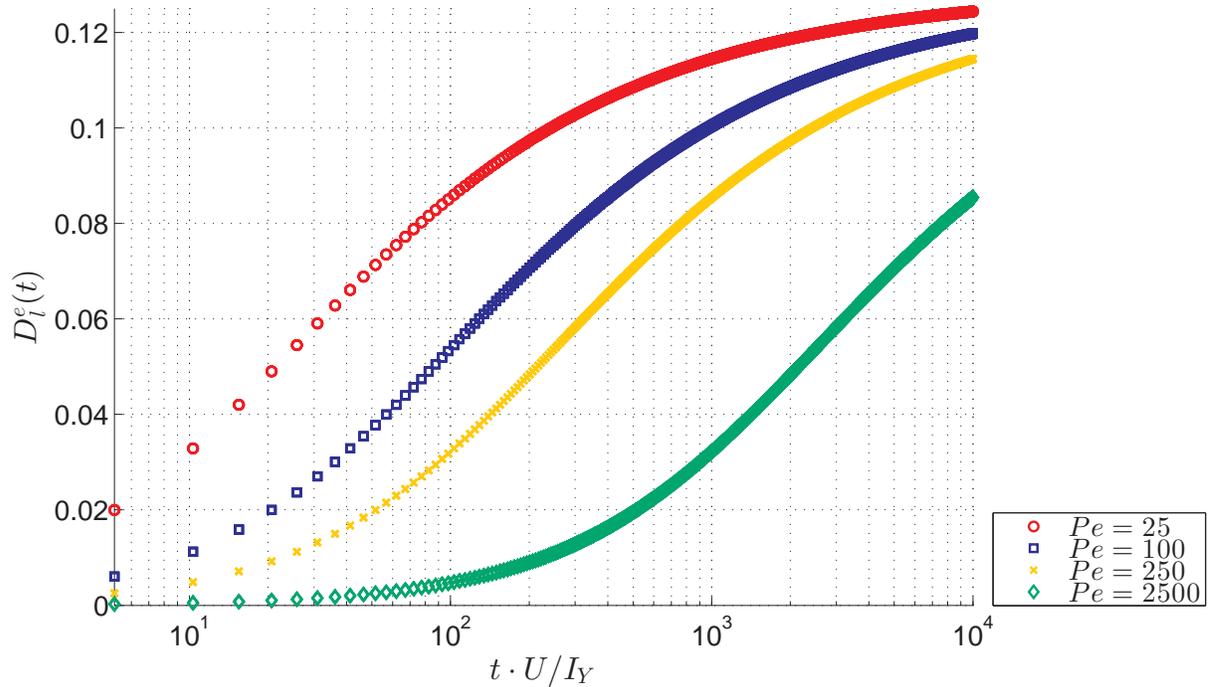


Figura 2.10:  $D_L^e(t)$  versus tiempo adimensional para varios número de Péclet, considerando  $\sigma_Y^2 = 1$ .

Si bien, las Figuras 2.6, 2.7, 2.8 y 2.9 representan al coeficientes de dispersión que actúan en la escala-macro, y la Figura 2.10, corresponde a un coeficiente a la escala-local del problema, es interesante notar que ambas metodologías plantean que el coeficiente de dispersión efectivo que recrea correctamente la tasa de mezcla global debe depender del tiempo de simulación y debe tardar más en evolucionar al valor asintótico.

Estos coeficientes corrigen los procesos de mezcla, y si se desea modelar la tasa de deformación de la pluma de solutos en el medio permeable producto de la heterogeneidad de este, quedará subestimada, obteniéndose una solución alejada a la considerada correcta (Dentz et al., 2011).

## 2.4. Parámetros utilizados en el análisis

Para la estimación de los procesos físicos y químicos del transporte de solutos se utilizan diversos parámetros con el fin de cuantificarlos bajo diversas condiciones del transporte. Por un lado, se tienen parámetros relacionados a la posición y deformación del soluto debido a la heterogeneidad, como es la descripción a través de los momentos espaciales (posición del centro de masa ( $X_{cm}$ ), varianza de la posición ( $S_{xx}$ ), etc.) y por otro lado, los parámetros que describen los procesos de mezcla y dilución, siendo los más importantes para este trabajo la concentración media ( $\bar{C}$ ), índice de dilución ( $E$ ), disipación escalar y su tasa de cambio ( $SD$  y  $SDR$ , respectivamente).

### 2.4.1. Momentos espaciales del soluto

Cualquier distribución puede caracterizarse por sus momentos estadísticos. En el caso de la distribución espacial de una variable  $f$ , sus momentos espaciales (Cirpka y Kitanidis, 2000) quedan definidos como sigue:

$$m_0 = \int_V f dV \quad (2.13)$$

$$m_i = \int_V X_i f dV \quad (2.14)$$

$$m_{ij} = \int_V X_i X_j f dV \quad (2.15)$$

$$m_{ijk} = \int_V X_i X_j X_k f dV \quad (2.16)$$

donde  $m_0$  es el momento de orden cero,  $m_i$  es el momento de primer orden,  $m_{ij}$  es el tensor del momento de segundo orden y  $m_{ijk}$  es el momento de tercer orden y así sucesivamente. Si la variable espacial  $f$  es la concentración, entonces  $m_0$  representa la masa total en el dominio,  $m_i$  es la masa total multiplicado por la posición del centro de gravedad. El cálculo del momento espacial de segundo orden está dado por:

$$m_{c,ij} = \int_V (X_i - \bar{X}_i)(X_j - \bar{X}_j) f dV = m_{ij} - \frac{m_i m_j}{m_0} \quad (2.17)$$

con

$$\bar{X}_i = \frac{m_i}{m_0} \quad (2.18)$$

El tensor del momento espacial de segundo orden es una medida de la dispersión espacial de la distribución de la pluma y su deformación debido a la heterogeneidad del medio.

Una propiedad útil de los métodos basados en el enfoque Lagrangiano de partículas es la posibilidad de representar los momentos espaciales ( $m_{c,i}$ ,  $m_{c,ij}$ ) a través de los momento de inercia ( $\bar{X}$ ,  $S_{xx}$ ) de una nube de partículas para cada tiempo de simulación, obteniéndose lo siguiente:

$$\bar{X} = \frac{1}{N_p} \cdot \sum_{i=1}^n X_i \quad (2.19)$$

$$S_{xx} = \frac{1}{N_p} \cdot \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = \left( \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 \right) - \bar{X}^2 \quad (2.20)$$

donde  $N_p$  es el número de muestras y  $X_i$  es la posición de la partícula  $i$  en la coordenada  $X$ .  $S_{xx}$  es equivalente a la varianza de la posición de la pluma de solutos, y por simplicidad, será llamado momento espacial de segundo orden en los capítulos siguientes.

### 2.4.2. Índice de dilución (Dilution Index)

El índice de dilución (Kitanidis, 1994), representa el nivel de dilución y mezcla del cuerpo de soluto sobre un volumen dado, pudiendo ser útil para distinguir entre los procesos de dispersión y dilución del cuerpo de solutos en el medio. Este índice está basado en la teoría de la entropía, valor que describe la cantidad de información contenida en una fuente. Para el problema donde existe dilución, el valor puede ser analizado como la probabilidad de encontrar una partícula con masa no nula en el dominio, lo cual puede interpretarse como el volumen ocupado por el cuerpo de soluto en el medio y su evolución en el tiempo. Según lo señalado por Kitanidis (1994), es muy importante hacer la distinción entre dispersión y dilución de la pluma. El primero está asociado a la deformación o alargamiento del cuerpo de soluto, mientras que la dilución está asociada a un incremento en el volumen del fluido ocupado por la pluma.

Para su derivación se asume que  $P_k$  es la razón entre la concentración de una partícula  $k$  dividido por la masa total:

$$P_k = C_k/M_t \quad (2.21)$$

este valor puede ser interpretado como la probabilidad de encontrar una partícula con concentración no despreciable. El grado de dilución se define como:

$$E = \exp \left[ - \int_V P_k \ln(P_k) dV \right] \quad (2.22)$$

donde  $V$  es el volumen del dominio. Considerando que el volumen máximo donde el cuerpo de soluto puede diluirse es igual al volumen del dominio, es posible definir el valor máximo como  $E_{max} = V$ . Debido a que se utilizó un método de partículas (*SPH*) se consideró que el volumen total sería el delimitado por la zona ocupada por partículas (zona externa que rodea a las partículas con concentraciones inicial no nula que son necesarias para recrear la dilución de los compuestos en el medio). Por lo tanto se define la razón entre el índice de dilución actual y el máximo teórico como:

$$M(t) = E(t)/E_{max} \quad (2.23)$$

Este valor adimensional fluctúa entre 0 y 1, y describe que tan completa es la dilución actual del sistema, comparándolo con el valor teórico máximo posible de alcanzar. Un resultado cercano a 0 indica poca dilución, y un valor cercano a 1 indica que existe un alto grado de dilución. Por lo tanto, mientras mayor sea el valor de  $M(t)$ , más cerca se encuentra el sistema de su estado de equilibrio, que ocurre cuando el soluto se diluye a través de todo el dominio. Un coeficiente similar comparable con el  $E$  es la varianza de la concentración de un compuesto  $C$  ( $\|\sigma_C^2\|$ ). Según el trabajo de Thierrin y Kitanidis (1994), determinar estos coeficientes mencionados en un acuífero heterogéneo con precisión es una tarea difícil, ya que se requiere un gran número de muestras.

### 2.4.3. Disipación escalar (scalar dissipation)

La tasa de disipación escalar (scalar dissipation rate, SDR) representa la tasa de decaimiento del segundo momento de la concentración y cuantifica la tasa de mezcla definida a través de los gradientes locales de concentración (Pope, 2000).

Por un lado, para un medio homogéneo la mezcla es completamente controlada por la difusión y la dispersión local. Para un medio heterogéneo esto es distinto, ya que el medio crea gradientes de concentraciones altas, los cuales a través de la dispersión local pueden aumentar o disminuir la mezcla. Es por esto que, en general, se utilizan factores promedios para conocer el estado de la mezcla del sistema.

La medida de la mezcla global del sistema se define a través de la *SDR* (Le Borgne et al., 2010):

$$SDR(t) = \int_{\omega} D \nabla C(x, t) \cdot \nabla C(x, t) d^d x \quad (2.24)$$

donde  $D$  es el coeficiente de dispersión local,  $C$  es la concentración local del sistema y  $d$  el número de dimensiones.

Debido a los problemas de implementación de la *SDR*, como son los grandes cambios en los gradientes de la concentración, los que varían fuertemente en pequeñas distancias, Fernández-García et al. (2008) proponen una interpolación suavizada del campo de concentraciones para un número limitado de partículas. Al calcular los gradientes de la concentración sin la suficiente resolución numérica, la predicción de la mezcla y producción de compuestos estará completamente alejada de la realidad.

Sin embargo, la mezcla global del sistema a través del *SDR* puede ser determinada sin la necesidad de calcular los gradientes de concentración local. Por lo tanto, es posible evaluar la *SDR* a través de la integral de la concentración al cuadrado, definida como:

$$SD(t) = \int_{\omega} C(x, t)^2 d^d x \quad (2.25)$$

Valor que corresponde a la disipación escalar (Scalar Dissipation) y de ahora en adelante será renombrada *SD*. Para el caso de transporte advectivo-difusivo, asumiendo que no existe flujo en los límites del dominio, la *SDR* puede ser expresado como:

$$SDR(t) = -\frac{1}{2} \frac{dSD}{dt} \quad (2.26)$$

La expresión de la ecuación (2.26) es equivalente a la ecuación (2.24), al agregar restricciones e integrar sobre el espacio en esta última ecuación, utilizando el teorema de la divergencia. Para más detalles sobre la *SDR* y su respectivo cálculo, revisar el trabajo de los autores Le Borgne et al. (2010).

#### 2.4.4. Coeficientes adicionales

En esta sección se presentan algunos coeficientes los cuales son utilizados ampliamente en investigaciones similares para la estimación de la concentración y el estado de la dilución del cuerpo de solutos.

##### Concentración media ( $\bar{C}$ )

Para calcular la media de la concentración se utilizó la siguiente fórmula:

$$\bar{C} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n C_i \quad (2.27)$$

donde  $n$  es el número total de partículas,  $C_i$  es la concentración de la partícula  $i$ .

##### Varianza de la concentración ( $\sigma_C^2$ )

La varianza de la concentración ( $\sigma_C^2$ ) al igual que el  $E$  son usados para cuantificar la dilución en el sistema. Sin embargo, son indicadores muy difíciles de aplicar correctamente en los sitios reales de estudio, pues requieren de una gran densidad de muestras y datos del terreno. Para calcular la varianza de la concentración se utilizó la siguiente fórmula:

$$\sigma_C^2 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (C_i - \bar{C})^2 = \left( \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n C_i^2 \right) - \bar{C}^2 \quad (2.28)$$

donde  $n$  es el número total de partículas,  $C_i$  es la concentración del soluto en la partícula  $i$  y  $\bar{C}$  es la concentración media.

Un problema existente con ambos coeficientes es que son un promedio total del sistema, siendo incapaces de cuantificar localmente los grados de dilución de la pluma.

##### Concentración máxima ( $C_{peak}$ )

Este parámetro es un buen indicador del grado de dilución de la pluma, además de ser fácil de obtener, ya que solo basta rastrear la partícula o celda con la máxima concentración para cada tiempo:

$$C_{peak} = \max_{i=1\dots n} C_i \quad (2.29)$$

# Capítulo 3

## Estudios preliminares

En este capítulo se presentan resultados preliminares, los cuales fueron utilizados para definir el rango de validez de los parámetros de las simulaciones, así como el número de realizaciones necesarias para la estimación de los resultados.

Este capítulo se divide en dos secciones, la primera corresponde al análisis de la variabilidad entre simulaciones para la estimación de los procesos de deformación y mezcla del soluto, mientras que la segunda es la estimación de los momentos espaciales utilizando la metodología propuesta por Rubin (2003) para distintos grados de heterogeneidad, estudiando su rango de validez.

### 3.1. Variabilidad de las simulaciones numéricas

En esta sección se estudió la variabilidad que existe entre cada realización individual con respecto al promedio de un número grande de ellas. Para esto se comparó entre casos que utilizan un CFV o un CGV, con y sin coeficientes de dispersión adicionales. Para este estudio se consideró que las plumas cumplen con la condición de ergodicidad, con un largo horizontal de  $L_x = 16 \cdot I_Y$  y una longitud transversal de  $L_x = 90 \cdot I_Y$ .

En primer lugar se estudió el efecto que tienen el número de realizaciones utilizadas en el cálculo del momento espacial de segundo orden ( $S_{xx}$ ), estimando la sensibilidad respecto al número de realizaciones utilizados para el cálculo del comportamiento promedio del sistema, especialmente para el caso donde no se cuenta con un número elevado de realizaciones. Los parámetros adoptados en las simulaciones y valores de los distintos coeficientes se encuentran en la Tabla 3.1

Tabla 3.1: Parámetros utilizados para las simulaciones de variabilidad.

Parámetros	Unidad	Valor
<i>Conductividad Log(Y)</i>		
Varianza ( $\sigma_Y^2$ )	-	0,2; 1; 3; 6
Escala integral ( $I_Y$ )	$m$	0,5
<i>Definición del dominio base</i>		
Largo dominio ( $L_x$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo dominio ( $L_y$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo celda cuadrada ( $\lambda_f$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
Nº de celdas horizontales	-	1024
Nº de celdas transversales	-	1024
<i>Campo de velocidades</i>		
Grad. hidráulico	-	0,1
Velocidad media ( $U$ )	$m/s$	0,258
<i>Parámetros grilla gruesa</i>		
Largo celda cuadrada ( $\lambda_c$ )	$m$	$1,6 \cdot I_Y$ ; $3,2 \cdot I_Y$ ; $6,4 \cdot I_Y$
<i>Parámetros del soluto</i>		
Concentración inicial de A	$mg/l$	1
<i>Parámetros de Transporte</i>		
Número de Péclét ( $Pe$ )	-	25, 100, 250, 2500
Nº de partículas ( $SPH$ )	-	968000, 1317600 (solo para $Pe=25$ )
Largo de suavizado del método SPH (SL)	$m$	0,1
Largo vertical pluma de solutos	$m$	$90 \cdot I_Y$
Largo horizontal pluma de solutos	$m$	$16 \cdot I_Y$

### 3.1.1. Variabilidad del momento espacial de segundo orden

Para comprobar la variabilidad del momento espacial de segundo orden del soluto ( $S_{xx}$ ), debido principalmente a la heterogeneidad del medio, se estudió el efecto de promediar considerando un número variable de realizaciones. En primer lugar se simularon 100 casos con distintos campos  $\ln(K)$ , los cuales comparten las mismas propiedades estadísticas y parámetros del problema. Para el cálculo del promedio se consideran los primeros 5, 10, 20 y 50 experimentos, además de un promedio compuesto por todas las realizaciones.

Se analizó la tasa de deformación de la pluma de soluto, valor adimensionalizado por su magnitud inicial ( $S_{xx}/S_{xx0}$ ) para un CFV (ver Figura 3.1) y para un CGV ( $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$ , ver Figura 3.2), tomando en cuenta que la primera captura toda la heterogeneidad y la segunda

no.

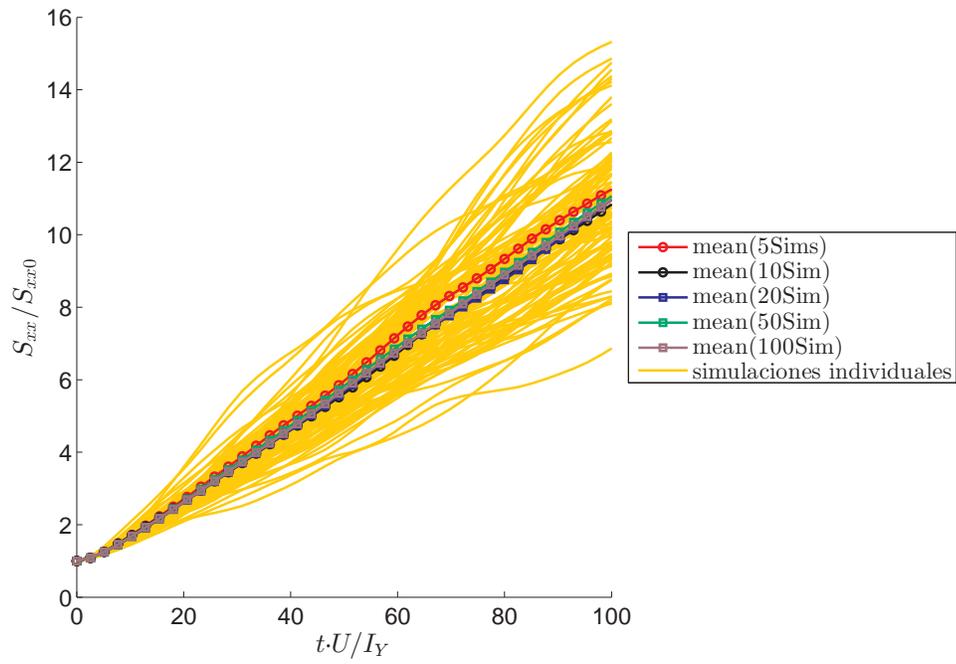


Figura 3.1: Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para 100 simulaciones de distintos campos  $\ln(K)$  con  $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y$  y para el promedio, considerando distintos números de realizaciones para su cálculo.

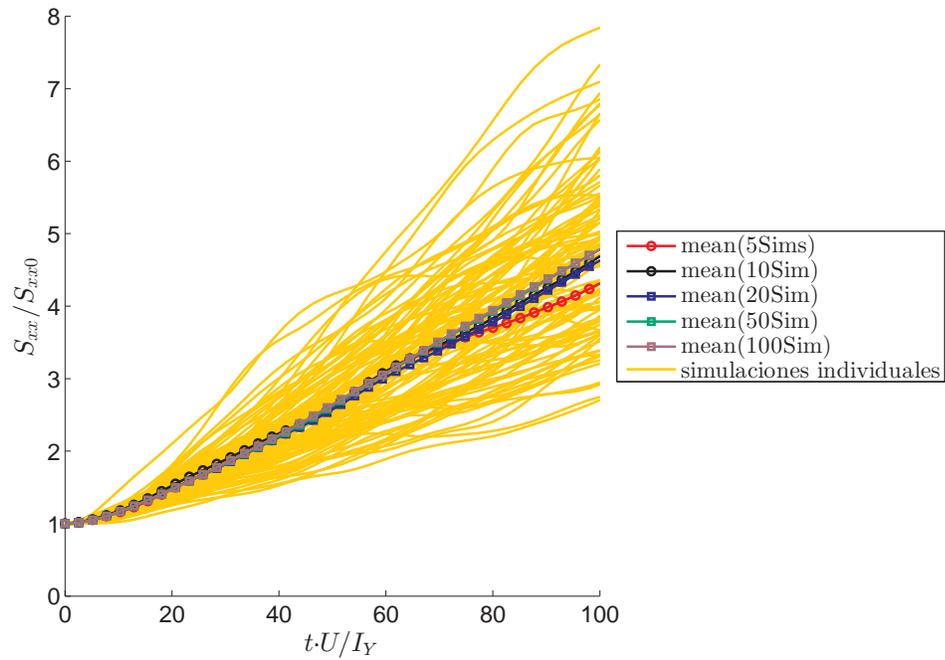


Figura 3.2: Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para 100 simulaciones de distintos campos  $\ln(K)$  con  $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$  y para el promedio, considerando distintos números de realizaciones para su cálculo.

Los resultados presentados indican que existe una gran variabilidad entre realizaciones individuales para el momento espacial de segundo orden del soluto, encontrándose gran dispersión de algunas realizaciones individuales respecto al valor promedio de ellas.

Además, no existen grandes diferencias entre calcular el momento espacial de segundo orden promedio utilizando 10 simulaciones respecto de utilizar un gran número de éstas, siendo posible obtener un buen resultado con solo 5 realizaciones, acercándose bastante al promedio con un pequeño error de cálculo menor al 5%. Estos resultados son válidos para distintos tamaños de la discretización, desde de una grilla muy fina que captura complemente la heterogeneidad del medio, al caso extremo, que es una grilla gruesa (con un área de celda  $32^2$  veces mayor al área de una celda fina).

Otro punto a señalar es que un CFV tiene valores mayores del momento espacial de la pluma respecto a un CGV, siendo este último al menos 2 veces más pequeño para cada tiempo de simulación. Por lo tanto, al remover la heterogeneidad, se subestima el valor del momento espacial y de los procesos asociados a la deformación de la pluma de soluto, como es la tasa global de mezcla, la cual está influenciada y es potenciadas por la heterogeneidad del medio al crearse patrones de flujo más complejos (de Dreuzy et al., 2012).

### **Variabilidad para distintos grados de heterogeneidad**

Considerando los resultados anteriores, se evaluó cómo influye los distintos grados de heterogeneidad del medio en la estimación del momento espacial de segundo orden del soluto. Para esto se simularon un conjunto de 10 realizaciones para distintos tamaños de  $\lambda_c$ , con valores de  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$  y con un número de Péclet infinito.

Si bien los resultados presentan un comportamiento con gran variabilidad entre realizaciones individuales, la magnitud del coeficiente evaluado ( $S_{xx}$ ) aumenta en magnitud a medida que crece la heterogeneidad del medio permeable. Considerando los resultados de la Figura 3.3, con los resultados de las Figuras 3.2 y 3.1, se puede concluir que si bien existe variabilidad entre simulaciones para los distintos niveles de heterogeneidad probados, es posible obtener un comportamiento medio del sistema con un número reducido de realizaciones.

Esto es aplicable para distintos tamaños de la discretización  $\lambda_c$ . Además, a medida que aumenta la heterogeneidad, la magnitud del coeficiente es mayor para todas las realizaciones, presentando un comportamiento no-lineal, especialmente para  $\sigma_Y^2 = 6$ . Respecto al valor de  $\lambda_c$  escogido, a medida que este aumenta, la magnitud del coeficiente disminuye drásticamente debido a la pérdida de variabilidad para representar el campo de velocidades, lo que ocasiona una estimación incorrecta, que se vuelve crítica a medida que la heterogeneidad del medio crece.

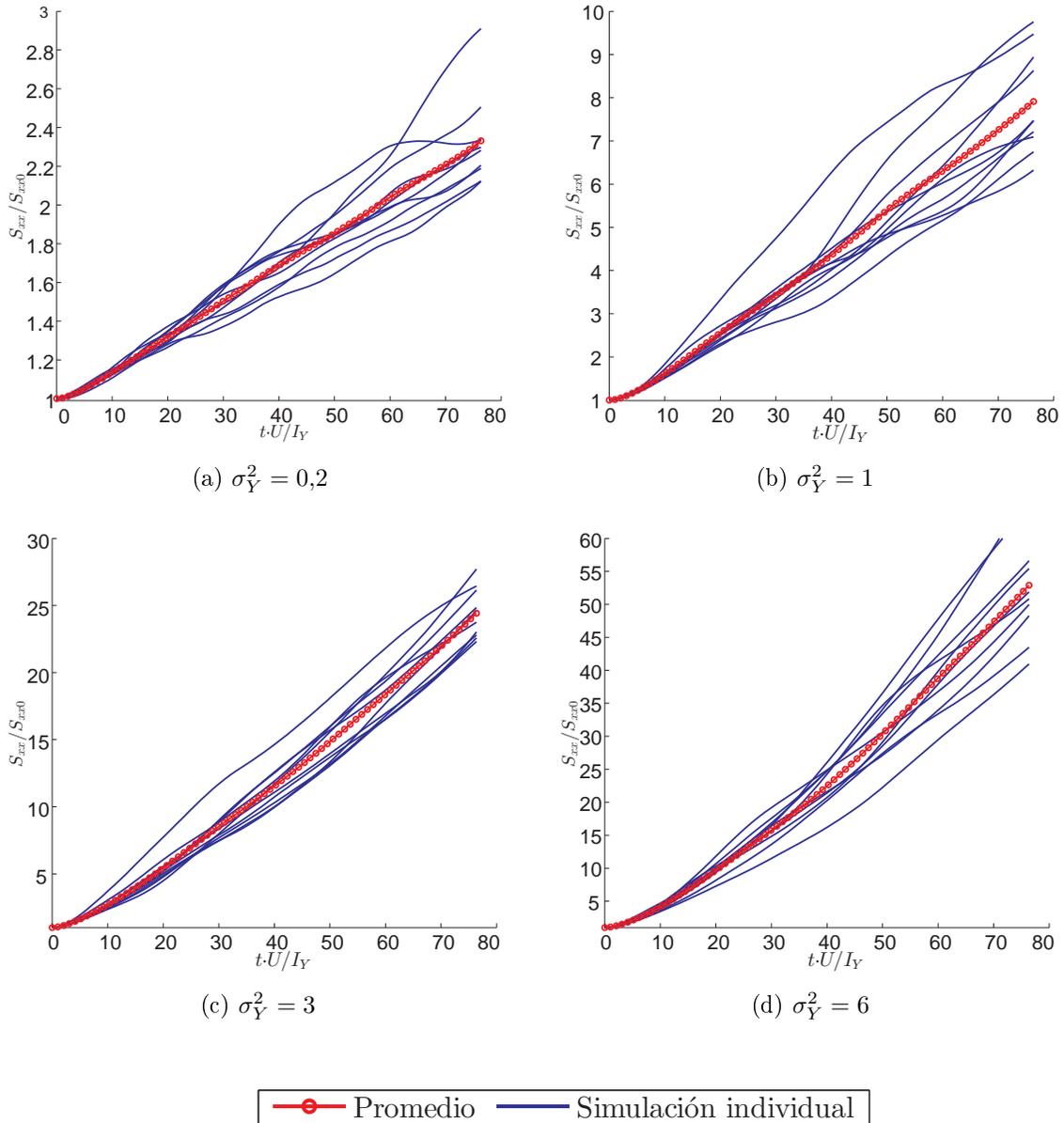


Figura 3.3: Momento espacial de segundo orden del soluto para 10 realizaciones distintas del  $\ln(K)$  y el valor promedio, considerando distintos  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , para un CFV con  $\lambda_f = 0,2 \cdot I$  de largo.

## Comparación con resultados encontrados en la literatura

Se estudió el resultado obtenido por Rubin et al. (1999), presentado en la Figura 7 de dicho artículo, con respecto a los resultados obtenidos para un conjunto de realizaciones, considerando que el número de Péclet es infinito, y un valor de  $\sigma_Y^2 = 0,2$ ; que corresponde a un medio con una baja heterogeneidad (ver Figura 3.4).

Es posible notar que Rubin et al. (1999) resolvió para los primeros tiempos de simulación, donde la pluma solamente ha avanzado 15 escalas integrales y el resultado obtenido en las simulaciones aquí realizadas es para 70 escalas integrales. Al comparar las soluciones de los distintos  $\lambda_c$  para los primeros tiempos de simulación, el ajuste encontrado es prácticamente idéntico, existiendo desviaciones notorias para tiempos largos de simulación producto de la heterogeneidad del medio. En ambos resultados es apreciable que al utilizar el  $D_b(t)$  para  $\lambda_c$  mayores, se obtiene una mejor estimación en comparación con el caso real que considera  $\lambda_f$ .

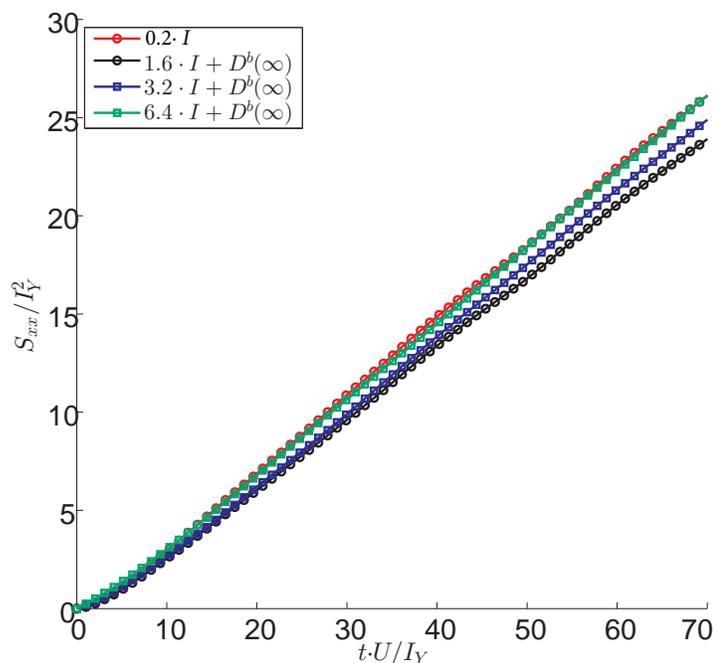


Figura 3.4: Momento espacial de segundo orden adimensionalizado por su valor inicial versus tiempo adimensional para distintos  $\lambda_c$  asumiendo  $\sigma_Y^2 = 0,2$ . La solución de Rubin et al. (1999) es para una pluma que ha recorrido 15 escalas integrales, mientras que la aquí obtenida es para 70 escalas integrales.

### 3.1.2. Variabilidad de la mezcla y dilución

También se estudió la variabilidad de la mezcla y dilución entre casos simulados, estimado a través de la varianza de la concentración adimensionalizada por su valor inicial ( $\sigma_A^2/\sigma_{A_0}^2$ ). Utilizando la metodología descrita anteriormente se buscó determinar qué tan grande es la variación entre realizaciones, y cómo afecta la estimación el promediar utilizando un número pequeño de realizaciones para describir el comportamiento del sistema.

Los resultados siguientes corresponden a 10 realizaciones para un CFV ( $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y$ ) y para un CGV ( $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$ ), considerando medios porosos heterogéneos con  $\sigma_Y^2 = 1$ . Para estos análisis se asumieron dos valores de  $Pe = [25; 2500]$  correspondientes al transporte principalmente difusivo y advectivo.

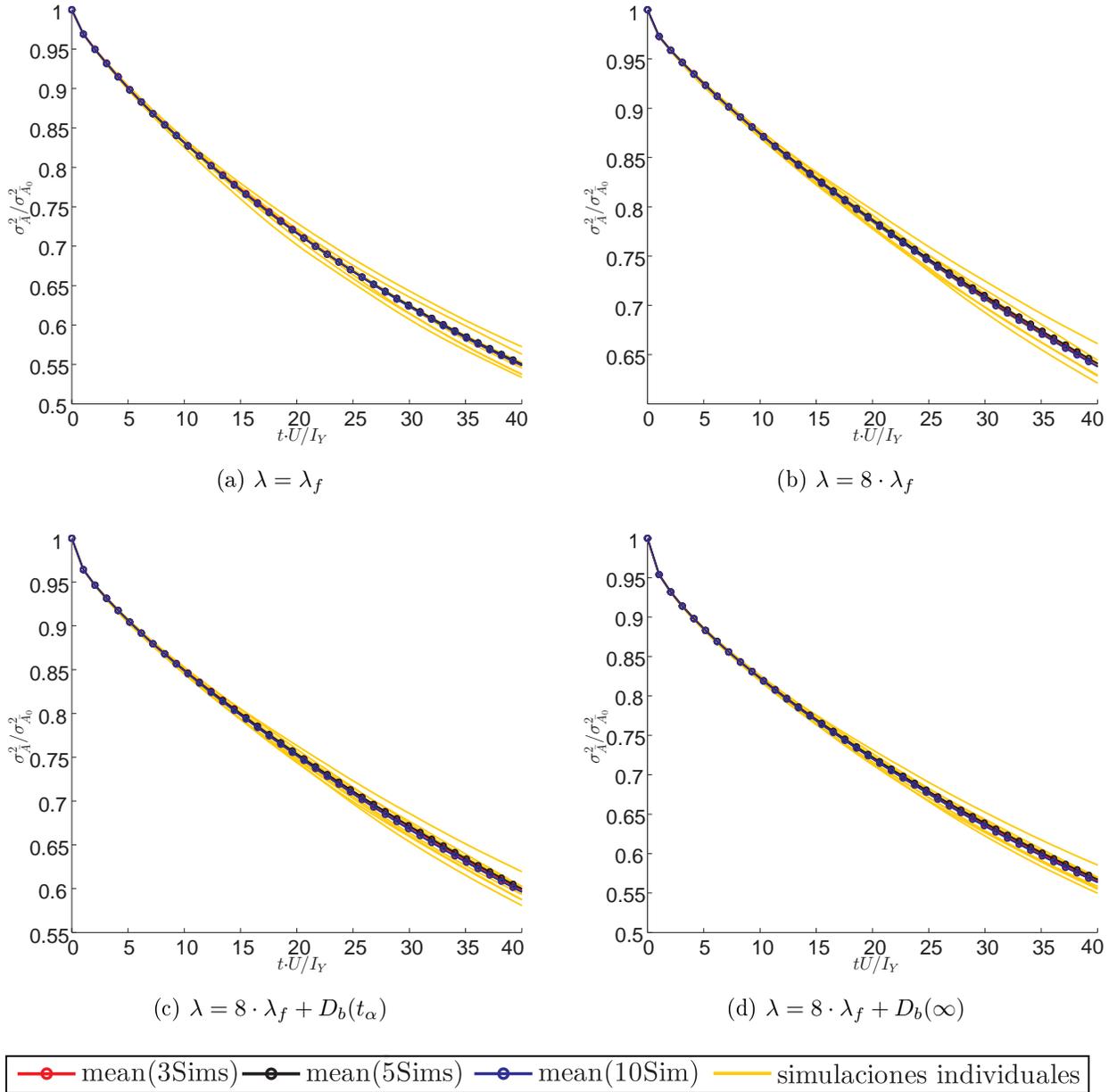


Figura 3.5: Resultados de la varianza de la concentración obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones con  $\sigma_Y^2 = 1$ , considerando un valor de  $Pe = 25$  para distintos tamaños de la discretización de la grilla numérica y el uso de coeficientes de macrodispersión.

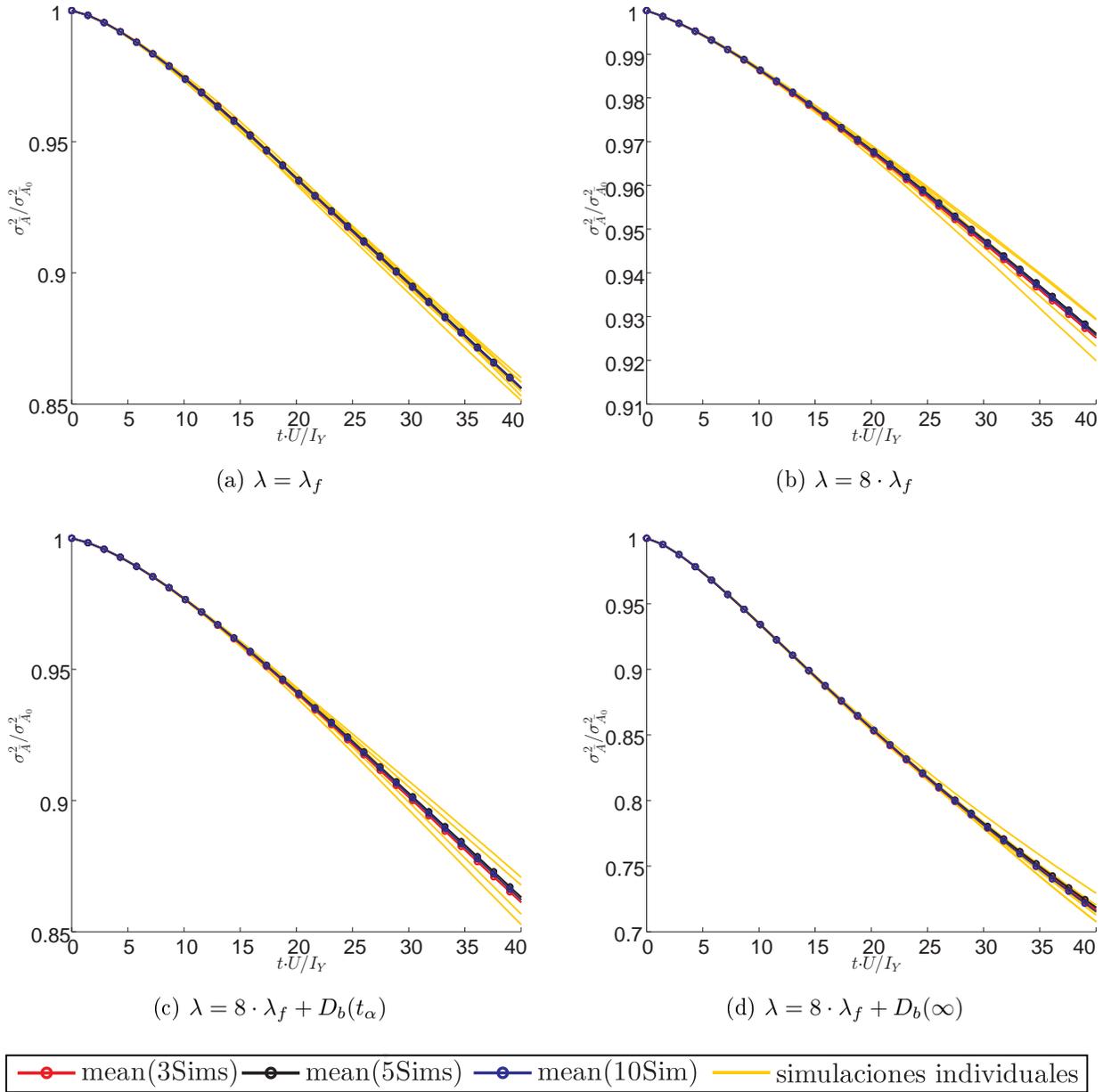


Figura 3.6: Resultados de la varianza de la concentración obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones con  $\sigma_Y^2 = 1$ , considerando un valor de  $Pe = 2500$  para distintos tamaños de la discretización de la grilla numérica y el uso de coeficientes de macrodispersión.

### 3.1.3. Análisis y comentarios

Los resultados obtenidos muestran que la variabilidad entre realizaciones para procesos de mezcla y dilución no es tan grande en comparación con la variabilidad existente entre realizaciones al describir el momento espacial de segundo orden del soluto.

En este caso se utilizó la varianza de la concentración, parámetro que indica el estado de la mezcla a lo largo del tiempo. Para este coeficiente se obtuvieron valores para las realizaciones individuales cercanos al promedio, sin observarse grandes variaciones o cambios en el comportamiento de las curvas a diferencia del momento espacial de segundo orden. Sin embargo, las diferencias del comportamiento individual respecto al promedio podrían ser importantes para tiempos largos de simulación. Además, es posible obtener resultados cercanos al comportamiento promedio del sistema, sin recurrir a una gran cantidad de realizaciones individuales, al menos para los casos del transporte analizados en la tesis. En este caso, se obtuvo un valor muy preciso respecto al promedio de 10 realizaciones, considerando solo 3 simulaciones para los distintos casos y parámetros simulados. De todas maneras, si se busca minimizar el error, es recomendable contar con un mayor número de realizaciones para considerar la solución como exacta y característica del medio.

## 3.2. Momentos espaciales para distintos grados de la heterogeneidad del medio

En esta sección se estudió los límites de la teoría propuesta por Rubin et al. (1999, 2003) para la estimación de los momentos espaciales, cuando el número de Péclet es grande y el transporte es principalmente advectivo. Según lo señalado en los trabajos de Rubin et al., la teoría tiene un límite de validez para  $\sigma_Y^2 < 1$ , debido a que esta basada en el método de las perturbaciones, el que asume que los términos de mayor orden de  $\sigma_Y^2$  son despreciados al momento de aplicar la teoría a las ecuaciones de transporte. En sus trabajos probaron la teoría al considerar que  $\sigma_Y^2 = 0,2$ , demostrando un funcionamiento correcto. Por lo tanto se exploró en esta tesis la validez del enfoque para distintos grados de heterogeneidad, abarcando valores de  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ .

La Figura 3.7 muestra una comparación entre campos de conductividad hidráulica y campos de velocidades con distintos niveles de heterogeneidad. Los medios altamente heterogéneos presentan mayor número de conexiones, con pasos preferenciales de flujo y marcadas zonas de estancamiento. Sin embargo, no se observa un efecto importante en la correlación de velocidades, siendo prácticamente independiente a los cambios de la varianza. El principal efecto es que la distribución de las velocidades Lagrangianas asintóticas se mueve hacia magnitudes superiores, pero sin modificar la estructura de la correlación (Le Borgne et al., 2008). Algo similar ocurre con la correlación de la escala temporal, la cual es función de la velocidad inicial, siendo independiente del valor de  $\sigma_Y^2$ . Con esto se consiguen velocidades extremas mucho

mayores a los medios con un grado de heterogeneidad media-baja, impactando en los procesos químicos y físicos, existiendo una mayor dilución y mezcla de componentes, así como una aceleración en la tasa de deformación de la pluma de soluto producto de la heterogeneidad.

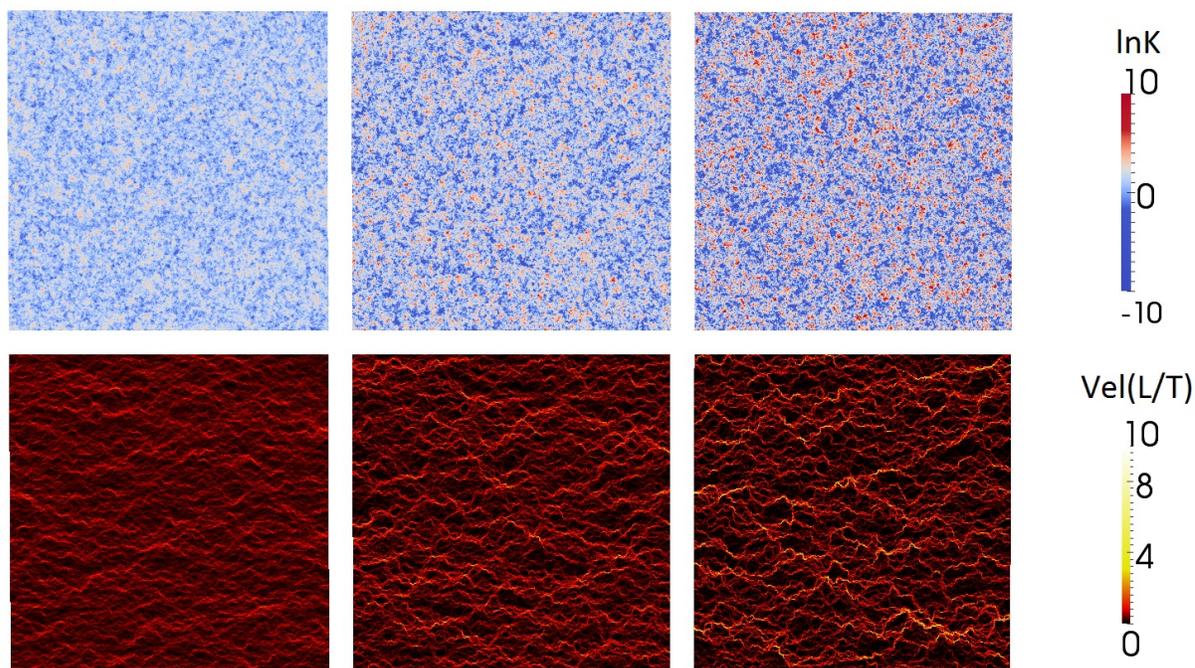


Figura 3.7: Comparación de campos logarítmicos de conductividad hidráulica y de velocidad, los cuales presentan distintos grados de heterogeneidad, con valores de  $\sigma_Y^2 = (1; 3; 6)$ , incrementando en magnitud de izquierda a derecha respectivamente. En la parte superior se presenta el campo  $\ln(K)$  y en la inferior el campo de velocidades generado. Como se puede apreciar, el incremento de  $\sigma_Y^2$  genera un aumento en la heterogeneidad del campo  $\ln(K)$ ; esto genera canales preferenciales de flujo, los cuales son más largos y están mejor conectados, como consecuencia se crean zonas de estancamiento del flujo, produciéndose una mayor diferencia entre las velocidades extremas del sistema.

Para estas simulaciones se asumió una pluma de solutos ergódica con un número de Péclet infinito, resolviéndose tres series descritas a continuación:

- T1*: La línea roja representa la modelación utilizando un CFV ( $\lambda_f = 0,2 \cdot I$ , caso base) la cual captura toda la heterogeneidad del medio.
- T2*: La línea negra con círculos representa el resultado obtenido con un CGV con celdas de largo  $\lambda_c$ , la que captura parcialmente la heterogeneidad del medio.
- T3*: La línea verde representa el uso de un CGV (con  $\lambda_c$ ) agregando un coeficiente de dispersión adicional  $D^b(\infty)$  (Rubin et al., 1999) evaluado en el tiempo asintótico.

Los parámetros de la simulación son presentados en la Tabla 3.2 y los resultados de este

experimento son presentados a continuación en las Figuras 3.8, 3.9 y 3.10, correspondientes a distintos tamaños del bloque de la grilla.

Tabla 3.2: Parámetros utilizados para las simulaciones de los momentos espaciales de la posición para distintos grados de heterogeneidad del medio permeable.

Parámetros	Unidad	Valor
<i>Conductividad Log(Y)</i>		
Varianza ( $\sigma_Y^2$ )	-	0,2; 1; 3; 6
Escala integral ( $I_Y$ )	$m$	0,5
<i>Definición del dominio base</i>		
Largo dominio ( $L_x$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo dominio ( $L_y$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo celda cuadrada ( $\lambda_f$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
Nº de celdas horizontales	-	1024
Nº de celdas transversales	-	1024
<i>Campo de velocidades</i>		
Grad. hidráulico	-	0,1
Velocidad media ( $U$ )	$m/s$	0,258
<i>Parámetros grilla gruesa</i>		
Largo celda cuadrada ( $\lambda_c$ )	$m$	$1,6 \cdot I_Y$ ; $3,2 \cdot I_Y$ ; $6,4 \cdot I_Y$
<i>Parámetros de Transporte</i>		
Número de Péclet ( $Pe$ )	-	$\infty$
Nº de partículas ( $SPH$ )	-	968000
Largo de suavizado del método SPH (SL)	$m$	0,1
Largo vertical pluma de solutos	$m$	$90 \cdot I_Y$
Largo horizontal pluma de solutos	$m$	$16 \cdot I_Y$

### 3.2.1. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

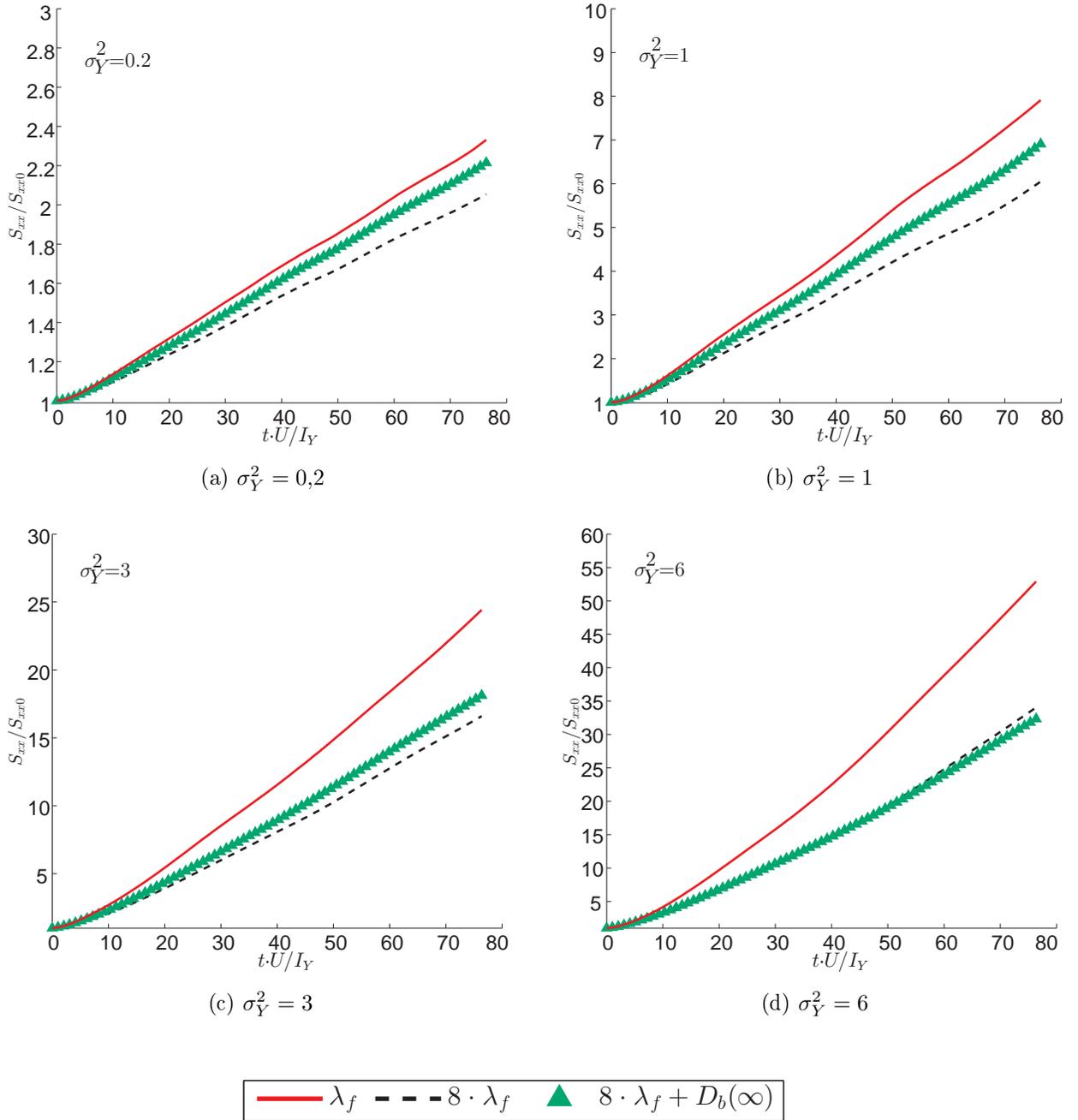


Figura 3.8: Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad,  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$  de largo.

### 3.2.2. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

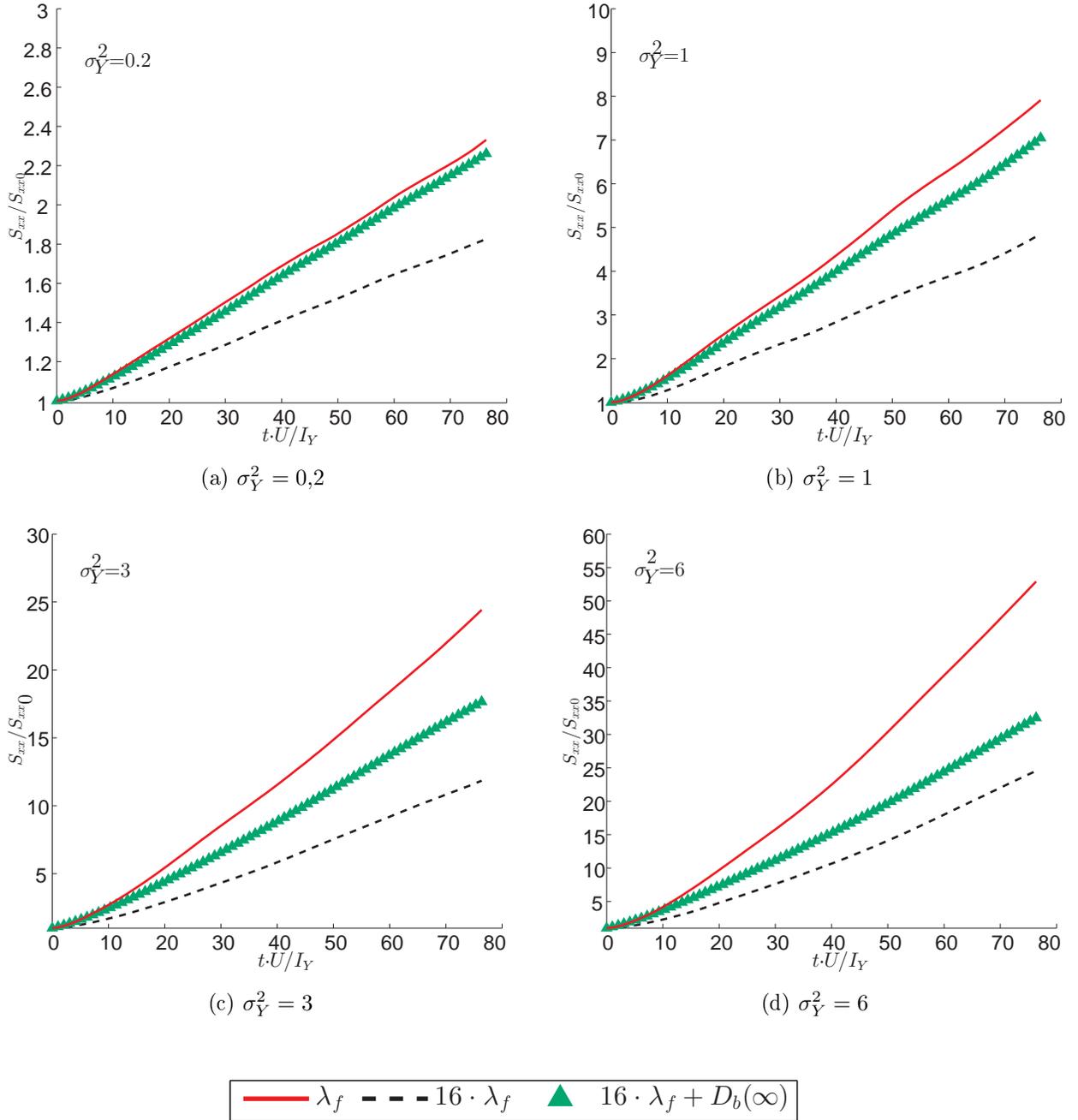


Figura 3.9: Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad,  $\sigma_Y^2 = [0.2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$  de largo.

### 3.2.3. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

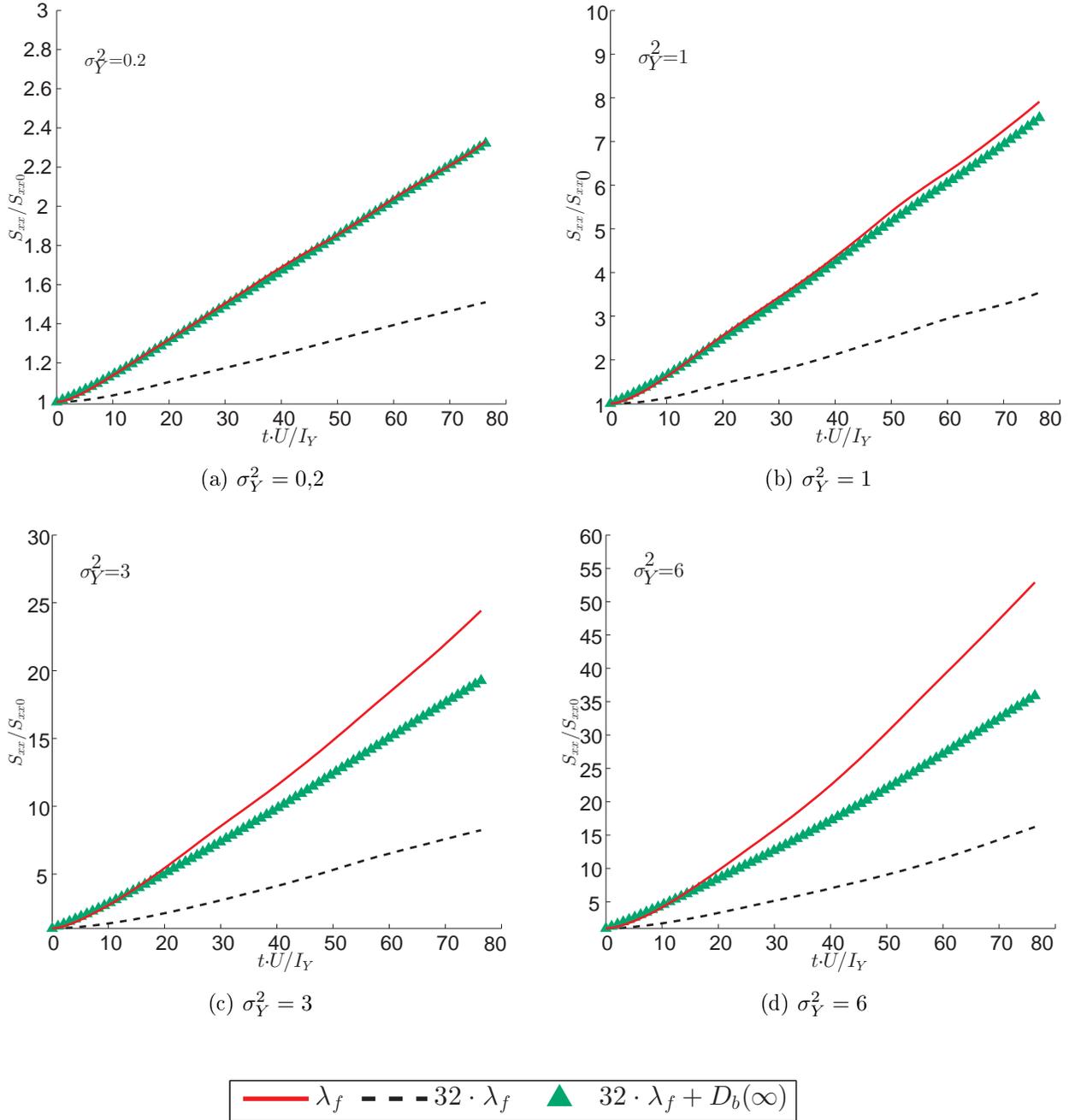


Figura 3.10: Resultados del momento espacial de segundo orden del soluto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional, obtenidos para el conjunto de 10 realizaciones, considerando distintos grados de heterogeneidad,  $\sigma_Y^2 = [0,2; 1; 3; 6]$ , y un CGV con una discretización  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$  de largo.

### 3.2.4. Análisis y comentarios

De los resultados obtenidos se puede apreciar que:

1. Al aumentar la heterogeneidad del medio se incrementa en magnitud el coeficiente calculado.
2. Para valores de  $\sigma_Y^2 = 3$  y  $6$  se observa un comportamiento no-lineal del coeficiente, lo que aumenta con el tiempo.
3. A medida que la heterogeneidad del medio aumenta, las diferencias entre el caso real (T1) y el caso filtrado (T2) son cada vez mayores.
4. A medida que el tamaño del bloque aumenta, las diferencias entre casos real y filtrado también crecen.
5. Al utilizar el coeficiente de macrodispersión en el caso filtrado (T3), la estimación es mejor a medida que es menor la heterogeneidad del medio, permitiendo estimar relativamente bien para  $\sigma_Y^2 \leq 1$  para los distintos valores de  $\lambda_c$ .
6. Para el caso filtrado con la utilización de coeficientes de macrodispersión (T3) se obtienen mejores resultados si el tamaño del bloque es mayor ( $\lambda_c = 6,4 \cdot I$ ).

Finalmente, es posible concluir que la utilización del coeficiente  $D^b(\infty)$  para la estimación de la tasa de deformación de la pluma de soluto en el medio, bajo las condiciones descritas, está limitado principalmente por el grado de heterogeneidad, obteniéndose soluciones correctas para valores de  $\sigma_Y^2 \leq 1$ . Cuando  $\sigma_Y^2 > 1$  se puede observar una curvatura en las distintas series simuladas, que es independiente del valor de  $\lambda$ , por lo que el supuesto de la ecuación (1.11) deja de ser válido.

A medida que el valor de  $\lambda_c$  aumenta, la estimación de los coeficientes es más precisa. Por otro lado, este resultado concuerda con el resultado de la Figura 7 del documento de los autores Rubin et al. (1999) y el resultado de la Figura 3.4, donde se señala que a medida que el tamaño de la discretización aumenta, la estimación utilizando  $D^b(\infty)$  es más cercana al caso base.

# Capítulo 4

## Transporte conservativo

### 4.1. Introducción

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos para las distintas simulaciones correspondientes al transporte conservativo de solutos. Estas simulaciones fueron realizadas con el fin de comprobar si la utilización del coeficiente de macrodispersión,  $D_b$ , logra aproximar correctamente la solución obtenida con un CGV, respecto a la solución real correspondiente a un CFV, donde se destacan las principales características de los experimentos para los diversos parámetros involucrados.

Las primera sección de este capítulo corresponde a resultados de la tasa de deformación de la pluma de soluto, lo cual es cuantificado a través del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, con tal de considerar el efecto de la dispersión local en el análisis. Para las secciones posteriores se encuentran los resultados de la dilución y mezcla, procesos que son cuantificados por parámetros tales como, el índice de dilución (E) y la disipación escalar (SD).

En las simulaciones se utilizaron campos de conductividad hidráulica que tienen un grado medio de heterogeneidad, con un valor de  $\sigma_Y^2 = 1$ . Rubin et al. (1999) señala que la teoría del  $D_b(t)$  debe funcionar correctamente para valores de  $\sigma_Y^2$  menores a la unidad, donde los medios heterogéneos están relativamente bien conectados y presentan canales ramificados por donde puede transportarse los solutos, con velocidades máximas y mínimas de escurrimiento cercanas al valor medio.

Para el largo de la discretización de la grilla fina del campo de velocidades, se consideró  $\lambda_f = 0,2 \cdot I_Y$ , siendo las soluciones obtenidas para este campo la consideradas base para la posterior comparación. Para la grilla gruesa de velocidades se consideró tres valores de la discretización:  $\lambda_c = [8; 16; 32] \cdot \lambda_f$ . Estos campos tienen una distribución de velocidades distintas debido al proceso de homogeneización, pero comparten las mismas propiedades estadísticas, lo cual hace comparables las soluciones obtenidas.

Además, se evaluaron cuatro valores distintos de  $Pe = [25; 100; 250; 2500]$ , lo que se consigue modificando el valor del coeficiente de dispersión local. El efecto de variar el número de Péclet permite analizar distintas condiciones de transporte, desde casos predominantemente difusivos a casos donde la advección es dominante.

Se generaron tres realizaciones para estimar los procesos de mezcla y la deformación de la pluma, debido a la gran carga computacional y el elevado número de casos analizados, presentándose en las figuras de este capítulo, el resultado del promedio del conjunto de ellas para cada tiempo simulado. Para determinar el número de realizaciones escogido, se utilizaron los resultados obtenidos en la Sección 3.1 donde se estudió la variabilidad en los procesos de mezcla. Con respecto a los resultados del momento espacial de segundo orden, este debió ser caracterizado con un menor número de realizaciones al estimado anteriormente (tres realizaciones en lugar de diez) para cada simulación realizada, ya que al simular la dispersión local en las simulaciones, los tiempos de cómputo y generación de resultados aumentaba significativamente, volviéndose inviables para efectos de la estimación. Por lo tanto, se consideró que al generar solo 3 realizaciones, es posible apreciar el comportamiento de los distintos casos simulados y el efecto de los coeficientes de macrodispersión adicionales utilizados.

Para las simulaciones se utilizaron alrededor de  $10^6$  partículas, y para la determinación del paso temporal se utilizó la siguiente ecuación (Herrera et al., 2009):

$$\Delta t \leq \frac{\varepsilon h^2}{D_L} \quad (4.1)$$

donde  $h$  es el largo suavizado del método SPH, y  $\varepsilon = 0,1$  es una constante. Esta relación garantiza la estabilidad del modelo y la precisión de la solución obtenida, ajustando el paso temporal, una vez conocido el largo de suavizado del método SPH, y corresponde al radio de interacción de una partícula con respecto a las demás, y el coeficientes de dispersión local ( $D_L$ ).

## 4.2. Definición de escenarios simulados

Para estas simulaciones, se adoptaron los parámetros señalados en la Tabla 4.1.

En la Tabla 4.2 se resumen las distintas series de datos simuladas, para cada conjunto de parámetros analizados, con el fin de comparar y evaluar la utilización de coeficientes de macrodispersión cuando la grilla numérica de velocidades no captura en su totalidad la heterogeneidad del medio.

Tabla 4.1: Parámetros utilizados en el transporte conservativo.

Parámetros	Unidad	Valor
<i>Conductividad Log(Y)</i>		
Varianza ( $\sigma_Y^2$ )	-	1
Escala integral ( $I_Y$ )	$m$	0,5
<i>Definición del dominio base</i>		
Largo dominio ( $L_x$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo dominio ( $L_y$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo celda cuadrada ( $\lambda_f$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
$N^\circ$ de celdas horizontales	-	1024
$N^\circ$ de celdas transversales	-	1024
<i>Campo de velocidades</i>		
Grad. hidráulico	-	0,1
Velocidad media ( $U$ )	$m/s$	0,258
<i>Parámetros grilla gruesa</i>		
Largo celda cuadrada ( $\lambda_c$ )	$m$	$1,6 \cdot I_Y$ ; $3,2 \cdot I_Y$ ; $6,4 \cdot I_Y$
<i>Parámetros del soluto</i>		
Concentración inicial de A	$mg/l$	1
<i>Parámetros de Transporte</i>		
Número de Péclet ( $Pe$ )	-	25; 100; 250; 2500
$N^\circ$ de partículas (SPH)	-	968000; 1317600 (solo para $Pe=25$ )
Largo de suavizado del método SPH ( $SL$ )	$m$	0,1
Largo vertical pluma de soluto	$m$	$90 \cdot I_Y$
Largo horizontal pluma de soluto	$m$	$16 \cdot I_Y$

Tabla 4.2: Series simuladas para cada experimento.

Caso	$\lambda$	Coef. macrodispersión	Características
C1	$\lambda_f$ : grilla fina	-	Línea sólida roja
C2	$\lambda_c$ : grilla gruesa	-	Línea segmentada negra
C3	$\lambda_c$ : grilla gruesa	$D_b(\infty)$	Triángulos verde
C4	$\lambda_c$ : grilla gruesa	$D_b(t_\alpha)$	Línea con puntos azul
C5	$\lambda_c$ : grilla gruesa	$D_b(t_{mix})$	Círculos amarillos

Estas series son para todos los resultados de esta sección, excepto para los casos donde el

número de Péclet es igual a 25, donde no incluyó el caso C5 debido a que la solución obtenida es muy cercana a la encontrada en el caso C3. Además, para las simulaciones con un  $Pe = 25$ , se consideró un mayor número de partículas para simular correctamente la dilución y mezcla del soluto, debido a que estos procesos ocurre muy rápidamente, en comparación con los otros casos (números de Péclet más grandes). Los valores del coeficiente de dispersión local ( $D_L$ ) y de macrodispersión de bloque efectivo ( $D^b(t_\alpha)$ ) utilizados en el caso C4 se encuentra definido en la Tabla 4.3, para los distintos valores parámetros del problema.

Tabla 4.3: Valores del coeficiente de dispersión local y de macrodispersión de bloque efectivo utilizados.

$Pe$	$\sigma_Y^2$	$\lambda_c$	$t_\alpha$	$D_L$	$D^b(t_\alpha)$	$D^b(t_\alpha)/D_L$
25	1	$1,6 \cdot I_Y$	0,64	5,00E-03	5,50E-03	1,1
25	1	$3,2 \cdot I_Y$	1,70	5,00E-03	2,08E-02	4,2
25	1	$6,4 \cdot I_Y$	4,37	5,00E-03	5,27E-02	10,5
25	3	$1,6 \cdot I_Y$	0,33	5,00E-03	8,53E-03	1,7
25	3	$3,2 \cdot I_Y$	0,96	5,00E-03	3,69E-02	7,4
25	3	$6,4 \cdot I_Y$	2,53	5,00E-03	1,06E-01	21,2
25	6	$1,6 \cdot I_Y$	0,22	5,00E-03	1,07E-02	2,1
25	6	$3,2 \cdot I_Y$	0,66	5,00E-03	4,90E-02	9,8
25	6	$6,4 \cdot I_Y$	1,76	5,00E-03	1,49E-01	29,9
100	1	$1,6 \cdot I_Y$	0,30	1,25E-03	1,98E-03	1,6
100	1	$3,2 \cdot I_Y$	0,85	1,25E-03	1,22E-02	9,8
100	1	$6,4 \cdot I_Y$	2,18	1,25E-03	3,48E-02	27,9
250	1	$1,6 \cdot I_Y$	0,19	5,00E-04	1,98E-03	3,9
250	1	$3,2 \cdot I_Y$	0,54	5,00E-04	8,25E-03	16,5
250	1	$6,4 \cdot I_Y$	1,38	5,00E-04	2,47E-02	49,3
2500	0,2	$1,6 \cdot I_Y$	0,14	5,00E-05	3,11E-04	6,2
2500	0,2	$3,2 \cdot I_Y$	0,20	5,00E-05	6,92E-04	13,9
2500	0,2	$6,4 \cdot I_Y$	0,26	5,00E-05	1,15E-03	23,0
2500	1	$1,6 \cdot I_Y$	0,06	5,00E-05	6,63E-04	13,3
2500	1	$3,2 \cdot I_Y$	0,17	5,00E-05	2,80E-03	55,9
2500	1	$6,4 \cdot I_Y$	0,44	5,00E-05	8,98E-03	179,5
2500	3	$1,6 \cdot I_Y$	0,03	5,00E-05	1,02E-03	20,4
2500	3	$3,2 \cdot I_Y$	0,10	5,00E-05	4,34E-03	86,8
2500	3	$6,4 \cdot I_Y$	0,25	5,00E-05	1,45E-02	289,8
2500	6	$1,6 \cdot I_Y$	0,02	5,00E-05	1,23E-03	24,7
2500	6	$3,2 \cdot I_Y$	0,07	5,00E-05	5,71E-03	114,3
2500	6	$6,4 \cdot I_Y$	0,18	5,00E-05	1,94E-02	388,3

Para los valores del coeficiente  $D_b(\infty)$  evaluados en el tiempo asintótico, correspondientes al caso C3, se definen en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4: Valores del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en el tiempo asintótico.

$\sigma_Y^2$	$\lambda_c$	$D^b(\infty)$
0,2	$1,6 \cdot I_Y$	2,87E-03
0,2	$3,2 \cdot I_Y$	7,91E-03
0,2	$6,4 \cdot I_Y$	1,48E-02
1	$1,6 \cdot I_Y$	1,40E-02
1	$3,2 \cdot I_Y$	3,86E-02
1	$6,4 \cdot I_Y$	7,22E-02
3	$1,6 \cdot I_Y$	4,00E-02
3	$3,2 \cdot I_Y$	1,10E-01
3	$6,4 \cdot I_Y$	2,06E-01
6	$1,6 \cdot I_Y$	7,61E-02
6	$3,2 \cdot I_Y$	2,09E-01
6	$6,4 \cdot I_Y$	3,91E-01

### 4.3. Momentos espacial de segundo orden ( $S_{xx}$ )

En esta sección se presentan los resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración del soluto, coeficiente que mide la tasa a la cual se deforma la pluma de soluto, debido a la heterogeneidad del medio y es conocido en la literatura por el término de spreading. Al estar ponderada por la concentración se logra incluir el efecto de la dispersión local en los resultados. Para más detalles del coeficiente, revisar la Sección 2.4.1.

Para este coeficiente, se evaluaron cuatro distintos valores del número de Péclet y tres tamaños de la discretización de la grilla gruesa de velocidades, parámetros presentados en la Tabla 4.1. En cada combinación de estos parámetros, se presentan las cinco series simuladas que se diferencian en utilizar o no coeficientes de macrodispersión, como se detalla en la Sección 4.2 y en la Tabla 4.2. Los resultados corresponden al valor adimensional del  $S_{xx}$  luego de ser dividido por su valor inicial, versus un tiempo adimensional que representa el número de escalas integrales que el soluto ha recorrido. Para cada serie graficada, se presenta el promedio de tres realizaciones, como se detalla en la Sección 4.2. Los resultados son presentados a continuación.

### 4.3.1. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

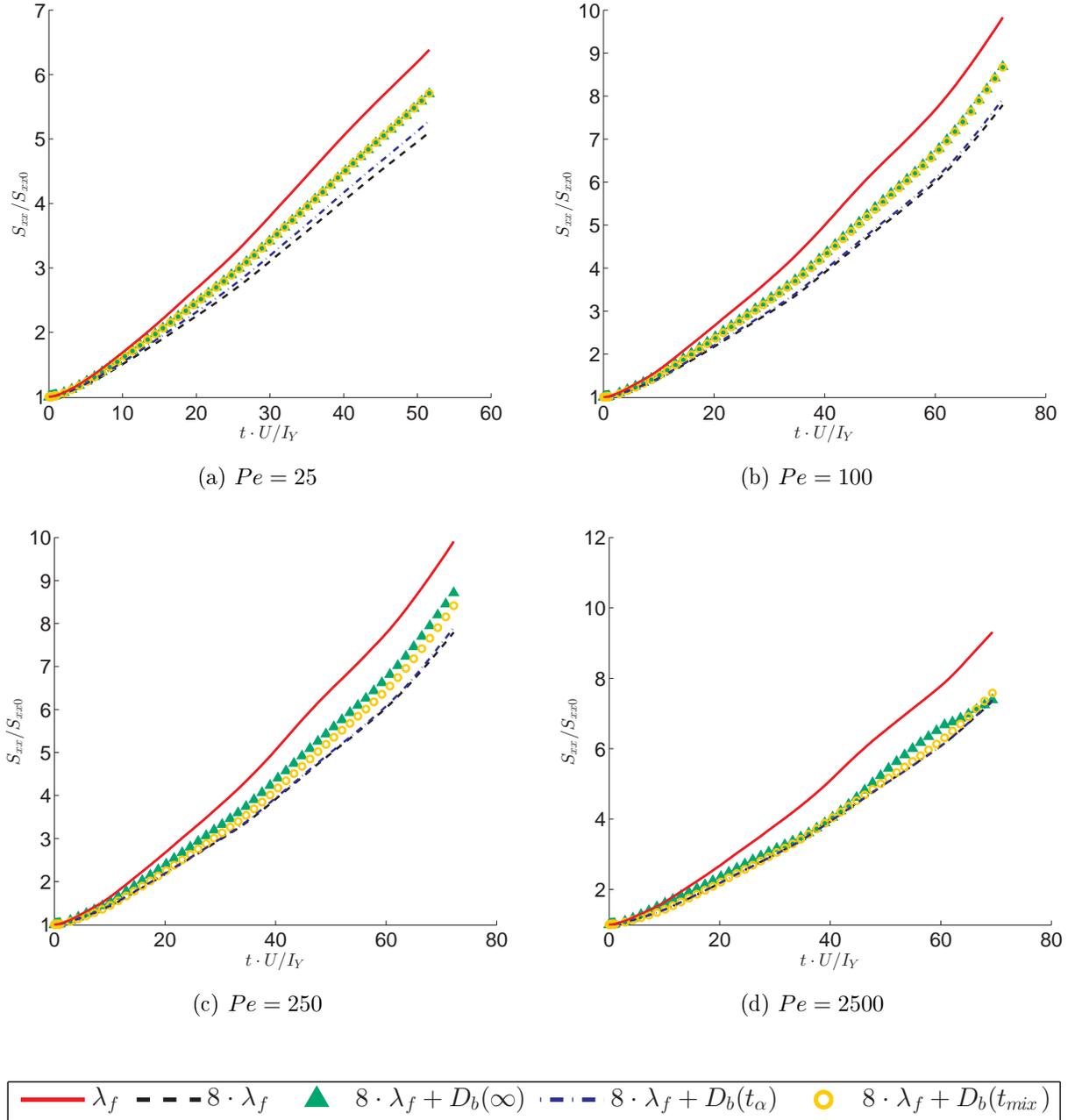


Figura 4.1: Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la varianza de la concentración del compuesto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

### 4.3.2. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

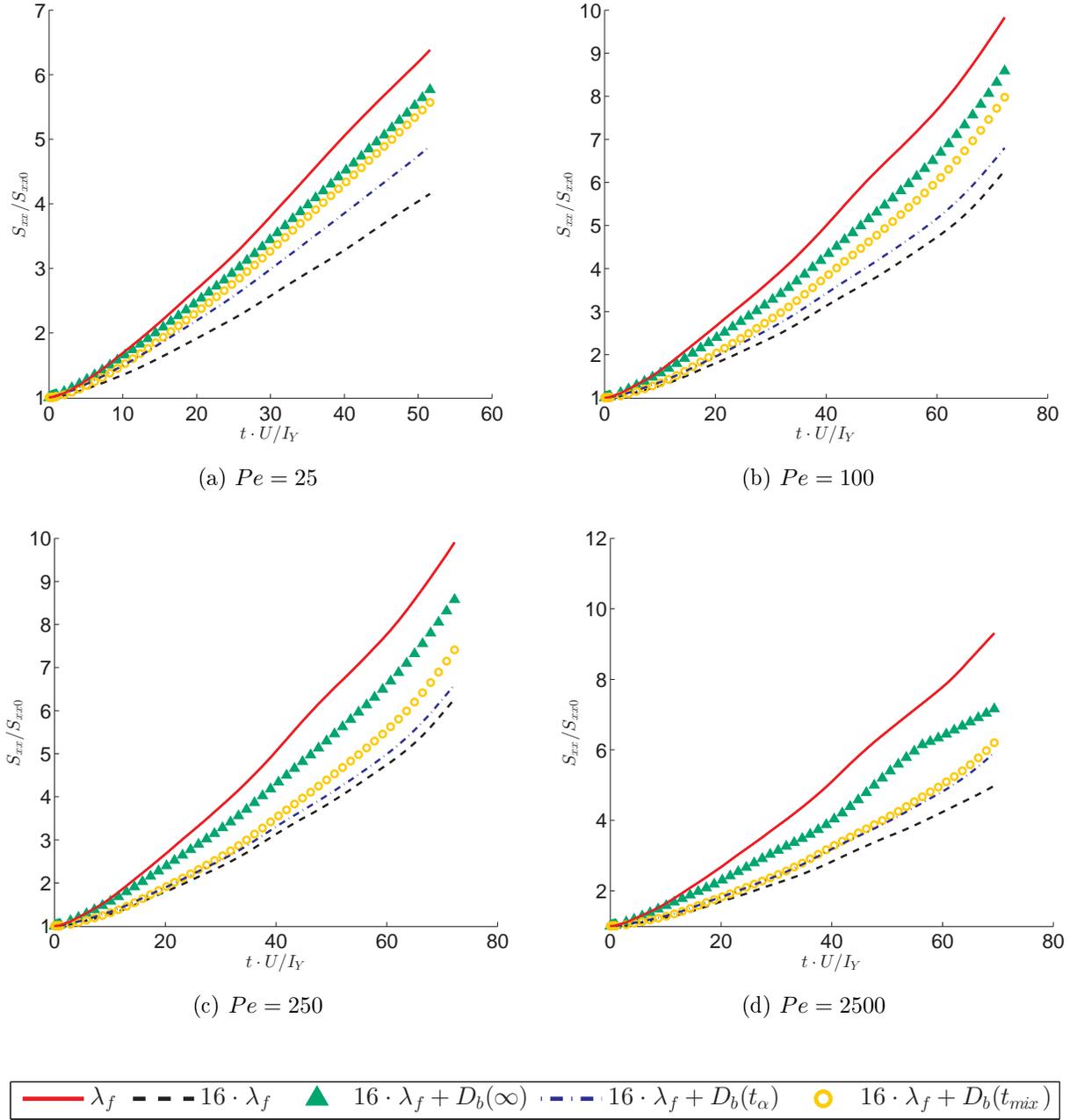


Figura 4.2: Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la varianza de la concentración del compuesto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

### 4.3.3. Momento espacial de segundo orden para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

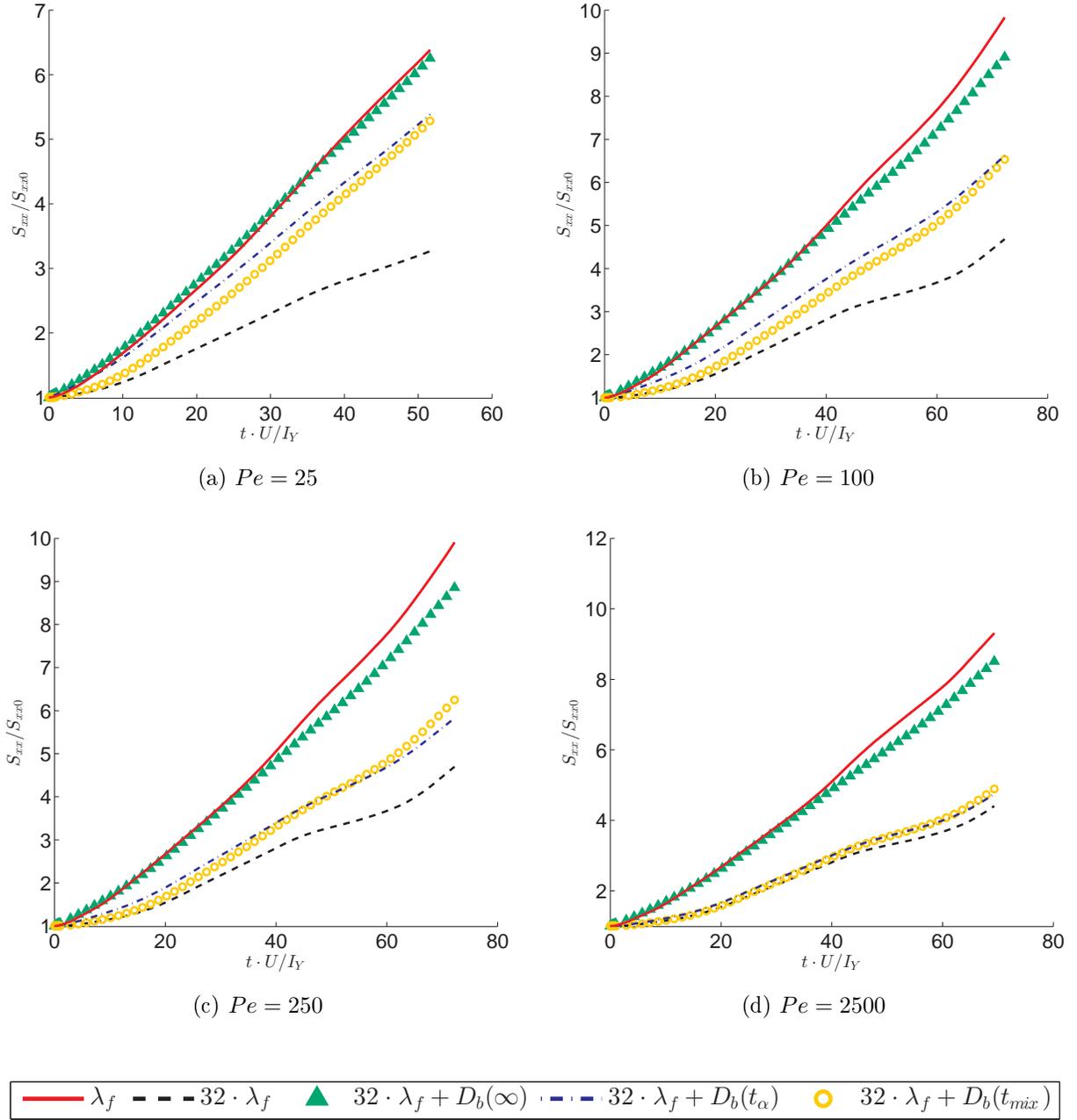


Figura 4.3: Resultados del momento espacial de segundo orden ponderado por la concentración, para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la varianza de la concentración del compuesto adimensionalizado por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

#### 4.3.4. Análisis y comentarios

Al considerar un CGV (C2) para estimar el momento espacial de segundo orden, se obtiene una solución alejada respecto a la obtenida con un CFV (C1), que es considerado la solución real. Esta diferencia aumenta al incrementarse el valor de  $\lambda_c$ . Además, a medida que el valor del número de Péclet aumenta, crece en magnitud el valor del momento espacial de segundo orden, independiente del caso o valor de  $\lambda_c$  analizado.

Al utilizar un CGV con el uso del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en el tiempo asintótico  $D^b(\infty)$  (C3), de la manera que plantea Rubin et al. (1999, 2003) y Rubin (2003) (ver Figura 2.5), se puede estimar relativamente bien la tasa de deformación de la pluma de soluto en el tiempo cuando se compara con el caso C1. Con lo anterior se logra reproducir como se dispersan los solutos a través del medio al utilizar un coeficiente de macrodispersión que cuente con los efectos no modelados, obteniéndose una buena estimación del momento espacial de segundo orden, como se puede apreciar en las Figuras 4.1, 4.2 y especialmente para la Figura 4.3, donde se obtienen los mejores resultados.

Para los resultados al considerar  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ , la mejora no es tan drástica como para  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  (ver Figuras 4.1 y 4.3), lo que concuerda con los resultados obtenidos en el capítulo anterior Sección 3.2, los que señalan que se obtienen mejores resultados al estimar la tasa de deformación de la pluma utilizando valores grandes de  $\lambda_c$  (i.e.,  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ , ver Figura 3.10, gráfico b). Además, de estos resultados, se puede corroborar que la utilización del coeficiente  $D_b(t)$  para la estimación de este parámetro, está limitado a heterogeneidades con valores de  $\sigma_Y^2 < 1$ , siendo consistentes los resultados de la Sección 3.2.

Respecto a los otros casos analizados, C4 y C5, éstos claramente subestiman la deformación de la pluma del sistema al compararlos con el caso C1, ya que consideran un menor valor del coeficiente de macrodispersión, pues están enfocados en caracterizar correctamente los procesos de mezcla, obteniéndose mayores diferencia cuando el número de Péclet es grande y cuando el valor de  $\lambda_c$  crece. Por lo tanto, no deben utilizarse para estimar la deformación del soluto, y en su lugar se recomienda utilizar la metodología del caso C3.

## 4.4. Resultados de la dilución y mezcla

En esta sección se presentan los resultados relativos a la dilución y la mezcla, como se procederá a explicar a continuación cada coeficiente utilizado en la estimación.

El índice de dilución ( $E$ ) (Kitanidis, 1994), coeficiente que representa el nivel de dilución y mezcla del cuerpo de solutos sobre un volumen dado, y es útil para distinguir entre los procesos de dispersión y dilución de solutos en el medio acuoso. Para más información, se sugiere revisar en detalle la Sección 2.4.2 y el trabajo de Kitanidis (1994). La disipación escalar, definida en la Sección 2.4.3 ( $SD$ ) representa el decaimiento de la varianza de la concentración y cuantifica la tasa de mezcla definida a través de los gradientes locales de concentración (Pope, 2000). Este coeficiente entrega información de la tasa de mezcla del sistema, y es ampliamente utilizado en la literatura, siendo comparable a la varianza de la concentración (definido en la Sección 2.4.4).

Para estos coeficiente, se evaluaron cuatro distintos valores del número de Péclet y tres tamaños de la discretización de la grilla gruesa de velocidades, parámetros presentados en la Tabla 4.1. En cada combinación de estos parámetros, se presentan las cinco series simuladas que se diferencian en utilizar o no coeficientes de macrodispersión, como se detalla en la Sección 4.2 y en la Tabla 4.2. Los resultados corresponden al valor adimensional del índice de dilución que fue dividido por su máximo valor posible, correspondiente al volumen total del dominio, graficado versus un tiempo adimensional que representa el número de escalas integrales que el soluto ha recorrido. Para cada serie graficada, se presenta el promedio de tres realizaciones, número que se justifica en la Sección 3.1.2.

#### 4.4.1. Índice de dilución para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

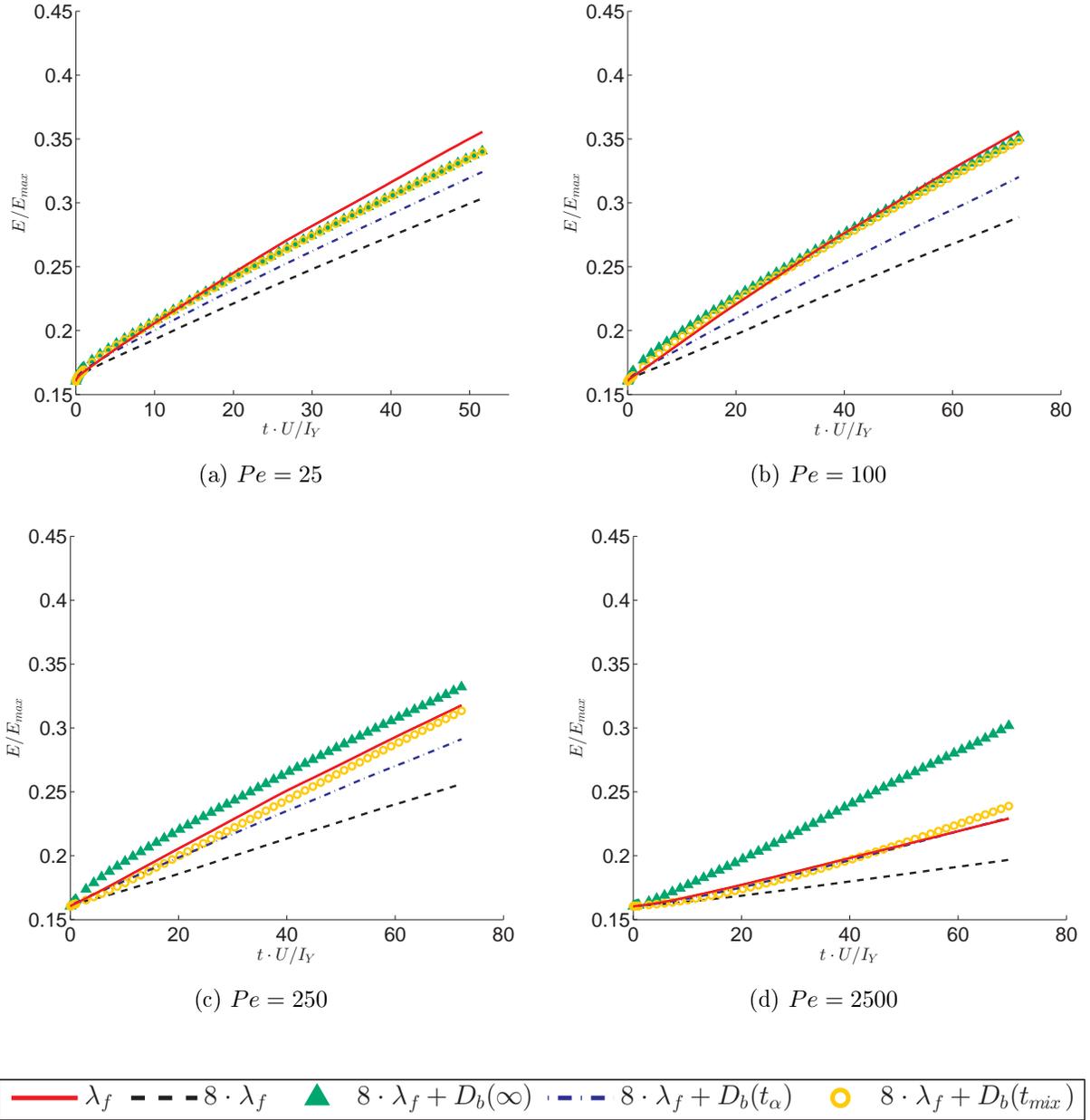


Figura 4.4: Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran el índice de dilución adimensionalizado por su valor máximo versus el tiempo adimensional.

#### 4.4.2. Índice de dilución para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

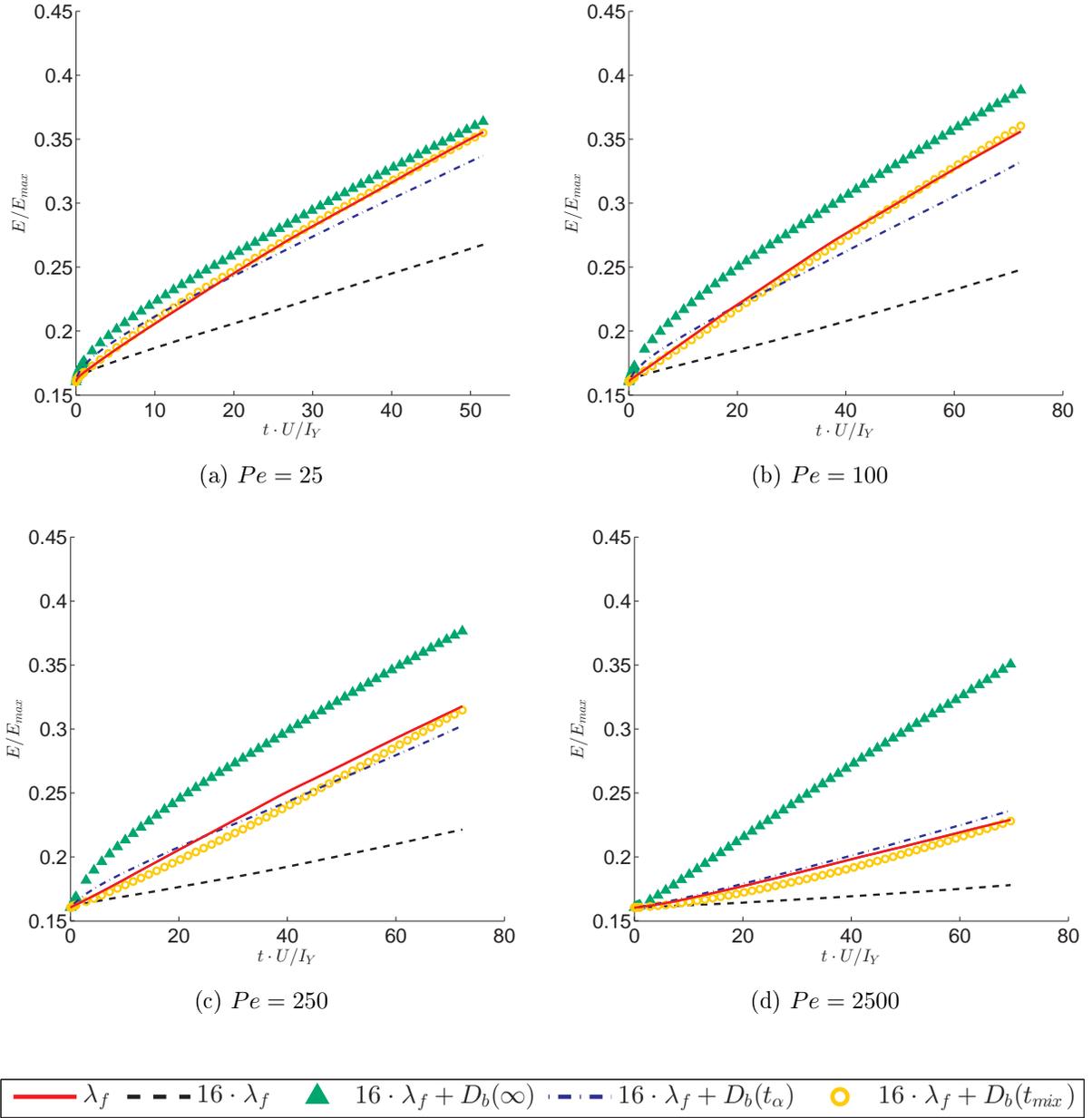


Figura 4.5: Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran el índice de dilución adimensionalizado por su valor máximo versus el tiempo adimensional.

### 4.4.3. Índice de dilución para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

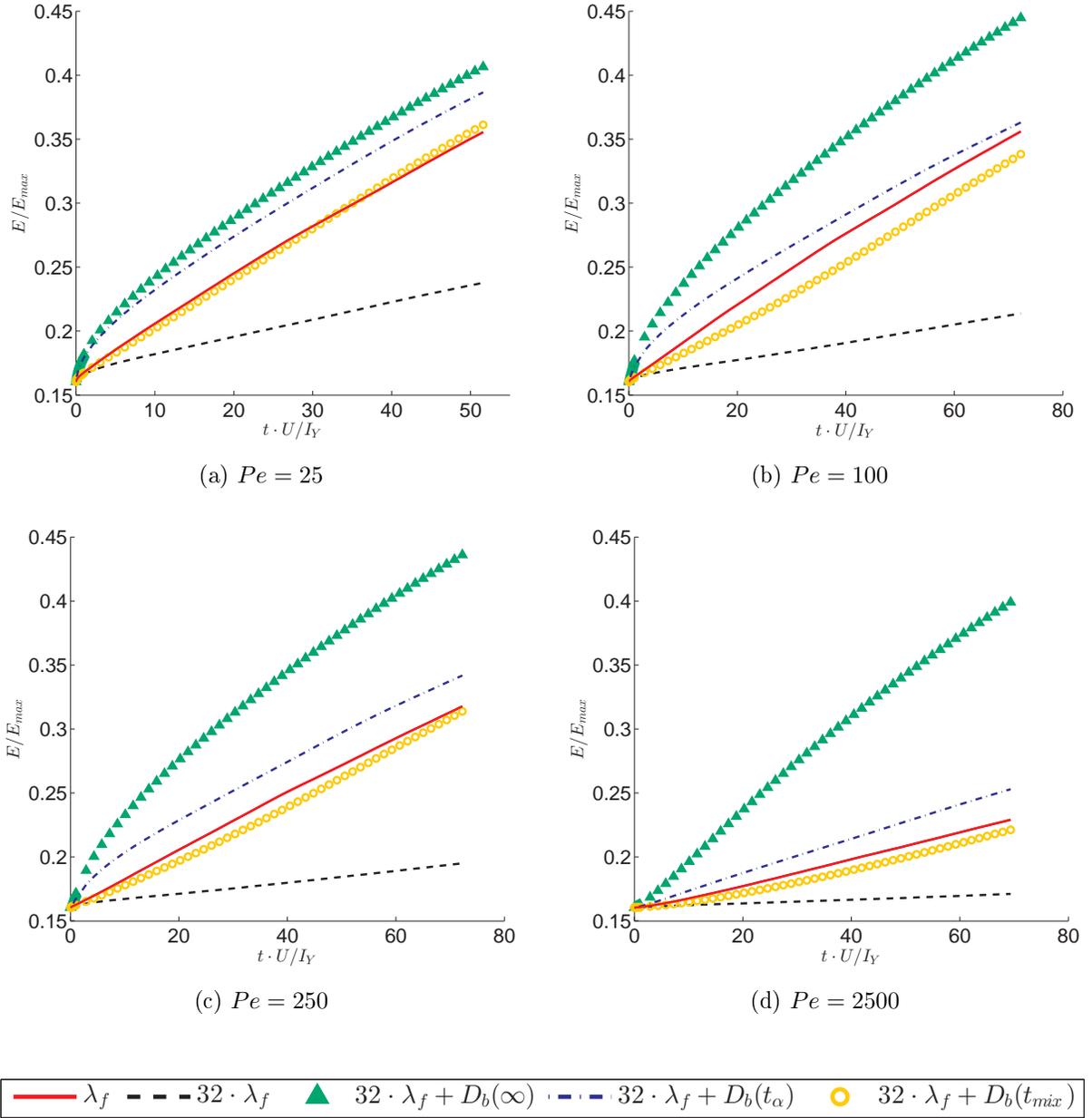


Figura 4.6: Resultados del índice de dilución para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran el índice de dilución adimensionalizado por su valor máximo versus el tiempo adimensional.

#### 4.4.4. Disipación escalar para $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

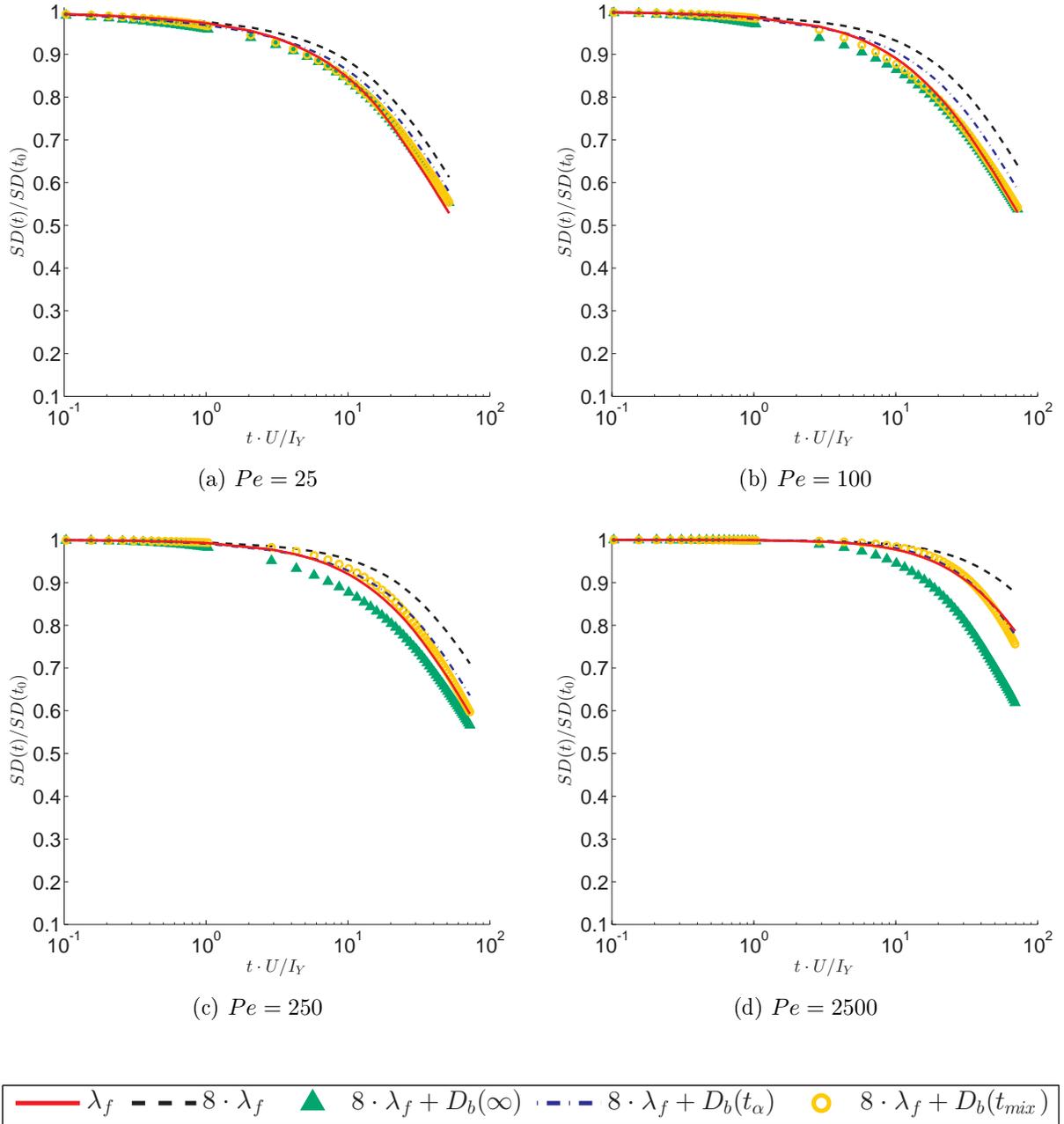


Figura 4.7: Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

#### 4.4.5. Disipación escalar para $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

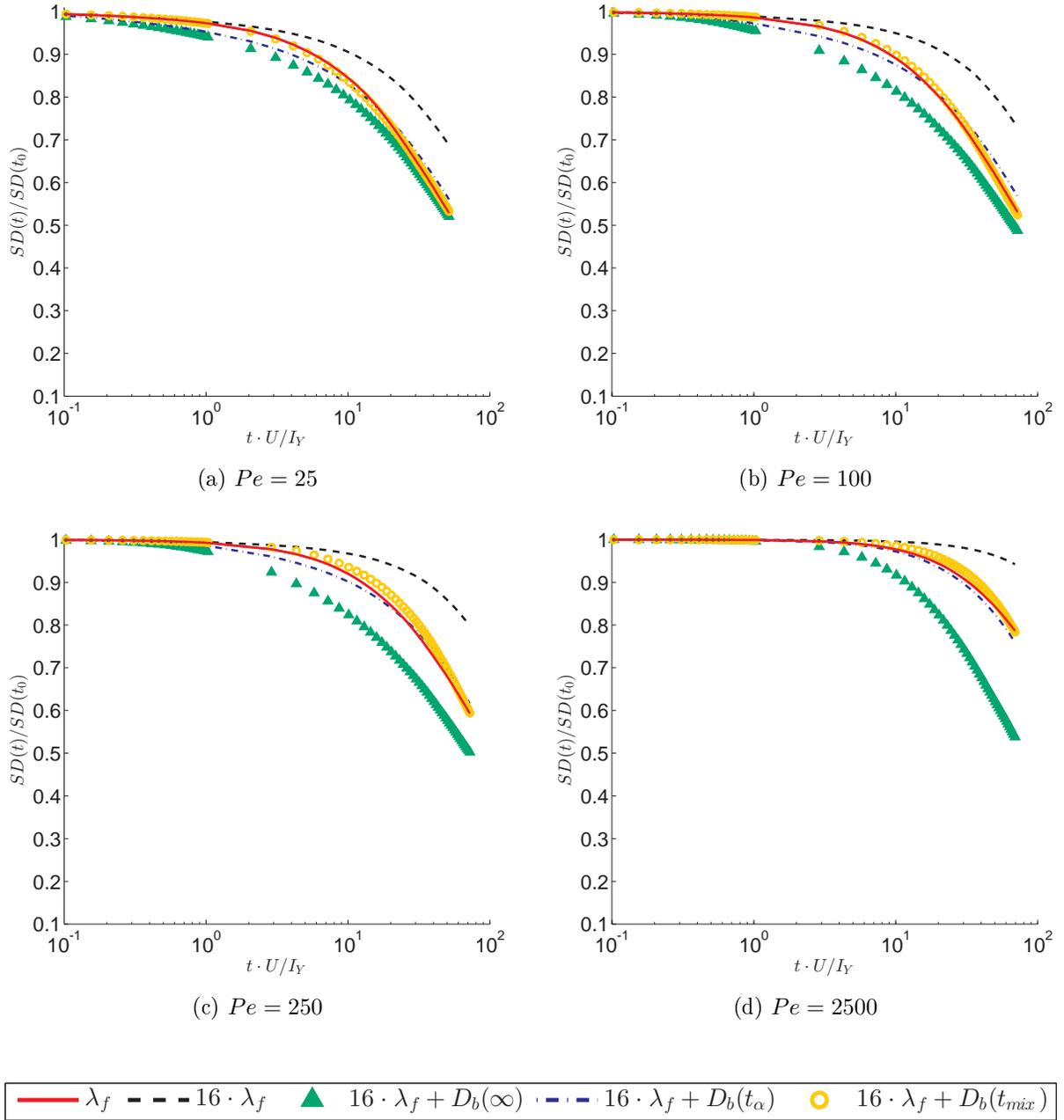


Figura 4.8: Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

#### 4.4.6. Disipación escalar para $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

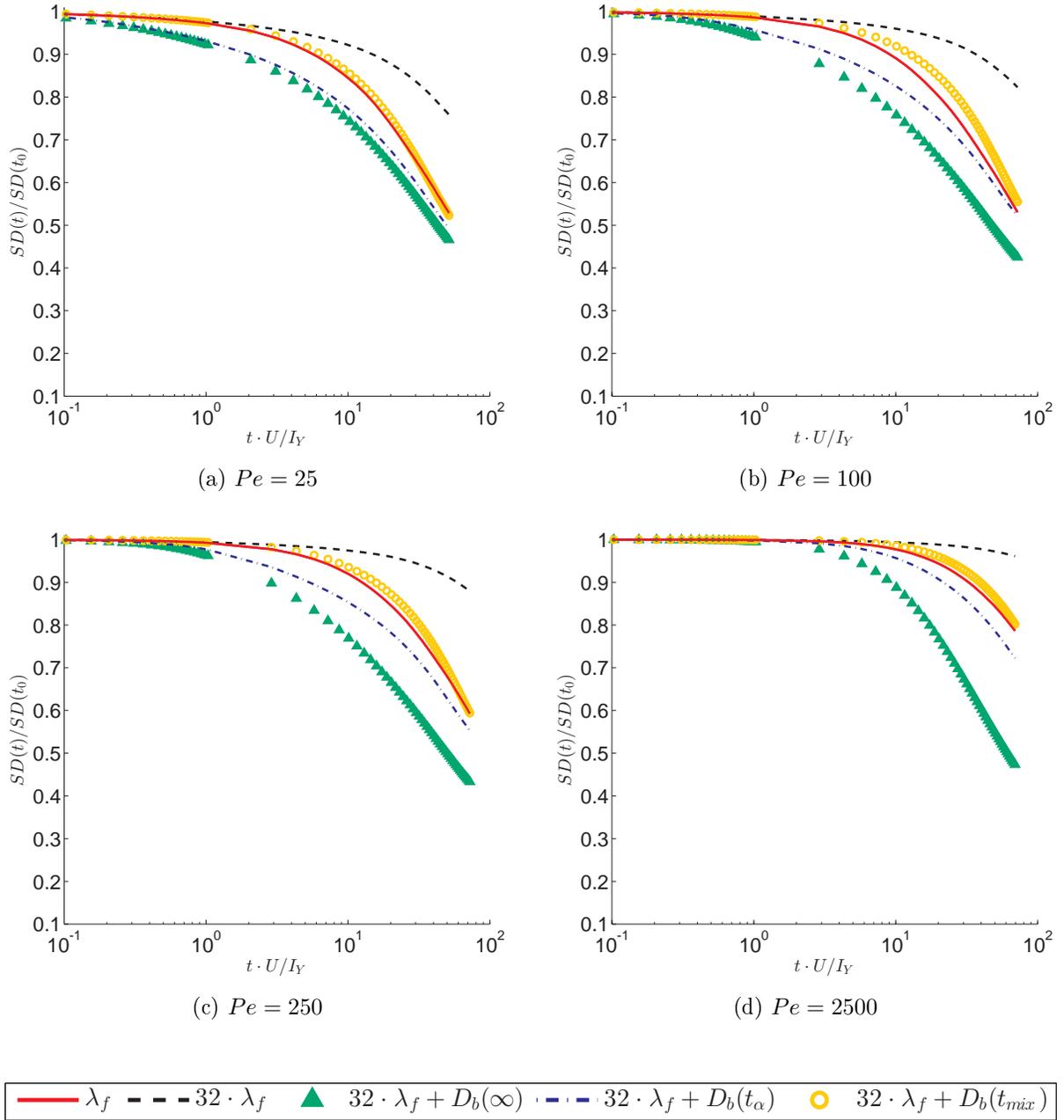


Figura 4.9: Resultados de la disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

#### 4.4.7. Análisis y comentarios

En esta sección se analizan los resultados del índice de dilución y de la disipación escalar, presentados en las Secciones 4.4. Es posible encontrar resultados adicionales referentes a los procesos de mezcla y dilución en el Anexo A.8 del documento, donde se incluyen resultados de coeficientes como es la tasa de variación de la disipación escalar en el tiempo y la función de densidad de probabilidad (probability density function, PDF) de la concentración del sistema, valor que representa la distribución de las concentraciones de las partículas, para dos tiempos adimensionales iguales a  $t \cdot U/I_Y = [35; 70]$ .

Según los resultados obtenidos, al utilizar una grilla gruesa de velocidades (C2), no se logra estimar correctamente los procesos del transporte que ocurren en los medios heterogéneos permeables, en comparación con una grilla fina de velocidades (C1), la cual contiene completamente la heterogeneidad del medio. Esto se evidencia con una subestimación de los coeficientes calculados para los procesos de mezcla, existiendo una marcada diferencia entre estos casos a medida que el valor de  $\lambda_c$  aumenta, por ejemplo entre las Figuras 4.4, 4.5 y 4.6, donde la diferencia en magnitud crece en la medida que  $\lambda_c$  aumenta. Por lo tanto, queda demostrado según los resultados obtenidos, que la solución depende fuertemente de la variabilidad del campo de velocidades, y si ésta logra ser capturada o no por la grilla numérica al momento de simular el transporte de solutos en medios porosos heterogéneos, pudiendo llevar a una estimación alejada a la considerada real.

En general, a medida que aumenta el valor del número de Péclet, los resultados obtenidos varían menos en magnitud respecto al estado inicial, lo que es apreciable por ejemplo en las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9. Además, para los valores altos del número de Péclet, que corresponde a un transporte principalmente advectivo, las curvas representativas de los procesos de mezcla, tienen pendientes más bajas a los casos donde la difusión domina, lo que se traduce en una menor tasa de mezcla global y dilución del soluto.

Al utilizar un CGV con la adición de un coeficiente de macrodispersión, se obtiene una mayor tasa de deformación de la pluma y una mayor cantidad de mezcla del soluto, lo cual se traduce en un aumento de la dilución de éste y un mayor volumen ocupado en comparación con el caso C2. Por lo tanto, la calidad de la estimación final, esta directamente relacionada con el enfoque utilizado para evaluar el coeficiente de macrodispersión efectivo de la mezcla, resultados que se presentan a continuación para cada caso restante.

Para el caso de utilizar un CGV incluyendo el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en el tiempo asintótico,  $D^b(\infty)$  (C3), de la manera que plantean Rubin et al. (1999, 2003) (ver Figura 2.5), es posible obtener resultados similares al caso base de comparación, para tiempos distantes desde el inicio (cuando  $t \cdot U/I_Y \approx 50$ ), para el caso de un transporte dominado por la difusión ( $Pe \leq 100$ ) y cuando el tamaño de la discretización del CGV se encuentra en el rango  $\lambda_c \leq 3,2 \cdot I_Y$ . Esto es posible de constatar en los resultados del índice de dilución en las Figuras 4.4a, 4.4b, 4.5a, 4.5b, y para la disipación escalar ver las Figuras 4.7a, 4.7b, 4.8b, 4.8b. Sin embargo, para los casos anteriores existe una sobrestimación de la dilución y mezcla para los tiempos iniciales de simulación, especialmente cuando los valores del número de Péclet y de  $\lambda_c$  se acercan a los límites enunciados anteriormente.

Para el resto de los casos simulados, existe una sobrestimación de los procesos de mezcla, diferencia que crece con el tiempo y es posible apreciar en las Figuras 4.5c, 4.5d, 4.6c, 4.6d correspondientes a resultados del índice de dilución, y en las Figuras 4.8c, 4.8d, 4.9c, 4.9d que corresponden a los resultados la disipación escalar. Esta diferencia crecen a medida que el valor del número de Péclet aumenta o el tamaño de  $\lambda_c$  crece.

Por otro lado, al utilizar el coeficiente  $D_b(t_\alpha)$  con un CGV (C4), es posible obtener, en la mayoría de los casos, resultados bastante cercanos al base del estudio conservativo. Esto es apreciable en las Figuras 4.4, 4.5 y 4.6, correspondientes al índice de dilución, y para la disipación escalar las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9, entre otros. De estas figuras es posible observar curvas cercanas al caso C4 en comparación al caso C1. Si bien, la estimación del resultado no es exacta para todos los tiempo de simulación, especialmente para los iniciales (pudiendo existir diferencias entre los casos analizados), la mejora obtenida en comparación al caso C2 o C3, es notoria. Pudiendo estimarse el coeficiente de macrodispersión que reproduce la mezcla fácilmente, a partir de los parámetros del problema siguiendo la metodología propuesta para este caso.

Es posible explicar la sobrestimación inicial de la mezcla al utilizar coeficientes de macrodispersión para el caso C3 y C4, debido a que se asigna un valor constante para todos los tiempos de simulación, generando mezcla excesiva al inicio de la simulación, y una subestimación de la tasa de mezcla posteriormente en algunos casos simulados. Por lo tanto, el problema asociado a un coeficiente de macrodispersión fijo, es la imposibilidad de recrear en su totalidad el estado de la mezcla del sistema, como es apreciable en las Figuras A.16 y A.17 para la tasa de disipación escalar, encontrados en el Anexo A.8.1. Resultados similares que refuerzan la idea, son encontrados en el Anexo A.8.2, presentándose la función de densidad de probabilidades de la concentración en las Figuras A.19d y A.20d. Los resultados para ambos coeficientes adicionales, son para las mismas condiciones simuladas que los coeficientes anteriormente descritos en esta sección.

Al utilizar el coeficiente  $D_b(t_{mix})$  correspondiente al caso C5, se logra estimar relativamente bien los procesos de mezcla. Este enfoque plantea que el tiempo donde se evalúa el  $D_b$  depende del tiempo de simulación y que, por lo tanto, evoluciona en magnitud con el aumento de éste. Al igual que los momentos espaciales de una pluma de solutos en el medio debido a la heterogeneidad del medio, siguiendo los supuestos de la teoría de la macrodispersión, se obtienen resultados similares en magnitud y comportamiento para los tiempos iniciales y posteriores de simulación, para una amplia cantidad de parámetros y condiciones de transporte, al compararse con respecto al caso base. Esto es apreciable en los resultados del índice de dilución (ver Figuras 4.4, 4.5 y 4.6), donde es posible representar la dilución del cuerpo de solutos. Para la estimación del estado de la mezcla actual del sistema, cuantificado por la disipación escalar (ver Figuras 4.7, 4.8 y 4.9) y la tasa de variación temporal de la disipación escalar (resultados en el Anexo A.8.1, ver Figura A.15, A.16 y A.17), se pudo estimar la evolución del sistema en el tiempo, capturando cómo varía la tasa de mezcla. Además, según los resultados de la *PDF* de la concentración (resultados en el Anexo A.8.2, ver Figura A.18, A.19 y A.20), se reprodujo los patrones de distribución, siendo apreciable en las figuras anteriores, que fue posible recrear cercanamente las magnitudes de la distribución de la concentración por intervalos en cada tiempo.

Además, para el caso C5, los resultados obtenidos a través de la estimación del método son bien aproximados para todo tiempo, respecto a los resultados considerados reales. Los factores  $f_m$  dependen de la cantidad de dispersión local; a mayor dispersión, menor es el valor de  $f_m$  estimado. Este valor es constante e independiente del tamaño de  $\lambda_c$  para los números de Péclet altos, cuando el transporte es principalmente advectivo. Respecto al caso difusivo, con los valores del número de Péclet menores, se puede apreciar una correlación con el tamaño de  $\lambda_c$  y el coeficiente  $D_L$ . Este coeficiente de macrodispersión efectivo reproduce cercanamente las magnitudes de los coeficientes evaluados en cada tiempo de simulación, para una amplia variedad de parámetros y condiciones del transporte conservativo, además de lograr reproducir las tasas de variación de los procesos de mezcla globales en la mayoría de los casos evaluados.

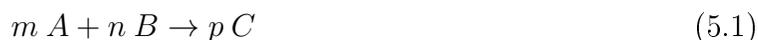
# Capítulo 5

## Transporte reactivo

### 5.1. Introducción

En esta sección se presentan los resultados correspondientes al transporte reactivo de solutos. Estos resultados son derivados a partir del transporte conservativo mediante el método utilizado por los autores Cirpka y Valocchi (2007), método que asume una reacción bimolecular instantánea e irreversible. La importancia de estudiar este caso es comprobar si los resultados del transporte conservativo son aplicables al caso reactivo, considerando que los mecanismos de mezcla son los mismos y pueden ser potenciados al incluir un coeficiente de macrodispersión efectivo.

Para el transporte reactivo, se simuló una reacción bimolecular instantánea e irreversible la cual tiene la siguiente forma:



donde  $A$  y  $B$  son compuestos con una concentración inicial dada y forman un producto  $C$  al reaccionar. Con  $m, n$  y  $p$  los coeficientes de estequiometría de la reacción. En este caso se cuantifica la producción promedio del compuesto  $C$ .

Para mayor información sobre el método, revisar el Anexo A.5.1 y el trabajo de los autores Cirpka y Valocchi (2007).

## 5.2. Definición de escenarios simulados

En este caso se simularon medios con heterogeneidad media a alta, con valores de  $\sigma_Y^2 = [1; 3; 6]$ . Para las heterogeneidades altas ( $\sigma_Y^2 = 3$  y  $6$ ) se evaluaron dos números de Péclet igual a 25 y 2500, con el fin de caracterizar el transporte puramente difusivo y advectivo, correspondientemente. Además, para campos de conductividad con un grado medio de heterogeneidad ( $\sigma_Y^2 = 1$ ), se agregaron los resultados para un número de Péclet igual a 100 y 250. Para estimar los resultados se calculó el promedio de tres realizaciones para cada caso, al igual que para el transporte conservativo. Además, cuando el valor del número de Péclet es igual a 25, se consideró un mayor número de partículas para representar al soluto en la simulación. En la Tabla 4.2 se presentan las series simuladas para cada grupo de parámetros.

También se calculó el número de Damköhler, que es un indicador de la velocidad de la reacción, definido como:

$$Da_d = \frac{\tau_d}{\tau_r} = \frac{k_r I_Y^2}{[A]_0 D_L} \quad (5.2)$$

donde  $\tau_d$  corresponde al tiempo característico de la difusión,  $\tau_r$  corresponde al tiempo característico de la reacción,  $k_r$  es la tasa de reacción y  $[A_0]$  es la concentración inicial del compuesto. Los resultados de este coeficiente son presentado en la Tabla 5.1 e indican que la reacción ocurre muy rápidamente, en comparación con la difusión del soluto.

Tabla 5.1: Valores del número de Damköhler ( $Da_d$ ), los valores indican que la reacción ocurre rápidamente.

$Pe$	$Da_d$
2500	5000
250	500
100	200
25	50

Los parámetros utilizados en las simulaciones están definidos en la Tabla 5.2 y los valores de los coeficientes de dispersión se encuentran en las Tablas 4.3 y 4.4.

Tabla 5.2: Parámetros utilizados en el transporte reactivo.

Parámetros	Unidad	Valor
<i>Conductividad Log(Y)</i>		
Varianza ( $\sigma_Y^2$ )	-	1; 3; 6
Escala integral ( $I_Y$ )	$m$	0,5
<i>Definición del dominio base</i>		
Largo dominio ( $L_x$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo dominio ( $L_y$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo celda cuadrada ( $\lambda_f$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
Nº de celdas horizontales	-	1024
Nº de celdas transversales	-	1024
<i>Campo de velocidades</i>		
Grad. hidráulico	-	0,1
Velocidad media ( $U$ )	$m/s$	0,258
<i>Parámetros grilla gruesa</i>		
Largo celda cuadrada ( $\lambda_c$ )	$m$	$1,6 \cdot I_Y$ ; $3,2 \cdot I_Y$ ; $6,4 \cdot I_Y$
<i>Parámetros del soluto</i>		
Concentración inicial de A	$mg/l$	1
Concentración inicial de B	$mg/l$	1
Tasa de reacción $k_r$	$mg/l/s$	1
<i>Parámetros de Transporte</i>		
Número de Péclet ( $Pe$ )	-	25; 250*; 100* ; 2500 (* solo para $\sigma_Y^2 = 1$ )
Nº de partículas ( $SPH$ )	-	968000; 1317600 (solo para $Pe=25$ )
Largo de suavizado del método SPH ( $SL$ )	$m$	0,1
Largo vertical pluma de solutos	$m$	$90 \cdot I_Y$
Largo horizontal pluma de solutos	$m$	$16 \cdot I_Y$

### 5.3. Resultados del transporte reactivo

Los resultados obtenidos se presentan a continuación y están agrupados según el grado de heterogeneidad del medio; para un grado bajo a medio de heterogeneidad corresponde un valor de  $\sigma_Y^2 = 1$ , para un grado alto de heterogeneidad corresponden los valores de  $\sigma_Y^2 = [3; 6]$ .

### 5.3.1. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

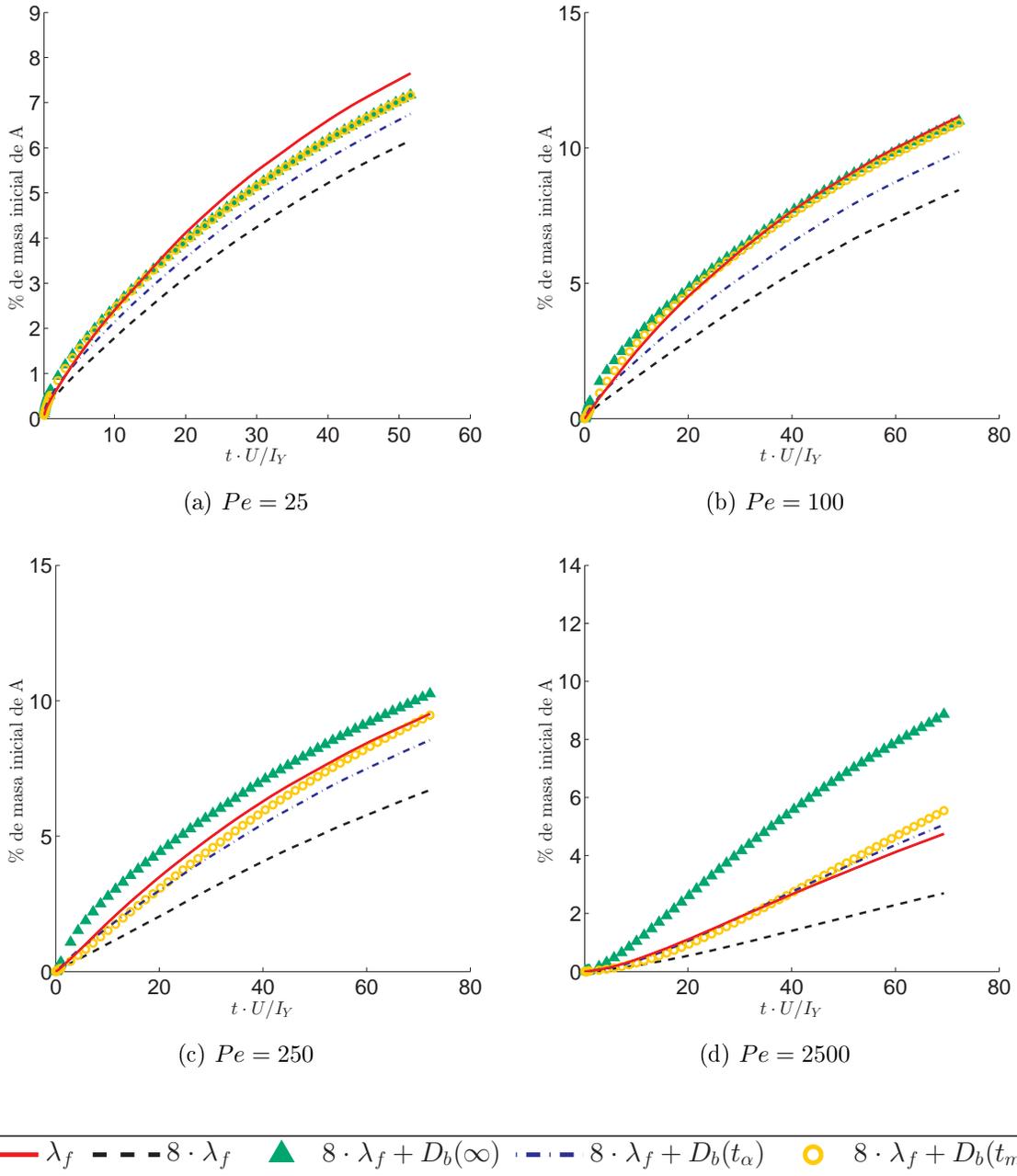


Figura 5.1: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con  $\sigma_Y^2 = 1$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.2. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

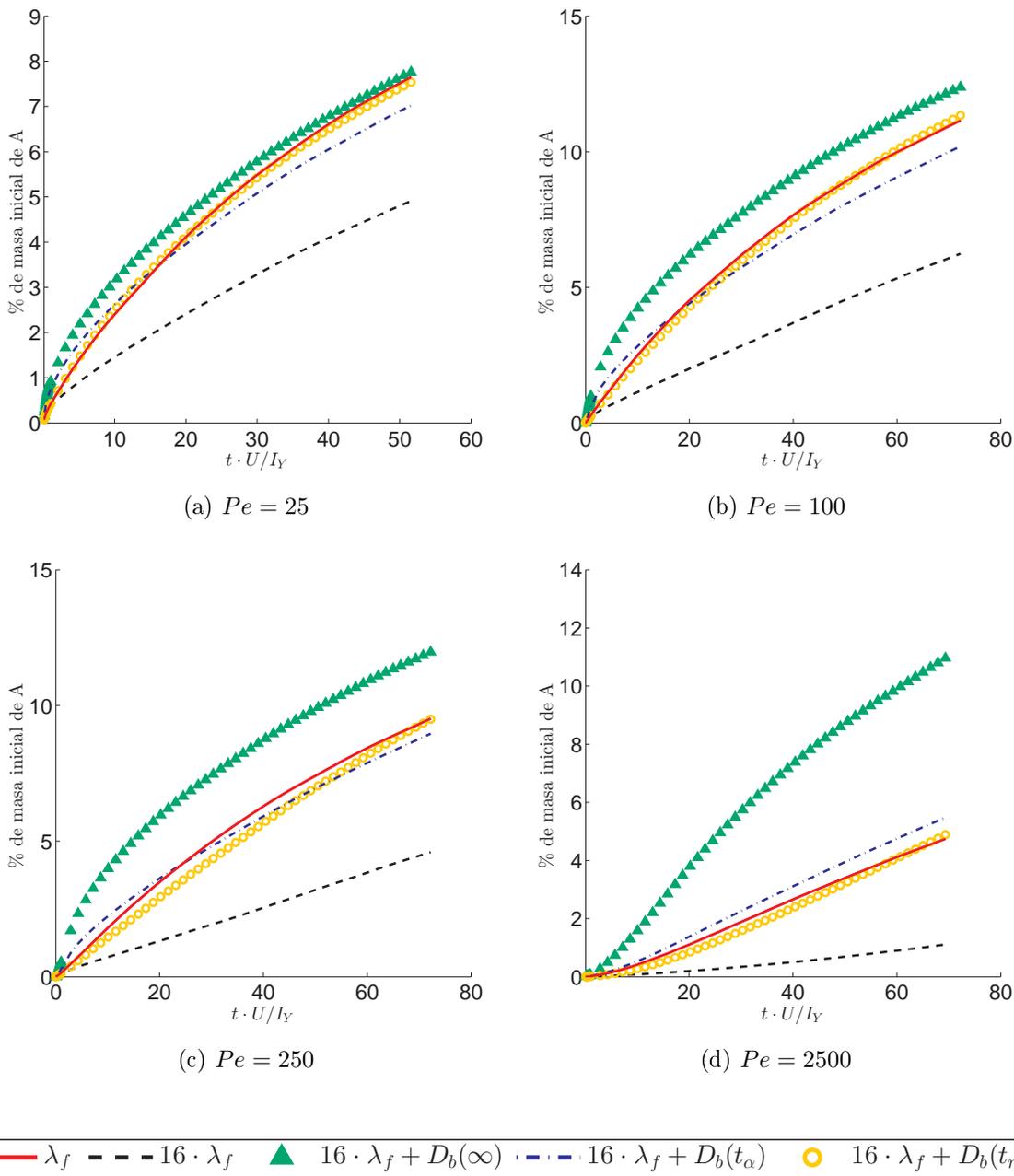


Figura 5.2: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con  $\sigma_Y^2 = 1$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.3. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 = 1$ y $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

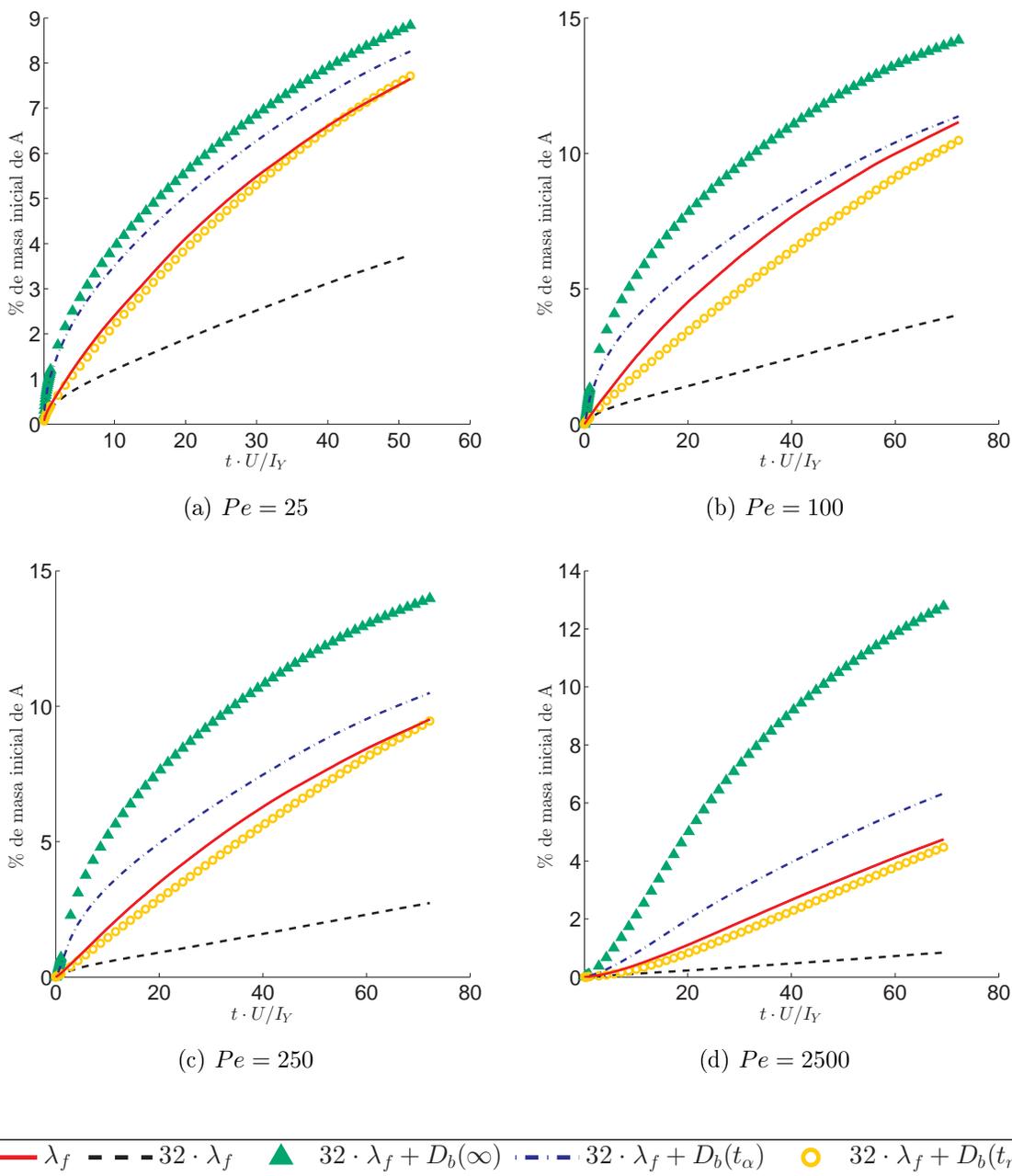


Figura 5.3: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando un medio con  $\sigma_Y^2 = 1$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.4. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f$

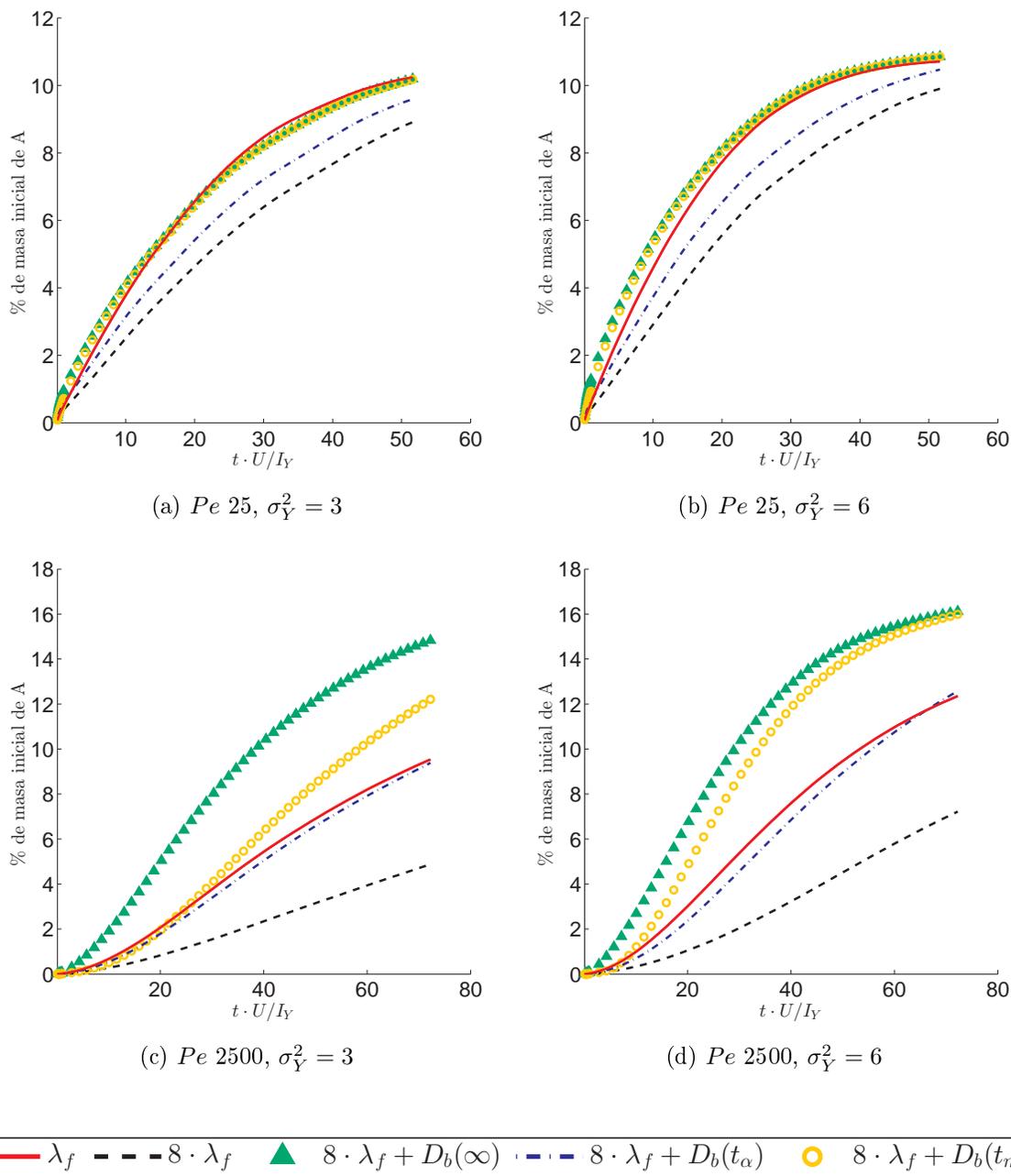


Figura 5.4: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con  $\sigma_Y^2 = (3; 6)$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.5. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f$

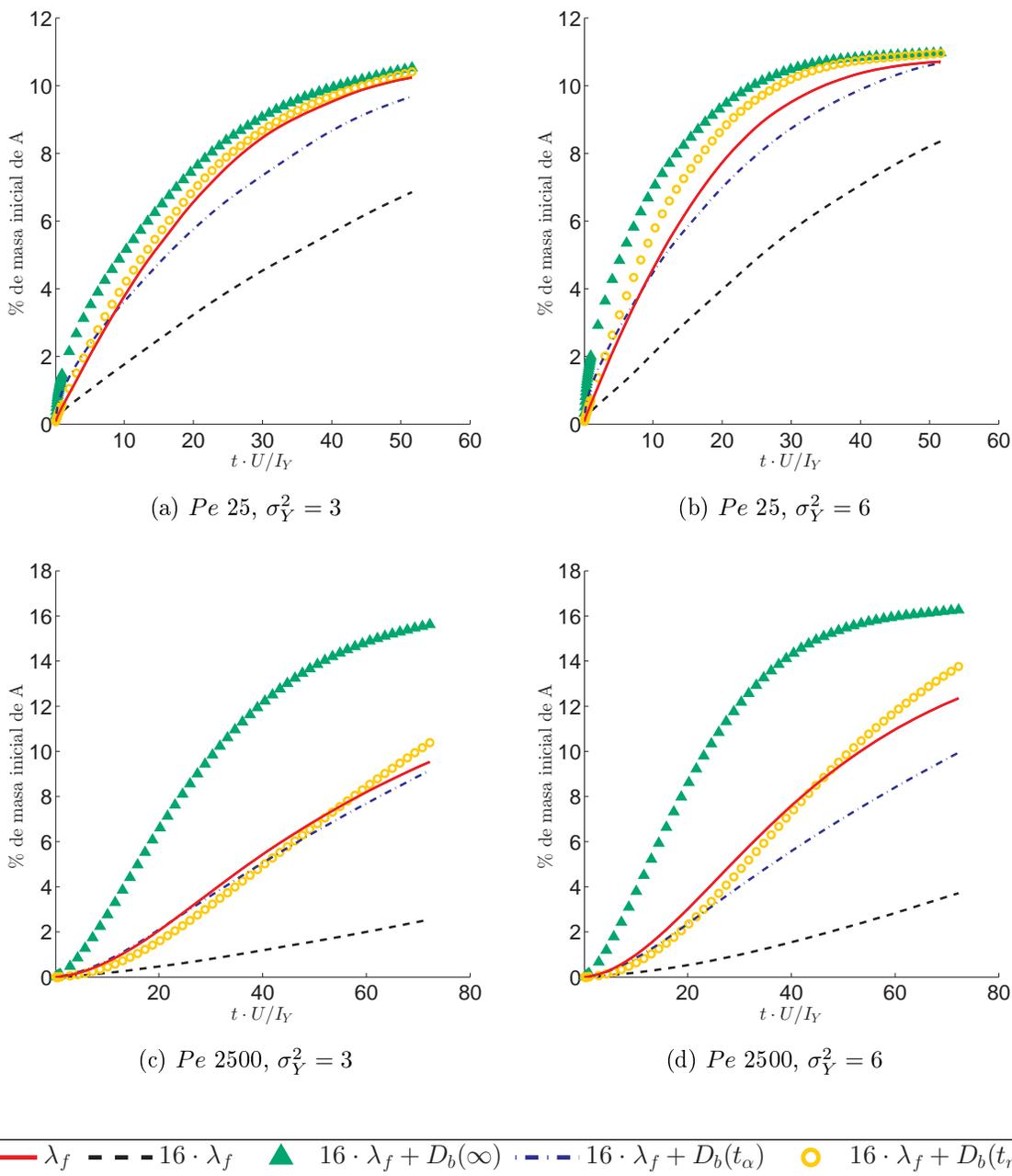


Figura 5.5: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con  $\sigma_Y^2 = (3; 6)$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.6. Producción de compuestos para $\sigma_Y^2 \geq 3$ y $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f$

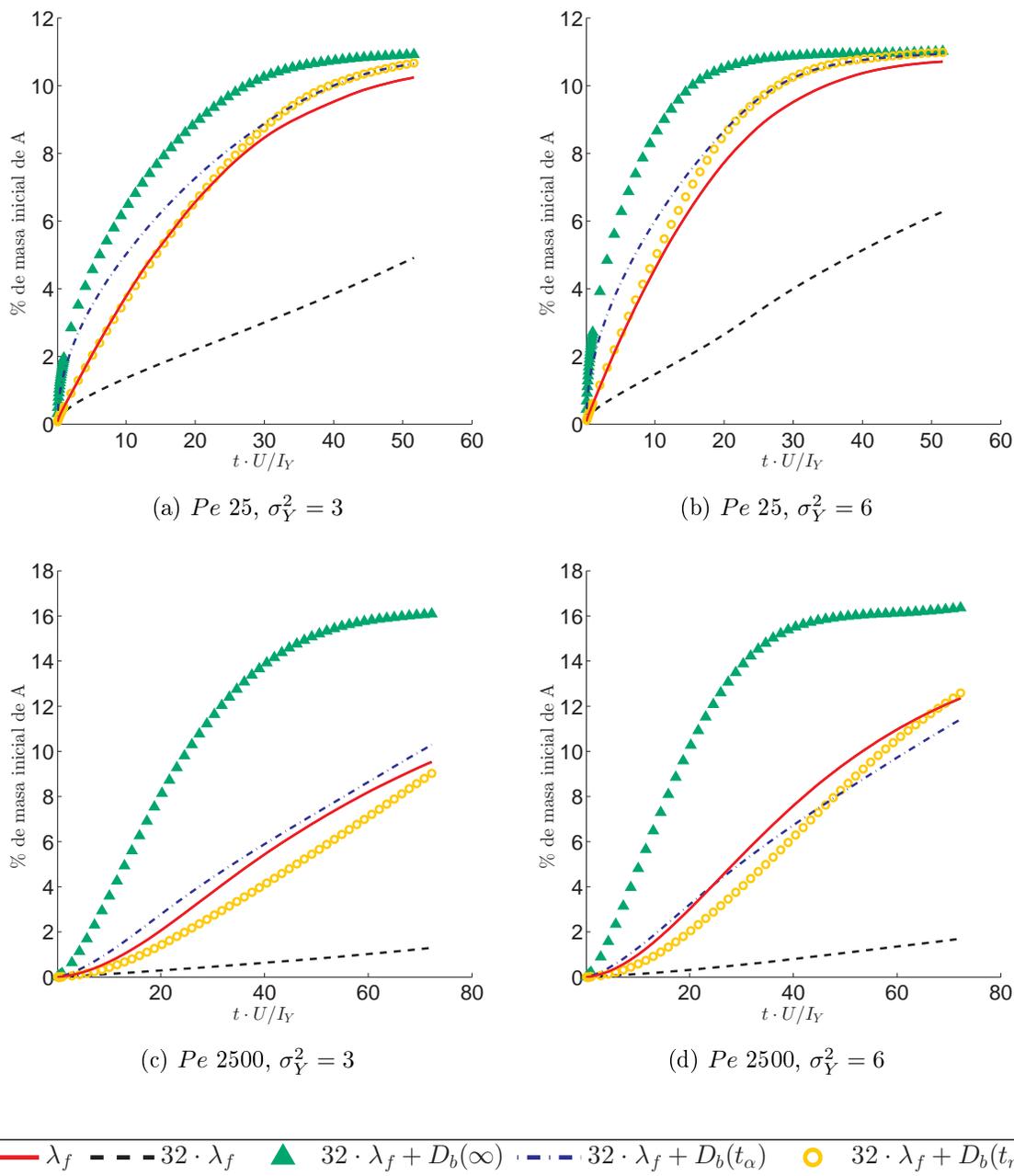


Figura 5.6: Resultados de la producción de compuesto para el promedio de 3 realizaciones del transporte reactivo, considerando medios con  $\sigma_Y^2 = (3; 6)$  para diferentes valores de  $Pe = (25; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las figuras muestran la producción de masa del compuesto  $C$  como un porcentaje de la masa inicial de  $A$ , para una reacción bimolecular rápida e irreversible versus el tiempo adimensional.

### 5.3.7. Análisis y comentarios

Al comparar los resultados obtenidos para el transporte reactivo, considerando un medio con una heterogeneidad baja (resultados encontrados en las Figuras 5.1, 5.2 y 5.3), y comparándolos con respecto a un medio que presenta una alta heterogeneidad (como se aprecia en las Figuras 5.4, 5.5 y 5.6), es posible notar que las tasas de mezcla son superiores para estas últimas, obteniéndose una mayor producción de compuestos en un menor tiempo. Este comportamiento es apreciable al comparar los resultados correspondientes al caso C1, encontrándose que las diferencias de la producción de compuestos aumentan al crecer la heterogeneidad y al disminuir el número de Peclet. Esto debido al aumento de la heterogeneidad del medio que repercute directamente en las tasas de mezcla al haber una mayor tasa de deformación de la pluma de solutos.

De estos resultados es posible apreciar que las diferencias entre los casos C1 y C2 son notorias cuando la heterogeneidad del medio es mayor, las que se ven incrementadas al aumentar el valor del número de Péclet. Por ejemplo, para los resultados de las Figuras 5.6b y 5.6d, existen grandes diferencias entre la producción de compuestos, especialmente para los tiempos mayores de la simulación (alrededor de 70 escalas integrales recorridas). Según lo anterior, al filtrar los campos de velocidades para medios que presentan un grado medio a alto de heterogeneidad, los resultados obtenidos de la estimación de los procesos de mezcla quedan muy subestimados, debido a que la homogeneización del medio destruye los canales preferenciales de flujo, los cuales potencian las tasas de mezcla (Bolster et al., 2011a). Por lo tanto, no es recomendado utilizar un CGV para estimar la mezcla y reacciones, ya que los resultados obtenidos serán distintos de los reales.

Al analizar los resultados, se encontró que para el caso C3 se estima correctamente la producción de compuestos para un número limitado de realizaciones. Para  $\sigma_Y^2 = 1$  la producción es estimada correctamente cuando  $Pe \leq 100$  y  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ , y para  $Pe = 25$  cuando  $\lambda_c = 16 \cdot \lambda_f = 3,2 \cdot I_Y$ . Para heterogeneidades altas, este caso funciona relativamente bien para  $Pe = 25$  y cuando  $\lambda_c \leq 3,2 \cdot I_Y$ , excepto para  $\sigma_Y^2 = 6$ . Sin embargo, para el resto de los casos, la mezcla queda sobrestimada, conduciendo a un resultado errado. Si bien, la producción de compuestos llega más rápidamente al equilibrio cuando el número de Péclet es pequeño ( $Pe = 25$ ), se sobrestima la mezcla para los tiempos iniciales y anteriores al estado de equilibrio del sistema (ver Figura 5.6a y 5.6b), siendo la solución obtenida para los tiempos largos de simulación bastante cercana al caso C1. Sin embargo, esta solución se considera imprecisa debido a que no se ajustan las curvas correctamente para todos los tiempos de simulación. Para las simulaciones donde la advección domina ( $Pe = 2500$ ), se sobrestima la mezcla para todas las combinaciones de parámetros y grados de heterogeneidad analizados.

Para los casos C4 y C5, la metodología para estimar el coeficiente de macrodispersión  $D_b$  que reproduce correctamente la mezcla, fue desarrollada para valores de  $\sigma_Y^2 \leq 1$ . Más aún, se utilizaron los mismos valores de  $f_m$  obtenidos para  $\sigma_Y^2 = 1$ , al estimar la mezcla cuando  $\sigma_Y^2 = 3$  y 6, asumiendo que al calcular los valores del coeficiente  $D_b$ , se está agregando el efecto de la heterogeneidad, ya que  $\sigma_Y^2$  es una variable en la estimación de este coeficiente (en el Anexo A.4, ver ecuación (A.19), relacionada a la componente longitudinal del  $D_b$ ). Por lo tanto, fue empleada la misma metodología para la estimación de la producción de

compuestos cuando el grado de heterogeneidad es mayor, obteniéndose resultados cercanos en la estimación, siendo analizados cada caso por separado a continuación.

Al evaluar el caso C4 para el transporte reactivo, al igual como ocurre con el caso conservativo, se logra estimar correctamente la mezcla para una amplia cantidad de parámetros y condiciones de transporte. Si bien, para  $\sigma_Y^2 = 1$  la solución no es exacta en magnitud, ésta es una buena estimación de la mezcla del sistema en la mayoría de los casos, al compararla respecto a los casos C2 y C3, como es apreciable en la Figura 5.2d. Cuando el valor de  $\sigma_Y^2 \geq 1$ , la solución obtenida es bastante cercana en magnitud al caso base, salvo en algunos casos donde existen mayores diferencias (ver Figura 5.5d). Al igual que para un grado de heterogeneidad menor, la solución obtenida no es exacta para todos los tiempos, sin embargo es bastante cercana a la solución esperada. Si bien, no se logra representar fidedignamente la producción para cada tiempo, encontrándose diferencias respecto a la solución real, como estimación, y dada la simplicidad de implementación y cálculo, la solución obtenida con esta metodología es una clara mejora a la estimación de la mezcla cuando se utiliza un CGV para modelar un medio con una alta variabilidad y desorden espacial.

De manera similar, al evaluar el caso C5 y compararlo respecto a los resultados del caso C1, se obtienen los resultados más cercanos cuando  $\sigma_Y^2 = 1$  (ver Figuras 5.1, 5.2 y 5.3), pudiendo estimar correctamente la producción de compuesto para la gran mayoría de las simulaciones realizadas para una amplia cantidad de parámetros y condiciones del transporte. Más aún, es posible recrear la producción de compuestos en los primeros tiempos de simulación y posteriores, a diferencia de los otros casos que en general sobrestiman los valores de producción inicial, especialmente cuando  $\lambda_c = 32 \cdot \lambda_f = 6,4 \cdot I_Y$ .

Para heterogeneidades mayores (cuando  $\sigma_Y^2 \geq 1$ ), al utilizar los valores de  $f_m$  estimados para  $\sigma_Y^2 = 1$ , se logró reproducir correctamente la producción de compuestos en una gran cantidad de simulaciones. La solución obtenida con  $Pe = 25$  es bastante precisa para todos los casos simulados, sin embargo cuando  $Pe = 2500$  se obtienen resultados alejados para tiempos distantes del inicio, especialmente cuando  $\lambda_c = 8 \cdot \lambda_f = 1,6 \cdot I_Y$ , encontrándose las mayores diferencias de producción para tiempos largos de simulación, como es apreciable en las Figuras 5.4c y 5.4d, donde el sistema evoluciona rápidamente incrementando la producción lo que genera errores en la estimación. Para el resto de los casos, la estimación es acertada, logrando reproducir correctamente las tasa global de mezcla para los primeros pasos temporales a diferencia del caso C4. Al comparar en general los resultados del caso C4 respecto al C5, este último logra reproducir la mezcla para los primeros tiempos de simulación, quedando mejor caracterizados con esta metodología en la gran mayoría de las simulaciones realizadas, encontrándose series de resultados con mínimas diferencias en la estimación de la mezcla considerando distintos tiempos de simulación (ver las Figuras 5.5a, 5.5c, 5.6a y 5.6b entre algunos resultados).

Si bien, este caso está basado en la estimación del factor  $f_m$  que asume un menor grado de heterogeneidad, fue posible obtener resultados satisfactorios al momento de emplearlos con valores mayores de  $\sigma_Y^2$ . Cabe señalar que la teoría del “coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo” de Rubin et al. (1999) es válida cuando  $\sigma_Y^2 < 1$  para la estimación de los momentos espaciales del soluto, debido a que está basada en el método de las perturbaciones (Dagan, 1989), la cual asume que los términos de mayor orden (i.e., al cuadrado de la varianza

de  $\ln(K)$  o mayores) son despreciados, al asumir que  $\sigma_Y^2 < 1$ . Según los resultados obtenidos, es posible reproducir la mezcla utilizando las metodologías propuestas, permitiendo obtener resultados similares al caso base del estudio para una amplia cantidad de condiciones de transporte y parámetros del problema. Lo atractivo en este caso, es la posibilidad de utilizar la misma metodología para evaluar campos altamente heterogéneos, obteniéndose resultados que mejoran la estimación tradicional, que ignora el efecto de la heterogeneidad de la escala inferior de la grilla de velocidades.

# Capítulo 6

## Conclusiones y recomendaciones

### 6.1. Conclusiones

En esta tesis se presentó exitosamente un nuevo enfoque para simulaciones numéricas en medios heterogéneos permeables para la resolución del transporte conservativo y reactivo de solutos, obteniéndose las conclusiones descritas a continuación.

Se logró extender el uso del “coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo” a procesos de mezcla para el transporte conservativo y reactivo de solutos en medios heterogéneos porosos permeables, cumpliéndose el objetivo principal planteado para esta tesis. Utilizando el software *NAPA* (Herrera et al., 2009), modelo numérico basado en el enfoque Lagrangiano de partículas, el cual emplea los métodos numéricos *Smoothed Particles Hydrodynamics* y *Random Walk Particle Tracking*, se puede reproducir los resultados encontrados en la literatura correctamente (Dagan, 1989; Rubin et al., 1999; Rubin, 2003), validando el modelo numérico.

De los resultados obtenidos, queda demostrado que al momento de utilizar una grilla numérica de velocidades que no captura completamente la heterogeneidad del medio, se obtiene un resultado impreciso, subestimándose los procesos de mezcla, dilución y la tasa a la cual la pluma de solutos se deforma.

Se observó que utilizando una grilla gruesa de velocidades y adicionando un coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo evaluado en el tiempo asintótico ( $D_b(\infty)$ ), tal como se indica en la literatura, es posible reproducir los momentos espaciales de una pluma de solutos que es ergódica, cuando el grado de heterogeneidad del medio poroso es baja a media ( $\sigma_Y^2 \leq 1$ ). Sin embargo, bajo estas mismas condiciones solo fue posible reproducir la mezcla cuando el transporte es principalmente difusivo ( $Pe \leq 100$ ) y el tamaño de la discretización de la grilla numérica no es lo suficientemente grande como para afectar de forma significativa la representatividad del modelo ( $\lambda_c \leq 16 \cdot \lambda_f$ ). Para el resto de los casos estudiados, se sobrestiman los procesos de mezcla, obteniéndose una solución errada del problema.

Utilizando los coeficientes de macrodispersión efectivos para la mezcla, mediante las correcciones temporales propuestas, se logró representar correctamente la tasa global de mezcla, aún cuando el campo de velocidades no captura completamente la heterogeneidad del medio, inclusive en los casos donde el coeficiente de macrodispersión fue evaluado en su valor asintótico, sobrestimando las tasas de mezcla respecto a la solución real. Con estos enfoques propuestos, es posible obtener magnitudes similares de los coeficientes e índices utilizados en las comparaciones, respecto a los obtenidos en el caso considerado real. Se logró reproducir el estado de la mezcla para distintas condiciones de transporte y parámetros del problema evaluado ( $\sigma_Y^2 = 0,2$  a  $6$ ,  $Pe = 25$  a  $2500$ ,  $\lambda_c = [8; 16; 32] \cdot \lambda_f$ , entre otros valores de los parámetros estudiados), presentando resultados no explorados a la fecha por la literatura, los cuales representan un gran avance en la estimación de la mezcla de solutos en medios altamente heterogéneos, explorando nuevos focos de investigación. Esta corrección se logra evaluando el coeficiente de macrodispersión en un tiempo característico de los procesos de mezcla, siendo posible estimarlo utilizando un escalamiento temporal en base a parámetros estadísticos del medio, de la pluma y del flujo, o a partir de un coeficiente de macrodispersión  $D_b$  que depende del tiempo de simulación actual y de los parámetros que definen el transporte.

La principal ventaja de los enfoques propuestos, en particular, del que depende del tiempo de simulación, es la posibilidad de reproducir el estado de la mezcla global para diversas condiciones de transporte, aún cuando no se cuenta con toda la información para describir el medio heterogéneo cabalmente, siempre y cuando sean conocidos los parámetros que lo describen estadísticamente. Por lo tanto, la adición de  $D_b$  evaluado en el tiempo de mezcla permite obtener resultados favorables, aún cuando se utilizan celdas que son  $32^2$  veces mayores a la discretización de la solución base, como fue probado en esta tesis, sin descartar la utilización y funcionamiento para valores de celda mayores.

En la práctica, las limitaciones de la metodología propuesta están asociada a distintos factores como son, por ejemplo, los datos de terreno, los cuales pueden ser insuficientes en número o contar con errores asociados a la medición, lo que puede ocasionar problemas para caracterizar fielmente el problema estudiado. Además, es necesaria una correcta estimación de las propiedades estadísticas del subsuelo, ya que estos parámetros son de suma importancia para la estimación de los coeficientes de macrodispersión, siendo muy importante caracterizar el grado de heterogeneidad del medio, ya que un elevado grado de heterogeneidad, representado por la varianza del campo de conductividad hidráulica (i.e.,  $\sigma_Y^2 > 1$ ), incrementa la complejidad del problema a resolver, y la teoría matemática actual está limitada por este parámetro. Por otro lado, las principales limitaciones del modelo numérico están dadas por largos tiempos de simulación, problema que va de la mano con un gran número de simulaciones necesarias para caracterizar el comportamiento promedio del sistema y afecta al querer simular un medio más complejo (i.e., con mayores dimensiones del dominio como es el caso 3D). Según lo estimado en esta tesis, es necesario al menos un mínimo de 10 realizaciones para estimar la deformación de la pluma promedio del sistema, y 3 para poder estimar la mezcla promedio en medios de dos dimensiones. Además, se requiere de un gran número de partículas para garantizar una correcta estimación de la dilución y mezcla (en los experimentos desarrollados en esta tesis se utilizó alrededor de un millón de partículas), especialmente al simular números de Péclet bajos.

Son necesarios estudios posteriores para estimar el límite máximo en el cual esta teoría es

válida, así como desarrollar en profundidad la teoría propuesta por el autor en base a los coeficientes de macrodispersión efectivos basados en la teoría del  $D_b(t)$ .

Esta investigación aporta a mejorar la estimación del transporte de solutos en medios heterogéneos permeables integrando el problema generado al homogeneizar el campo de velocidades debido a la falta de información. Finalmente, la metodología propuesta con la utilización de los coeficientes  $D_b(t_\alpha)$  y  $D_b(t_{mix})$ , puede ser útil en estudios de remediación o ingeniería para describir correctamente la tasa de deformación de la pluma, mezcla y reacciones de los solutos, obteniéndose una respuesta mucho más cercana a la realidad en el caso de no contar con la capacidad económica para describir y caracterizar al subsuelo con un nivel alto de detalle, siempre y cuando se cuenta con una descripción basada en las propiedades estadísticas del medio poroso permeable. Los experimentos numéricos para el transporte de solutos son mucho más fáciles de reproducir que los experimentos en terreno, para una complejidad comparable del sistema, sin embargo, las simulaciones numéricas no deben reemplazar completamente los experimentos en terreno o los estudios teóricos, debiendo considerarse una herramienta adicional para la estimación del problema y la toma de decisiones.

## 6.2. Recomendaciones

Las recomendaciones de la tesis para estudios futuros son las siguientes:

1. Es necesario desarrollar una teoría robusta para el cálculo del tiempo característico de mezcla  $t_{mix}$ , con el fin de poder calcular  $f_m$  utilizando los parámetros involucrados del problema, ya que en este caso fue estimado mediante simulaciones.
2. Es importante probar los enfoques propuestos con experimentos de laboratorio, buscando determinar la fidelidad de las soluciones obtenidas, lo cual sirve de validación del método utilizado.
3. Con respecto a la metodología para incluir el “coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo”, tradicionalmente en las simulaciones se asigna un valor de este coeficiente en todo el dominio, tomando la velocidad media de flujo para su evaluación, siendo constante en cada celda. Por lo cual sería interesante calcular en investigaciones futuras un coeficiente de macrodispersión en cada bloque de la grilla, considerando la velocidad que este presenta, tal cual se propone en el trabajo de los autores De Barros y Rubin (2011). Si bien este enfoque aumenta la complejidad del problema en comparación a la metodología utilizada en este estudio, es necesario si se quiere contar con el efecto de las velocidades extremas, alejadas del valor medio que puede existir en el dominio, o si se quiere utilizar macrodispersión en problemas con medios estratificados, ya que el actual enfoque no logra resolver este tipo de problemas.
4. Otro análisis propuesto en base a los resultados obtenidos, utilizando los tiempos característicos de los procesos de mezcla, es la derivación de éste modelo a uno en 3-D para plumas ergódicas. Esto con el fin de aumentar la complejidad, además de estimar

los límites de la teoría utilizada en 2-D y si es posible adaptar las soluciones obtenidas al caso tridimensional, donde las diferencias de resolución entre un campo fino y un campo grueso de velocidades es aún mayor.

5. En análisis futuros podrían evaluarse nuevas condiciones y parámetros del problema para buscar los límites de validez del enfoque propuesto, como es por ejemplo evaluar: valores mayores del largo  $\lambda_c$ , medios anisotrópico, tiempos de simulación mayores, distintos grados de heterogeneidad, medios con distribuciones Gaussianas, etc.
6. Con respecto al transporte reactivo, es recomendable incorporar mecanismos y cinéticas de mayor complejidad para poder utilizar *NAPA* en problemas que incorporen contaminación y remediación de acuíferos o en estudios de ingeniería con diversos fines, esto con el objetivo de convertir al software en una poderosa herramienta de trabajo e investigación.
7. Con respecto a los métodos numéricos de resolución basados en el enfoque Lagrangiano, estos tienen el principal problema que es necesario un gran número de partículas para simular correcta y precisamente el transporte de especies que presenten mezcla difusiva en medios heterogéneos. Por lo tanto, al aumentar el número de partículas disminuye el error del método, teniendo como consecuencia un aumento significativo del tiempo de cálculo por iteración realizada, en el tamaño de los archivos generados y en el posterior proceso de manejo de la información generada. Por lo tanto, es necesaria la implementación de nuevas tecnologías al modelo numérico con tal de hacerlo más eficiente. Una solución inmediata podría ser la implementación de cómputo en paralelo, ya que con esto se podrían obtener simulaciones individuales más rápidamente.

## Bibliografía

- Battiato, I. y Tartakovsky, D. M. (2011). Applicability regimes for macroscopic models of reactive transport in porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 120–121:18–26.
- Battiato, I., Tartakovsky, D. M., Tartakovsky, A. M., y Scheibe, T. (2009). On breakdown of macroscopic models of mixing-controlled heterogeneous reactions in porous media. *Advances in Water Resources*, 32(11):1664–1673.
- Bear, J. (1988). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover.
- Bolster, D., Dentz, M., y Le Borgne, T. (2011a). Hypermixing in linear shear flow. *Water Resources Research*, 47(9):W09602.
- Bolster, D., Valdés-Parada, F. J., LeBorgne, T., Dentz, M., y Carrera, J. (2011b). Mixing in confined stratified aquifers. *Journal of Contaminant Hydrology*, 120–121:198–212.
- Borden, R. C. y Bedient, P. B. (1986). Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen-limited biodegradation: 1. theoretical development. *Water Resources Research*, 22(13):1973–1982.
- Boso, F., Bellin, A., y Dumbser, M. (2013). Numerical simulations of solute transport in highly heterogeneous formations: A comparison of alternative numerical schemes. *Advances in Water Resources*, 52:178–189.
- Chiogna, G., Cirpka, O. A., Grathwohl, P., y Rolle, M. (2011). Transverse mixing of conservative and reactive tracers in porous media: Quantification through the concepts of flux-related and critical dilution indices. *Water Resources Research*, 47(2):W02505.
- Chiogna, G., Hochstetler, D. L., Bellin, A., Kitanidis, P. K., y Rolle, M. (2012). Mixing, entropy and reactive solute transport. *Geophysical Research Letters*, 39(20):L20405.
- Cirpka, O. A. (2002). Choice of dispersion coefficients in reactive transport calculations on smoothed fields. *Journal of contaminant hydrology*, 58(3-4):261–282.
- Cirpka, O. A., de Barros, F. P. J., Chiogna, G., Rolle, M., y Nowak, W. (2011). Stochastic flux-related analysis of transverse mixing in two-dimensional heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 47(6):W06515.
- Cirpka, O. A., Frind, E. O., y Helmig, R. (1999). Numerical simulation of biodegradation controlled by transverse mixing. *Journal of Contaminant Hydrology*, 40(2):159–182.

- Cirpka, O. A. y Kitanidis, P. K. (2000). Characterization of mixing and dilution in heterogeneous aquifers by means of local temporal moments. *Water Resources Research*, 36(5):1221–1236.
- Cirpka, O. A. y Kitanidis, P. K. (2002). Numerical evaluation of solute dispersion and dilution in unsaturated heterogeneous media. *Water Resources Research*, 38(11):2–1–2–15.
- Cirpka, O. A. y Valocchi, A. J. (2007). Two-dimensional concentration distribution for mixing-controlled bioreactive transport in steady state. *Advances in Water Resources*, 30(6–7):1668–1679.
- Cleary, P. W. y Monaghan, J. J. (1999). Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 148(1):227–264.
- Dagan, G. (1984). Solute transport in heterogeneous porous formations. *Journal of Fluid Mechanics*, 145:151–177.
- Dagan, G. (1989). *Flow and transport in porous formations*. Springer-Verlag.
- De Barros, F. P. J. y Rubin, Y. (2011). Modelling of block-scale macrodispersion as a random function. *Journal of Fluid Mechanics*, 676:514–545.
- de Dreuzy, J.-R., Beaudoin, A., y Erhel, J. (2007). Asymptotic dispersion in 2d heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations. *Water Resources Research*, 43(10):W10439.
- de Dreuzy, J.-R., Carrera, J., Dentz, M., y Le Borgne, T. (2012). Time evolution of mixing in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 48(6):W06511.
- Dentz, M. y de Barros, F. P. J. (2013). Dispersion variance for transport in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 49(6):3443–3461.
- Dentz, M., Kinzelbach, H., Attinger, S., y Kinzelbach, W. (2000a). Temporal behavior of a solute cloud in a heterogeneous porous medium: 1. point-like injection. *Water Resources Research*, 36(12):3591–3604.
- Dentz, M., Kinzelbach, H., Attinger, S., y Kinzelbach, W. (2000b). Temporal behavior of a solute cloud in a heterogeneous porous medium: 2. spatially extended injection. *Water Resources Research*, 36(12):3605–3614.
- Dentz, M., Le Borgne, T., Englert, A., y Bijeljic, B. (2011). Mixing, spreading and reaction in heterogeneous media: a brief review. *Journal of contaminant hydrology*, 120-121:1–17.
- Di Donato, G., Obi, E.-O., y Blunt, M. J. (2003). Anomalous transport in heterogeneous media demonstrated by streamline-based simulation. *Geophysical Research Letters*, 30(12).
- Espinoza, C. y Valocchi, A. J. (1997). Stochastic analysis of one-dimensional transport of kinetically adsorbing solutes in chemically heterogeneous aquifers. *Water Resources Research*, 33(11):2429–2445.
- Feehley, C. E., Zheng, C., y Molz, F. J. (2000). A dual-domain mass transfer approach for modeling solute transport in heterogeneous aquifers: Application to the macrodispersion experiment (MADE) site. *Water Resources Research*, 36(9):2501–2515.

- Fernández-García, D., Sánchez-Vila, X., y Guadagnini, A. (2008). Reaction rates and effective parameters in stratified aquifers. *Advances in Water Resources*, 31(10):1364–1376.
- Gelhar, L. W. y Axness, C. L. (1983). Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19(1):161–180.
- Gingold, R. A. y Monaghan, J. J. (1977). Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181(3):375–389.
- Gramling, C. M., Harvey, C. F., y Meigs, L. C. (2002). Reactive transport in porous media, a comparison of model prediction with laboratory visualization. *Environmental Science & Technology*, 36(11):2508–2514.
- Herrera, P. A. (2009). *Particle and streamline numerical methods for conservative and reactive transport simulations in porous media*. Tesis de Doctorado, University of British Columbia, Vancouver.
- Herrera, P. A. y Beckie, R. D. (2009). A new approach to model solute mixing in porous media. *AGU Fall Meeting Abstracts*, -1:0990.
- Herrera, P. A. y Beckie, R. D. (2013). An assessment of particle methods for approximating anisotropic dispersion. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 71(5):634–651.
- Herrera, P. A., Massabó, M., y Beckie, R. D. (2009). A meshless method to simulate solute transport in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 32(3):413–429.
- Herrera, P. A., Valocchi, A. J., y Beckie, R. D. (2010). A multidimensional streamline-based method to simulate reactive solute transport in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 33(7):711–727.
- Janssen, G. M. C. M., Cirpka, O. A., y van der Zee, S. E. A. T. M. (2006). Stochastic analysis of nonlinear biodegradation in regimes controlled by both chromatographic and dispersive mixing. *Water Resources Research*, 42(1):W01417.
- Juanes, R. y Tchelepi, H. (2008). Special issue on multiscale methods for flow and transport in heterogeneous porous media. *Computational Geosciences*, 12(3):255–256.
- Kapoor, V., Gelhar, L. W., y Miralles-Wilhelm, F. (1997). Bimolecular second-order reactions in spatially varying flows: Segregation induced scale-dependent transformation rates. *Water Resources Research*, 33(4):527–536.
- Kinzelbach, W. (1988). The random walk method in pollutant transport simulation. In Custodio, E., Gurgui, A., y Ferreira, J. P. L., editors, *Groundwater Flow and Quality Modelling*, number 224 in NATO ASI Series, pages 227–245. Springer Netherlands.
- Kitanidis, P. K. (1988). Prediction by the method of moments of transport in a heterogeneous formation. *Journal of Hydrology*, 102(1–4):453–473.
- Kitanidis, P. K. (1994). The concept of the dilution index. *Water Resources Research*, 30(7):2011–2026.

- Lawrence, A. E. y Rubin, Y. (2007). Block-effective macrodispersion for numerical simulations of sorbing solute transport in heterogeneous porous formations. *Advances in Water Resources*, 30(5):1272–1285.
- Le Borgne, T., Dentz, M., Bolster, D., Carrera, J., de Dreuzy, J.-R., y Davy, P. (2010). Non-fickian mixing: Temporal evolution of the scalar dissipation rate in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 33(12):1468–1475.
- Le Borgne, T., Dentz, M., y Carrera, J. (2008). Spatial markov processes for modeling lagrangian particle dynamics in heterogeneous porous media. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 78(2 Pt 2):026308.
- Le Borgne, T., Dentz, M., Davy, P., Bolster, D., Carrera, J., de Dreuzy, J.-R., y Bour, O. (2011). Persistence of incomplete mixing: A key to anomalous transport. *Physical Review E*, 84(1):015301.
- Lichtner, P. C., Kelkar, S., y Robinson, B. (2002). New form of dispersion tensor for axisymmetric porous media with implementation in particle tracking. *Water Resources Research*, 38(8):21–1–21–16.
- Liu, G., Zheng, C., y Gorelick, S. M. (2004). Limits of applicability of the advection-dispersion model in aquifers containing connected high-conductivity channels. *Water Resources Research*, 40(8):W08308.
- Lucy, L. B. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82:1013–1024.
- McComb, W. D. (1992). *The Physics of Fluid Turbulence*. Clarendon Press Oxford Engineering Science Series 25.
- Michalak, A. M. y Kitanidis, P. K. (2000). Macroscopic behavior and random-walk particle tracking of kinetically sorbing solutes. *Water Resources Research*, 36(8):2133–2146.
- Nowak, W. y Cirpka, O. A. (2006). Geostatistical inference of hydraulic conductivity and dispersivities from hydraulic heads and tracer data. *Water Resources Research*, 42(8):W08416.
- Pollock, D. W. (1988). Semianalytical computation of path lines for finite-difference models. *Ground Water*, 26(6):743–750.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Porta, G. M., Riva, M., y Guadagnini, A. (2012). Upscaling solute transport in porous media in the presence of an irreversible bimolecular reaction. *Advances in Water Resources*, 35:151–162.
- Quinodoz, H. A. M. y Valocchi, A. J. (1990). Macrodispersion in heterogeneous aquifers. *Transport and Mass Exchange Processes in Sand and Gravel Aquifers: Field and Modeling Studies*, pages 445–468.
- Raje, D. S. y Kapoor, V. (2000). Experimental study of bimolecular reaction kinetics in porous media. *Environmental Science & Technology*, 34(7):1234–1239.
- Rubin, Y. (2003). *Applied Stochastic Hydrogeology*. Oxford University Press.

- Rubin, Y., Bellin, A., y Lawrence, A. E. (2003). On the use of block-effective macrodispersion for numerical simulations of transport in heterogeneous formations. *Water Resources Research*, 39(9):1242.
- Rubin, Y., Sun, A., Maxwell, R., y Bellin, A. (1999). The concept of block-effective macrodispersivity and a unified approach for grid-scale- and plume-scale-dependent transport. *Journal of Fluid Mechanics*, 395:161–180.
- Salamon, P., Fernández-García, D., y Gómez-Hernández, J. J. (2006a). Modeling mass transfer processes using random walk particle tracking. *Water Resources Research*, 42(11):W11417.
- Salamon, P., Fernández-García, D., y Gómez-Hernández, J. J. (2006b). A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method. *Journal of contaminant hydrology*, 87(3-4):277–305.
- Salamon, P., Fernández-García, D., y Gómez-Hernández, J. J. (2007). Modeling tracer transport at the MADE site: The importance of heterogeneity. *Water Resources Research*, 43(8):W08404.
- Salandin, P. y Fiorotto, V. (1998). Solute transport in highly heterogeneous aquifers. *Water Resources Research*, 34(5):949–961.
- Scheidegger, A. E. (1961). General theory of dispersion in porous media. *Journal of Geophysical Research*, 66(10):3273–3278.
- Steeffel, C. I. y MacQuarrie, K. T. (1996). Approaches to modeling of reactive transport in porous media. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 34(1):85–129.
- Tartakovsky, A. M. (2010). Langevin model for reactive transport in porous media. *Physical Review E*, 82(2):026302.
- Tartakovsky, A. M., Meakin, P., Scheibe, T. D., y Wood, B. D. (2007). A smoothed particle hydrodynamics model for reactive transport and mineral precipitation in porous and fractured porous media. *Water Resources Research*, 43(5):W05437.
- Thierrin, J. y Kitanidis, P. K. (1994). Solute dilution at the borden and cape cod groundwater tracer tests. *Water Resources Research*, 30(11):2883–2890.
- Trefry, M. G. (2003). Numerical simulations of pre-asymptotic transport in heterogeneous porous media: Departures from the gaussian limit. *Water Resources Research*, 39(3).
- Zhang, Y. y Benson, D. A. (2008). Lagrangian simulation of multidimensional anomalous transport at the MADE site. *Geophysical Research Letters*, 35(7):L07403.
- Zhang, Y. y Papelis, C. (2011). Particle-tracking simulation of fractional diffusion-reaction processes. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 84(6):066704.
- Zheng, C., Bianchi, M., y Gorelick, S. M. (2011). Lessons learned from 25 years of research at the MADE site. *Ground Water*, 49(5):649–662.

# Anexos

## A.1. Estudio de las escalas involucradas en la dispersión

En esta sección se investigó si es posible representar los efectos dispersivos de las distintas escalas involucradas en torno a un coeficiente de dispersión que cuente con ambos efectos. Para el primer escenario se consideró que los efectos macrodispersivos son modelados separadamente de los efectos de la dispersión local, mientras que en el segundo se modela el efecto macrodispersivo agregándolo al coeficiente de dispersión local aditivamente.

Para probar lo anterior, se tomaron los siguientes valores y consideraciones:

1. La velocidad media en la dirección principal de flujo es  $U = 0,258[\text{m/d}]$
2. Se probaron distintos valores de  $D_L$ , modificando la razón entre éste coeficiente y el coeficiente de la macrodispersión  $D_b$
3. El número de Péclet es calculado tomando como largo característico la distancia entre partículas.
4. Se comparó la solución analítica del problema equivalente, respecto a la solución utilizando el método *SPH*.
5. Para la comprensión del comportamiento de las plumas resultantes, se utilizó el índice de dilución.
6. Para los casos con menor dispersión, se eliminaron los primeros resultados de la solución analítica debido a que presentaban errores numéricos.

La solución analítica para un soluto centrado en  $x_0 = y_0 = 0$ , con un ancho  $W$  y largo  $L$ ,

considerando una concentración inicial  $C_0$ , la cual se mueve con una velocidad uniforme  $v$  es:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{4} \left( \operatorname{erf} \left[ \frac{x - vt + L/2}{\sqrt{4D_x t}} \right] - \operatorname{erf} \left[ \frac{x - vt - L/2}{\sqrt{4D_x t}} \right] \right) \cdot \left( \operatorname{erf} \left[ \frac{y + W/2}{\sqrt{4D_y t}} \right] - \operatorname{erf} \left[ \frac{y - W/2}{\sqrt{4D_y t}} \right] \right) \quad (\text{A.1})$$

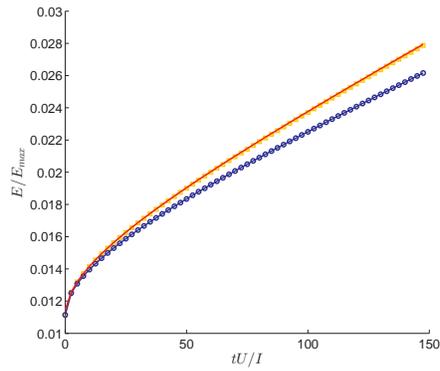
Se presenta en la Tabla A.1 el resumen de los coeficientes y parámetros involucrados en la simulación, y en la Tabla A.2 se presentan los distintos coeficientes de dispersión estudiados en cada prueba y escenario simulados, además de los coeficientes calculados en base a éstos.

Tabla A.1: Parámetros utilizados en la prueba de los efectos dispersivos en un campo de velocidad uniforme.

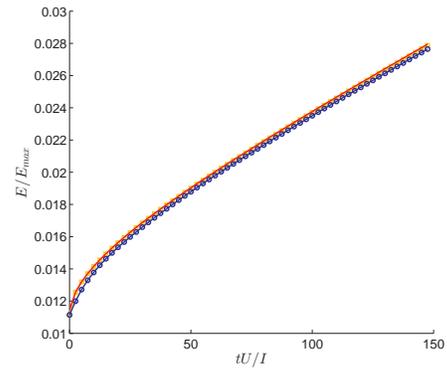
Parámetro	Valor
Largo de la pluma [m]	5
Ancho de la pluma [m]	5
Largo buffer long [m]	20
Largo buffer tran [m]	20
L.dominio [m]	102,4
A.dominio [m]	102,4
U [m/d]	0,258
Num. partículas Long.	400
Num. partículas Trans.	400
Distancia entre partículas [m]	0,05
Smoothing length [m]	0,1
Estadística número de partículas (SPH)	
Máximo	55
Mínimo	15
promedio	44

De los resultados obtenidos se puede concluir que:

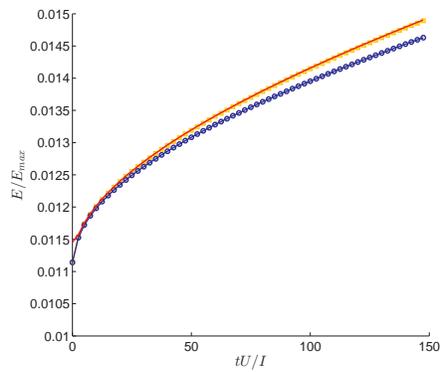
1. El resultado obtenido en el escenario E2 (solo *SPH*, un solo coeficiente de dispersión) es idéntico a la solución analítica del problema.
2. Para el caso 2 y 5 se obtiene el mismo comportamiento entre los escenarios evaluados, siendo igual a la solución analítica.
3. Respecto a estos casos se puede obtener el mismo número adimensional  $Pe \cdot D_b / D_L = 2$



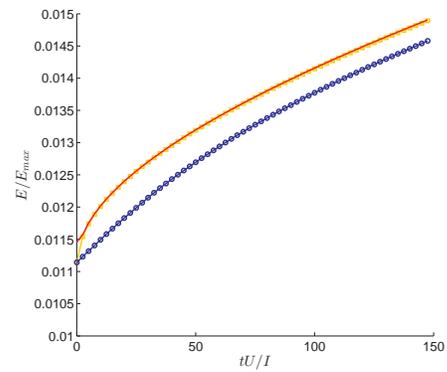
(a) Test 1



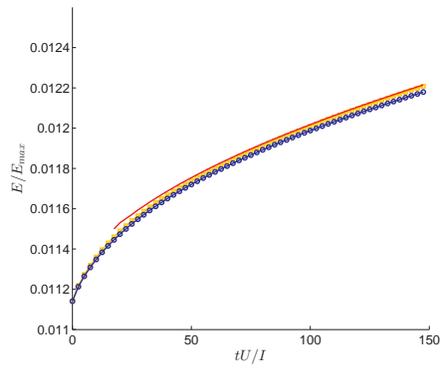
(b) Test 2



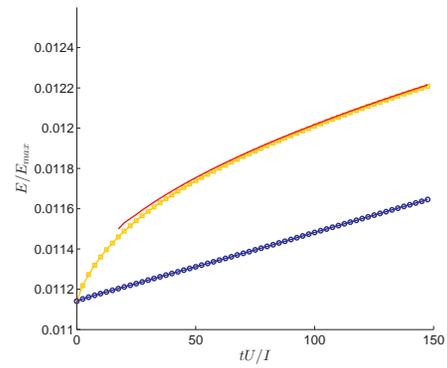
(c) Test 3



(d) Test 4



(e) Test 5



(f) Test 6



Figura A.1: Índice de dilución para un campo de velocidades uniforme, considerando distintos valores del número de Péclet y razones de los coeficientes de dispersión.

Tabla A.2: Resumen de los coeficientes y parámetros involucrados en la simulación

TEST	$D [m^2/s]$	$SPH_{E1}$	$RW_{E1}$	$SPH_{E2}$	$RW_{E2}$	Pe	$D_b/D_L$
1	0,055	0,05	0,005	0,055	0	0,2	0,1
2	0,055	0,005	0,05	0,055	0	0,2	10
3	0,01	0,0004	0,0096	0,01	0	2	24
4	0,01	0,00004	0,00996	0,01	0	2	249
5	0,0055	0,005	0,0005	0,0055	0	20	0,1
6	0,0055	0,0005	0,005	0,0055	0	20	10

## A.2. Pluma ergódica delgada de contaminante

En esta sección se analizó cómo evoluciona una pluma estrecha de ancho igual a  $0,1$  [m], y que es representada por una línea de concentración muy larga en el eje transversal. Esta además cumple la condición de ergodicidad, y es simulada para dos condiciones de transporte diferentes. Se analizó la elongación entre pares de partículas, dado un orden inicial del sistema, estudiando cómo éstas se van separando o acercando debido a la advección y la heterogeneidad del medio. Un punto importante de análisis es ver, cómo se comporta una pluma que se mezcla instantáneamente, sin condiciones de barrera generada por las partículas más externas de la pluma, derivando en una interacción limitada con otros compuestos para reaccionar y diluirse.

Para esto se consideró dos números de Péclet con los valores de  $25$  y  $2500$ , evaluando dos condiciones de transporte diferentes para entender el problema antes explicado, estudiando para distintos estados temporales la evolución de la pluma.

Los resultados de la evolución de la pluma para distintos tiempos se aprecia a continuación en las Figuras A.2 y Figura A.3

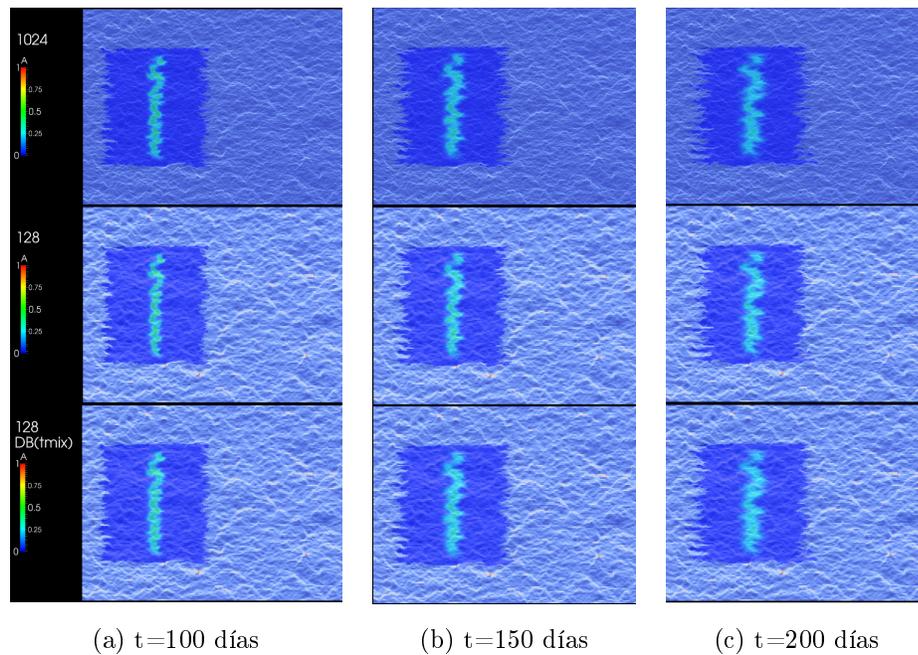


Figura A.2: Evolución de una línea de contaminante asumiendo un valor de  $Pe = 25$ , para distintos estados temporales luego del inicio.

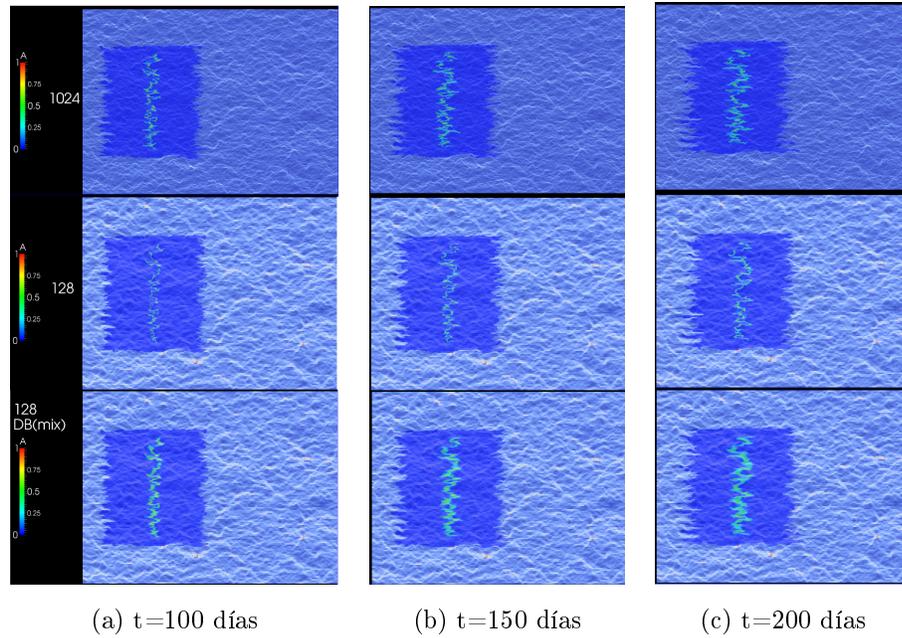


Figura A.3: Evolución de una línea de contaminante asumiendo un valor de  $Pe = 2500$ , para distintos estados temporales luego del inicio.

Los resultados de los coeficientes calculados se muestran a continuación en las Figura A.4, A.6 y A.5:

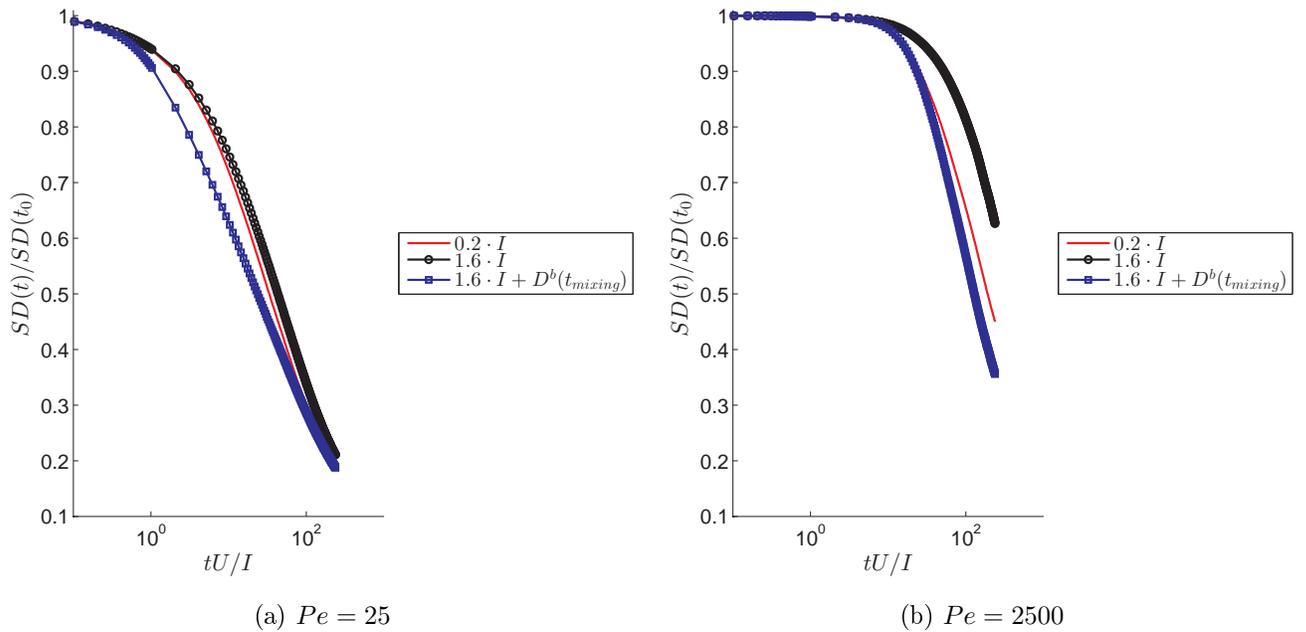


Figura A.4: Disipación escalar adimensional por su valor inicial versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas

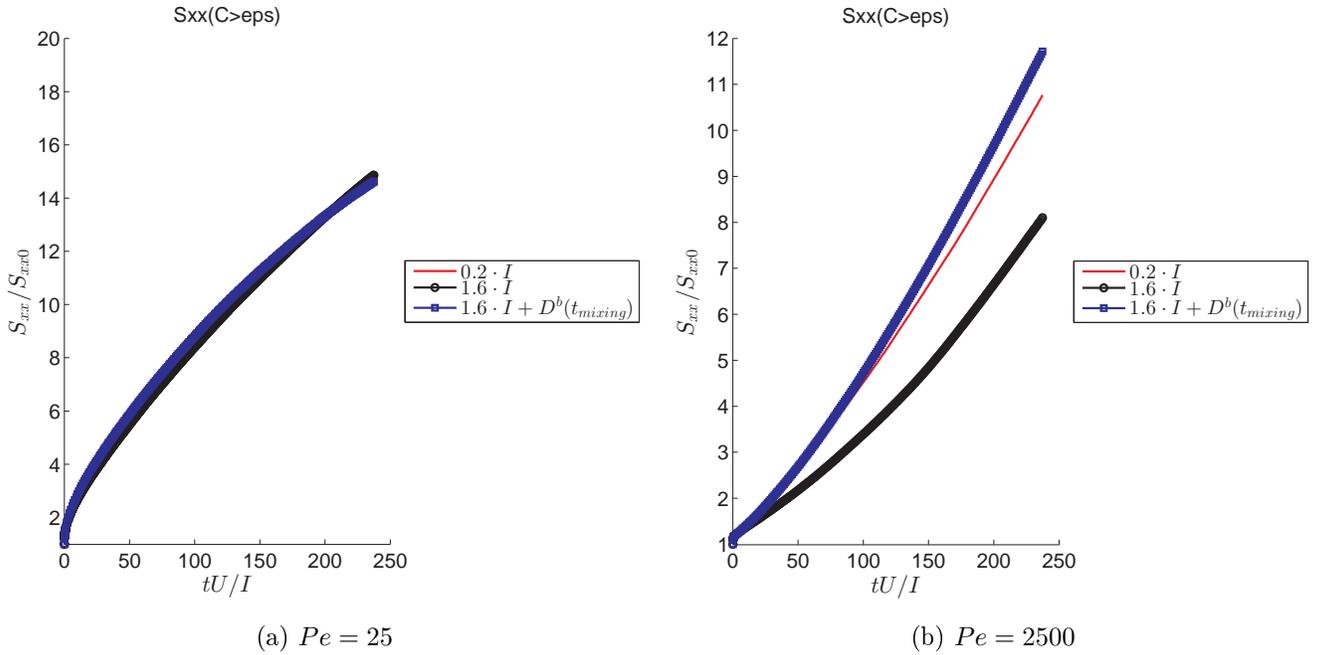


Figura A.5: Momento espacial de segundo orden adimensional por su valor inicial para concentraciones mayores a  $\epsilon = 10^{-3}$  versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas.

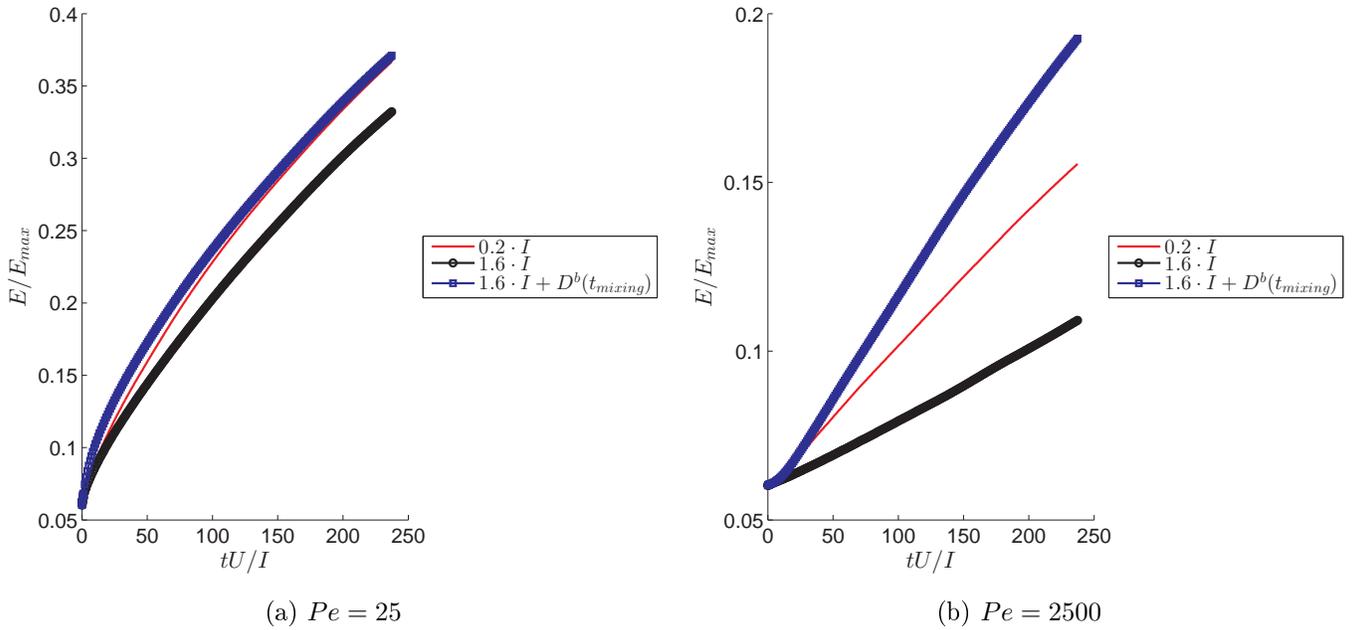


Figura A.6: Índice de dilución adimensional por su valor máximo versus el tiempo adimensional para una línea de soluto, para dos condiciones de transporte distintas

De los resultados obtenidos se desprende que:

1. Para un menor número de Péclet, la difusión es dominante, expandiéndose la pluma rápidamente en el dominio, esto queda demostrado en las Figuras A.6 y A.2
2. Cuando la advección es dominante (ver Figura A.3), existe un menor volumen ocupado por la pluma. Sin embargo, al utilizar los mismos valores de  $D_b(t_{mix})$  utilizados en las secciones anteriores se sobrestima el volumen de la *CGV* respecto a la *CFV*.

Además, con respecto al cálculo de la disipación escalar (ver Figura A.4), los resultados indican que la tasa de mezcla del sistema se logra representar correctamente, existiendo una sobrestimación inicial para valores de  $Pe = 25$ , ya que no existe el efecto de barrera y todo se mezcla rápidamente. Para valores de  $Pe = 2500$ , el valor de la mezcla es determinado correctamente a lo largo del tiempo.

Sin embargo, del resultado del índice de dilución (ver Figura A.6), el cual relaciona el volumen utilizado por la pluma respecto a un volumen inicial donde se puede diluir, se tiene que para valores de  $Pe = 25$  esta correctamente estimado y para un valor de  $Pe = 2500$  queda sobrestimado.

Respecto al momento espacial de segundo orden ( $S_{xx}$ , ver Figura A.5), ésta queda perfectamente estimada para ambos casos. Por lo tanto, al cumplir la pluma la condición de ergodicidad, es más que suficiente para asegurar la correcta estimación de la dispersión de la pluma. No fue posible calcular elongación para las plumas con  $D_b(t)$ , debido a los saltos aleatorios de las partículas, perdiendo completamente el orden inicial impuesto debido a la dispersión artificial introducida como macrodispersión, obteniéndose valores de elongación hasta 3 órdenes de magnitud mayores al caso base. Sin embargo, al utilizar una *CFV* se obtienen mayores valores de elongación respecto a la utilización de una *CGV*.

Finalmente, los resultados sugieren que existe mezcla completa instantánea de la pluma en el medio, sin un efecto de barrera, pudiendo utilizarse el  $D_b(t)$  para estimar correctamente los procesos, salvo la dilución cuando el número de Péclet es grande ( $Pe > 250$ , ver A.6). Esto debido a que la pluma está en completo contacto con el medio, pudiendo diluirse a la máxima tasa inicial, a esto se le agrega el efecto de los saltos aleatorios que desordenan aún más el sistema, traduciéndose en un exceso de dilución.

### A.3. Análisis del momento espacial de segundo orden para plumas pequeñas

En esta sección se estudió la variación del momento espacial local en el tiempo, para una serie de plumas de solutos ubicadas en una misma coordenada inicial  $X_i$ , las cuales están separadas por una distancia desde su centro, a lo largo del eje  $Y_i$ . En primer lugar, se realizó una prueba de sensibilidad para conocer cuántas partículas se deben utilizar en la representación de la

pluma de solutos, si, se desea obtener una solución precisa. Los parámetros adoptados en las simulaciones son presentados en la Tabla A.3.

Tabla A.3: Parámetros de prueba de plumas locales.

Parámetros	Unidad	Valor
<i>Conductividad Log(Y)</i>		
Varianza ( $\sigma_Y^2$ )	-	1,0
<i>Definición del dominio</i>		
Largo dominio ( $L_x$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo dominio ( $L_y$ )	$m$	$204,8 \cdot I_Y$
Largo celda ( $\lambda_x$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
Largo celda ( $\lambda_y$ )	$m$	$0,2 \cdot I_Y$
<i>Campo de velocidades</i>		
Carga hidráulica ( $H$ )	$m$	10,0
Velocidad media ( $U$ )	$m$	0,258
<i>Prueba de sensibilidad al número de partículas</i>		
Número de partículas	-	$1000^2; 500^2; 250^2; 100^2; 50^2; 25^2; 10^2$
Smoothing length ( $SL$ )	$m$	0.1
<i>Parámetros de prueba plumas locales</i>		
Numero de partículas	-	$100^2$
Largo de suavizado del método SPH ( $SL$ )	$m$	0,1
Pos. centro de la pluma ( $X_i$ )	$m$	10
Pos. centro de la pluma ( $Y_i$ )	$m$	25 a 75
Diámetros estudiados ( $D_{p,i}$ )	$m$	2; 4
<i>Parámetros de la pluma ergódica</i>		
Coordenadas pluma caso 1	$m$	$C_1=(9, 24) \& C_2=(11, 76)$
Coordenadas pluma caso 2	$m$	$C_1=(8, 23) \& C_2=(12, 77)$

Los resultados de la prueba de sensibilidad del número de partículas se presentan en la Figura A.7. Estos sugieren que utilizar menos de  $50^2$  partículas para estimar una pluma dado un  $SL = 0,1[m]$ , genera errores en la estimación de la varianza, por lo tanto para el cálculo se utilizaron  $100^2$  partículas por cada pluma local.

Definido lo anterior, se calculó el momento espacial de segundo orden del soluto para dos casos de plumas con forma inicial circular y para dos casos de plumas con forma inicial cuadradas, con los siguientes largos:

1. Caso 1: Plumaz circulares  $D_{p,i} = 2[m]$  , Plumaz cuadradas  $l_{x,i} = 2[m]$ , separación desde el centro  $d_c = 2[m]$

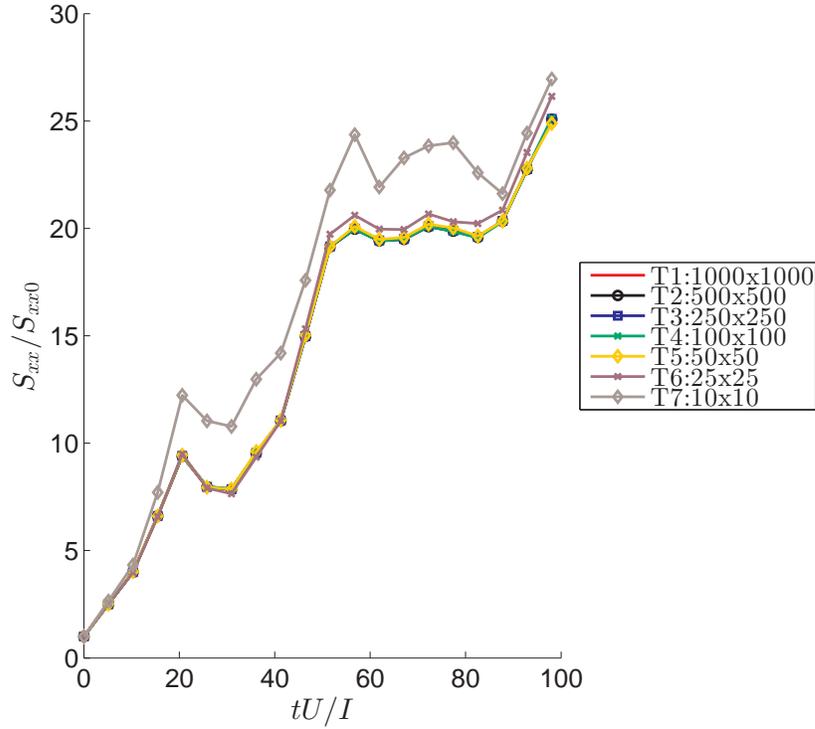


Figura A.7: Momento espacial de segundo orden adimensional versus tiempo adimensional, considerando distintos números de partículas para representar una pluma de solutos.

2. Caso 2: Plumitas circulares  $D_{p,i} = 4[m]$ , Plumitas cuadradas  $l_{x,i} = 4[m]$ , separación desde el centro  $d_c = 4[m]$

Estas plumas están separadas desde el centro superponiéndose lo mínimo posible a las otras plumas. Además se consideraron las siguientes coordenadas iniciales  $X_i=10[m]$  y con  $Y_i = 25[m]$  hasta  $Y_f = 75[m]$ .

El resultado de las simulaciones individuales y del conjunto se comparó con una zona rectangular de área similar a la abarcada por el total de las plumas locales (ver Tabla A.3). Esta zona rectangular tiene la longitud transversal tal que la pluma simulada es ergódica respecto a este eje (al menos  $L_p = 100 \cdot I_Y$ ).

### A.3.1. Momento espacial de segundo orden para las plumas

Definido lo anterior, se presentan los resultados del momento espacial de segundo orden de las plumas locales en las Figuras A.8 y A.9. De ellos se puede apreciar una gran dispersión y variabilidad entre las distintas realizaciones de plumas locales, independiente de la forma inicial que éstas tengan.

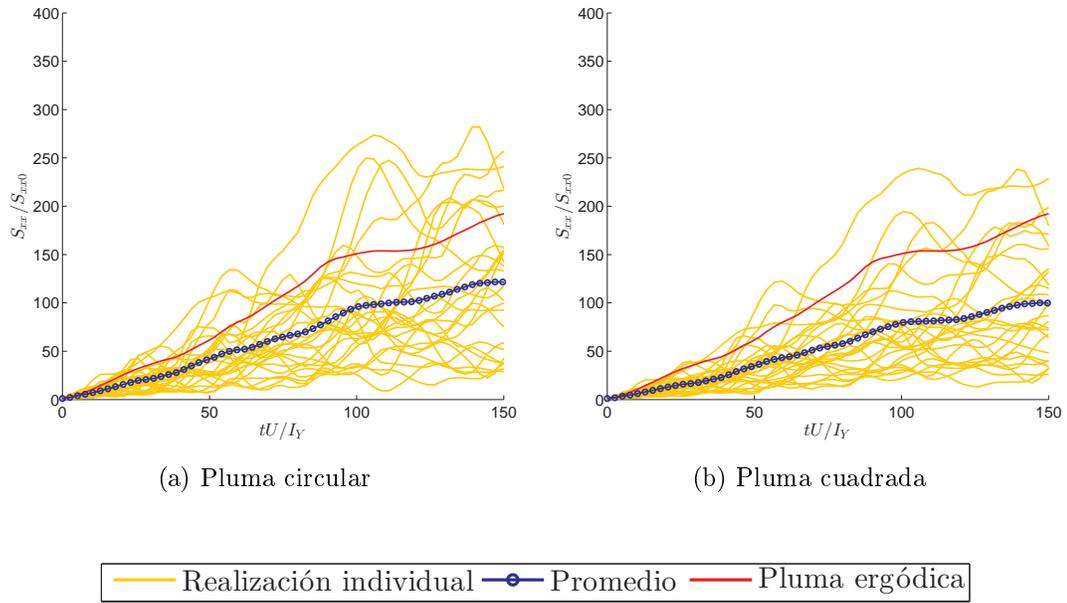


Figura A.8: Comparación del momento espacial de segundo orden adimensional entre distintas realizaciones de plumas pequeñas y una pluma regional, para dos formas iniciales de distribución. En amarillo se presentan las distintas realizaciones de las plumas locales, en azul el promedio del conjunto y en rojo la pluma ergódica.

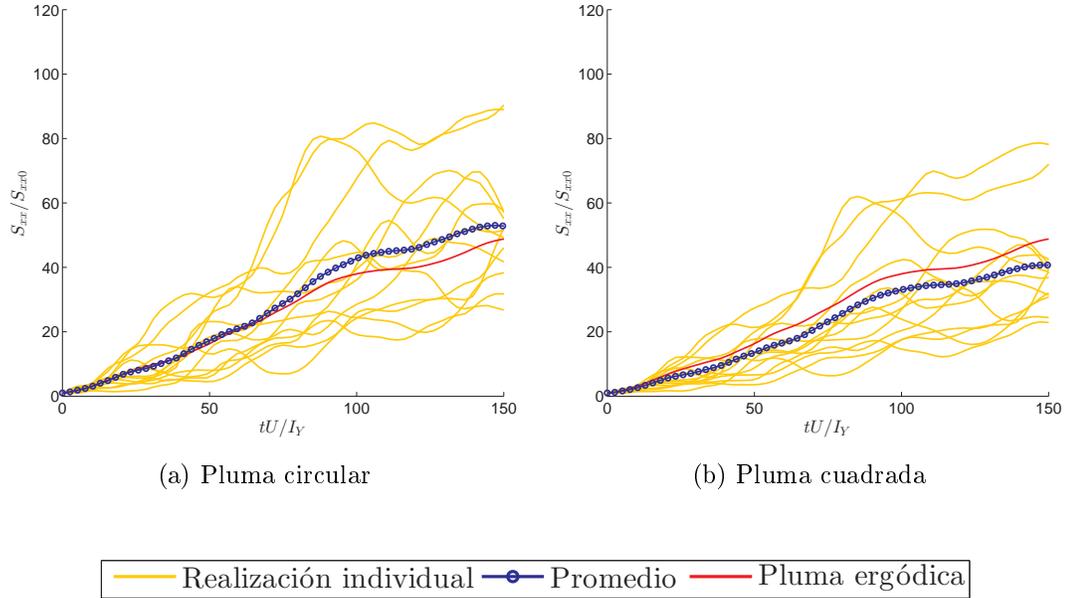


Figura A.9: Comparación del momento espacial de segundo orden adimensional entre distintas realizaciones de plumas pequeñas y una pluma regional, para dos formas iniciales de distribución. En amarillo se presentan las distintas realizaciones de las plumas locales, en azul el promedio del conjunto y en rojo la pluma ergódica.

Para plumas locales y ergódica; cuando el tamaño es menor en la dirección  $x_1$ , la magnitud de  $S_{xx}$  es mucho mayor, obteniéndose una gran dispersión del sistema en la dirección principal del flujo. Esto debido a que cuando el rango de medición es menor, las variaciones obtenidas son porcentualmente más significativas que cuando el rango de medición es mayor.

Además, es posible apreciar diferencias en la magnitud de  $S_{xx}$  según sea el orden inicial dado (ver Figura A.9), lo cual puede explicarse al considerar que la pluma tiene una forma circular, con una menor área en comparación a la pluma cuadrada (está compuesta por un menor número de partículas). Por lo tanto, es esperable que la varianza sea mayor para este caso, encontrándose que el promedio de las plumas con ésta forma, supera ligeramente a la pluma ergódica, mientras que la con una forma inicial cuadrada no.

Sin embargo, al comparar el promedio del conjunto de realizaciones de las plumas locales con respecto a la pluma ergódica correspondiente, no se logran resultados cercanos para el caso 1 y sí para el caso 2. Esto debido a que, si el tamaño de la pluma local aumenta, esta se acerca más a la condición de ergodicidad de la pluma respecto a la  $I_{\tilde{Y}}$ . Según los autores Rubin et al. (1999), el valor de  $I_{\tilde{Y}}$  es mucho menor al valor de  $I_Y$ , y por lo tanto, plumas que no son ergódicas respecto a  $I_Y$ , pueden serlo respecto a  $I_{\tilde{Y}}$ . En consecuencia, se espera que las plumas locales de mayor tamaño en su conjunto obtengan un valor similar de dispersión del sistema en comparación al caso ergódico, ya que capturarían mejor la heterogeneidad del sistema.

### A.3.2. Coeficiente de dispersión

A continuación se presenta el valor del coeficiente de dispersión calculado para cada caso, el cual fue obtenido considerando la siguiente ecuación:

$$D_{xx} = \frac{1}{2} \frac{dS_{xx}}{dt} \quad (\text{A.2})$$

Es posible apreciar que cuando el tamaño de las plumas es mayor (caso 2), ésta logra capturar mejor la variabilidad del medio (ver Figuras A.10 y A.11). Por lo tanto, el conjunto de realizaciones representa mejor la dispersión del sistema para cada instante de tiempo, obteniéndose valores del coeficiente de dispersión similares en comportamiento y magnitud al caso ergódico.

Respecto a lo anterior, es posible discutir acerca del tamaño mínimo que deben tener las plumas locales sí es que se busca reproducir el comportamiento del sistema a través del promedio de ellas, siendo las plumas con diámetro igual a 4 [m] ( $l_2/\lambda_C = 40$ ), las que reproducen mejor el comportamiento del momento espacial de segundo orden y del coeficiente de dispersión.

Al utilizar un menor tamaño de la discretización, se subestima el momento espacial del con-

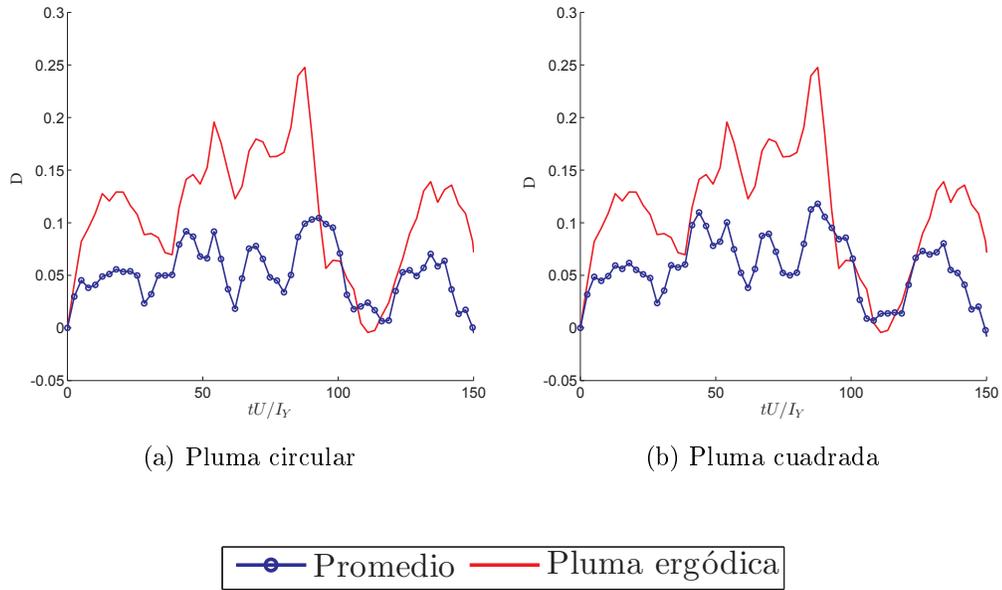


Figura A.10: Comparación del coeficiente de dispersión del promedio de las realizaciones para las pluma locales respecto al resultado de una pluma ergódica, para el caso 1. En azul se presentan el valor promedio del conjunto de realizaciones y en rojo la pluma ergódica.

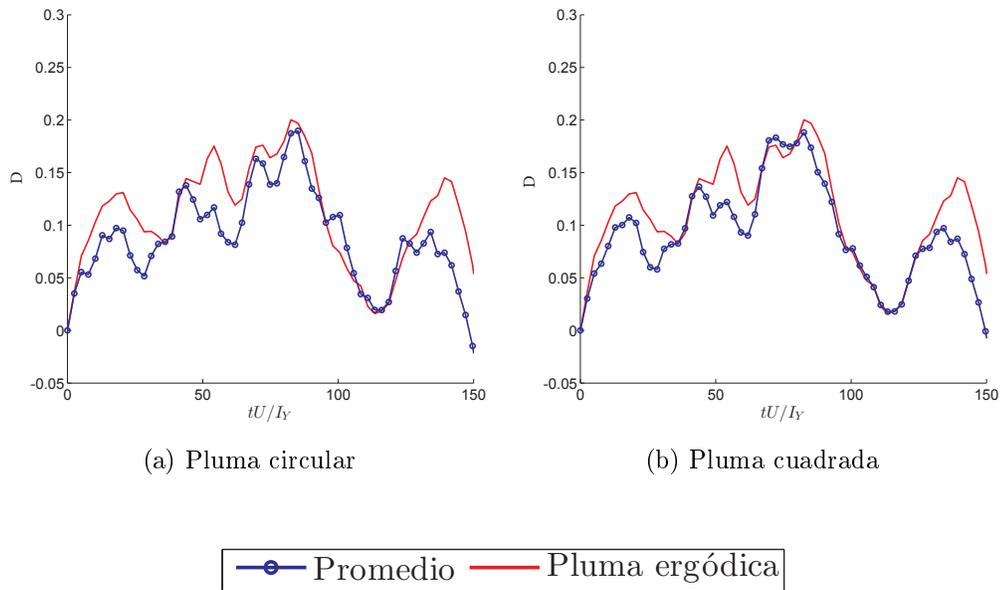


Figura A.11: Comparación del coeficiente de dispersión del promedio de las realizaciones para las pluma locales respecto al resultado de una pluma ergódica, para el caso 2. En azul se presentan el valor promedio del conjunto de realizaciones y en rojo la pluma ergódica.

junto de realizaciones, representando solamente las propiedades locales y no las globales del

dominio correctamente. Las plumas pequeñas son afectadas significativamente por los patrones locales de la variabilidad espacial, y son menos susceptibles a la descripción utilizando coeficientes de dispersión.

Resultados obtenidos por Rubin (2003) sugieren que cuando la relación entre  $l_2/\lambda_c > 1,7$  se alcanza la condición de ergodicidad con respecto a la escala representativa de las fluctuaciones no capturadas por la grilla numérica. Entonces, asumiendo los parámetros anteriores, la pluma debe tener al menos  $l_2 > 0,2$  [m] para cumplir esta condición. Bajo estas condiciones, es posible modelar los efectos de la variabilidad en la escala inferior a la grilla numérica utilizando un modelo de dispersión Fickiano. Por lo tanto, la variabilidad eliminada puede ser recreada utilizando flujos dispersivos a través de un coeficiente, como es el caso del  $D_b(\infty)$ , debido a que, para la magnitud de las escalas involucradas el régimen pre-asintótico es relativamente corto. Sin embargo, según los resultados obtenidos puede existir grandes variaciones del valor de la dispersión del sistema para cada tiempo.

### A.3.3. Variabilidad de las plumas para distintos valores de $\lambda_c$

Finalmente se procedió a calcular para las plumas cuadradas el momento espacial, considerando distintos tamaños de grillas numéricas de velocidades y la utilización del coeficiente  $D_b(\infty)$ . Los resultados son presentados en las Figuras A.12 para plumas locales, que están separadas por una distancia de 10 [m] desde el centro, además de agregar el valor promedio de todas las realizaciones. Esto con el fin de enfocarse en comparar el comportamiento de cada realización individual, en vez de comparar el comportamiento promedio del conjunto de realizaciones.

Los resultados sugieren que existe una gran variabilidad para cada realización en el cálculo de las plumas locales, obteniéndose comportamientos variados, los cuales están condicionados por la localización inicial de las plumas. Sin embargo, la tendencia para cada realización puede variar o no al momento de cambiar la discretización de la grilla numérica. Esto debido a las zonas con velocidades altas en magnitud son promediadas, modificando el campo de velocidades y por ende la forma de la pluma.

Para los CGV con la misma discretización, la tendencia de las curvas no varía, salvo la pendiente de éstas, volviéndose más pronunciada cuando se utiliza el coeficiente de macrodispersión. Respecto a la utilización de un CF,V la magnitud del parámetro en estudio es mayor ya que el medio cuenta con más variabilidad numérica, pudiendo el sistema generar un mayor desorden potencial a las plumas transportadas. En conclusión, al utilizar el coeficiente de macrodispersión con un CGV los resultados obtenidos difieren en magnitud al caso de CFV, sin embargo, se logra disminuir el error en la estimación en comparación con el caso de utilizar un CGV sin coeficientes de macrodispersión.

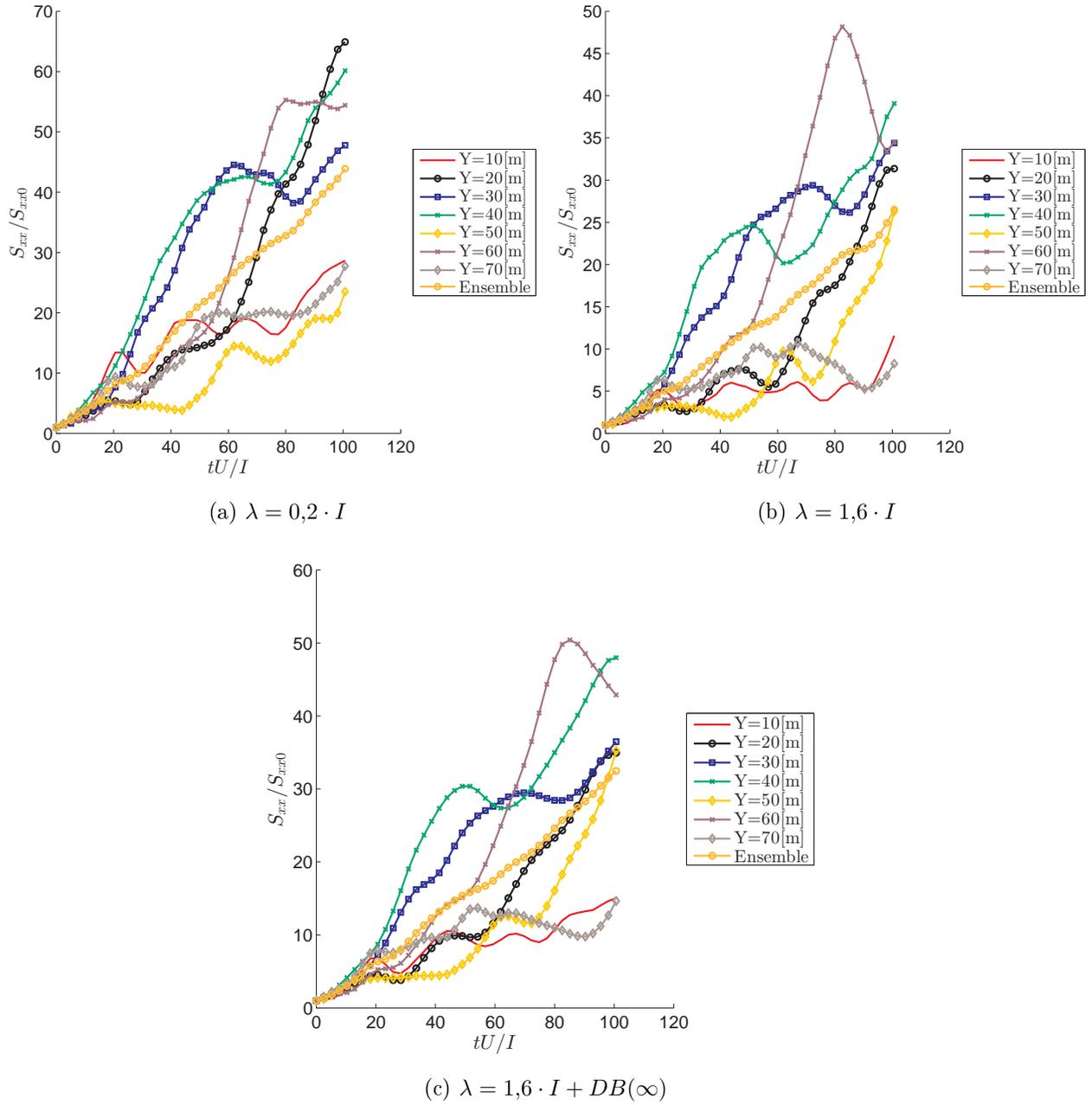


Figura A.12: Momento espacial de segundo orden para plumas locales con distinta posición inicial del centro de masa a lo largo de una coordenada  $Y$  correspondiente al eje transversal al dirección principal de flujo, considerando que  $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$ .

## A.4. Coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo

En esta sección se presenta la derivación del “coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo”, para mayor detalle en los cálculos se sugiere revisar el libro de Rubin (2003).

Siguiendo la derivación presentada por Rubin, se considera un campo de conductividad hidráulica estacionario el cual tiene una distribución log-normal y que es definido a través de una función aleatoria espacial (space random function, SRF) designada  $Y = \ln(K)$ , con una media  $m_Y$  y una varianza  $\sigma_Y^2$  conocidas. Definido lo anterior, es posible dividir las componentes de  $Y$  en tres, para tomar en cuenta los efectos y variabilidad presentes en las distintas escalas involucradas:

$$Y(x) = m_Y + \bar{Y}(x) + \tilde{Y}(x) \quad (\text{A.3})$$

donde  $\bar{Y}$  y  $\tilde{Y}$  son la "medias-cero" para las fluctuaciones de la escala superior e inferior de la grilla numérica respectivamente.  $\bar{Y}$  representa la variabilidad que es capturada por la grilla numérica, y  $\tilde{Y}$  representa la variabilidad de la escala inferior a ésta y por lo tanto no es resuelta. Entonces, se considera que  $\bar{Y}$  representa la variabilidad de la escala superior y que es  $\tilde{Y}$  la variabilidad de la escala inferior. Luego, utilizando el teorema de Nyquist, es posible caracterizar la covarianza en el espacio de Fourier para  $\bar{Y}$ :

$$\hat{C}_{\bar{Y}}(k) = \begin{cases} \hat{C}_Y(k) & \text{para } k_i \leq \frac{\pi}{\lambda_i}, i=1, \dots, m \\ 0 & \text{otro valor} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

donde  $\lambda_i$  es el tamaño de la discretización de la zona de homogeneización,  $i$  es las dimensiones del dominio y  $\hat{C}_Y(k)$  es la covarianza en el espacio de Fourier donde  $k$  es el vector de números de onda en el espacio de Fourier y  $m$  es el número de dimensiones del espacio.

Es posible relacionar  $\hat{C}_Y(k)$  con la covarianza espacial  $C_Y(k)$  a través de la siguiente fórmula:

$$\hat{C}_Y(k) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} C_Y(k) \exp(ik \cdot r) d^m r \quad (\text{A.5})$$

donde  $i$  es el número imaginario y  $d^m r = dr_1 \dots dr_m$ . El valor de  $\hat{C}_Y(k)$  puede ser descompuesto para representar las componentes de información de la escala superior e inferior de la grilla numérica, obteniéndose:

$$\hat{C}_Y(k) = \hat{C}_{\bar{Y}}(k) + \hat{C}_{\tilde{Y}}(k) \quad (\text{A.6})$$

Al igual como se hizo con la covarianza, es posible definir un filtro paso alto para descomponer

la ecuación (A.6):

$$F(k) = \begin{cases} 0 & \text{para } |k_i| \leq \frac{\pi}{\lambda_i}, i=1, \dots, m \\ 1 & \text{otro valor} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

utilizando (A.7) en (A.6) es posible reescribir las variables como:

$$\widehat{C}_{\bar{Y}}(k) = [1 - F(k)]\widehat{C}_Y(k) \quad \& \quad \widehat{C}_{\tilde{Y}}(k) = F(k)\widehat{C}_Y(k) \quad (\text{A.8})$$

Según (A.8), es posible separar las componentes de la varianzas:

$$\sigma_Y^2 = \sigma_{\bar{Y}}^2 + \sigma_{\tilde{Y}}^2 \quad (\text{A.9})$$

donde  $\sigma_{\bar{Y}}^2$  y  $\sigma_{\tilde{Y}}^2$  es la varianza de la escala superior e inferior de la grilla respectivamente. Descrito lo anterior, se puede calcular la covarianza, la varianza y la *escala integral* de la componente  $\bar{Y}$  de la SRF con las siguientes fórmulas:

$$C_{\bar{Y}}(r) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_{-\pi/\lambda_1}^{\pi/\lambda_1} \dots \int_{-\pi/\lambda_m}^{-\pi/\lambda_m} \widehat{C}_Y(k) \exp(-ik \cdot r) d^m k \quad (\text{A.10})$$

$$\sigma_{\bar{Y}}^2 = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \int_{-\pi/\lambda_1}^{\pi/\lambda_1} \dots \int_{-\pi/\lambda_m}^{-\pi/\lambda_m} \widehat{C}_Y(k) d^m k \quad (\text{A.11})$$

$$I_{\bar{Y},1} = \frac{1}{\sigma_{\bar{Y}}^2} \int_0^\infty C_{\bar{Y}}(r, t) dr \quad (\text{A.12})$$

Dagan (Dagan, 1989) en su trabajo propuso capturar la totalidad de la variabilidad con el coeficiente de macrodispersión, es decir, considera que la variabilidad resuelta por la grilla numérica es nula, obteniéndose el siguiente tensor, válido para valores de  $\sigma_Y^2 < 1$ .

$$D_{\infty,ij} = \frac{U^2}{(2\pi)^{m/2}} \int_0^\infty \left[ \int_{-\infty}^\infty \dots \int_{-\infty}^\infty \exp(-ik_1 U \tau) \cdot \left(\delta_{i1} - \frac{k_1 k_i}{k^2}\right) \left(\delta_{j1} - \frac{k_1 k_j}{k^2}\right) \widehat{C}_Y(k) dk_1 \dots dk_m \right] d\tau \quad (\text{A.13})$$

donde  $U$  es la velocidad promedio del campo de velocidades en la dirección  $x_1$ ,  $\delta$  es el delta de Kronecker y con  $i, j=1, \dots, m$ . En su trabajo Rubin et al. (1999) obtiene la formulación para calcular la variabilidad que no es capturada por la grilla numérica, lo que queda definido por el siguiente coeficiente:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{ij}(t) = D_{\infty,ij} - \frac{U^2}{(2\pi)^{m/2}} \int_0^t \left[ \int_{-\pi/\lambda_1}^{\pi/\lambda_1} \cdots \int_{-\pi/\lambda_m}^{\pi/\lambda_m} \exp(-ik_1 U \tau) \right. \\ \left. \cdot (\delta_{i1} - \frac{k_1 k_i}{k^2})(\delta_{j1} - \frac{k_1 k_j}{k^2}) \widehat{C}_Y(k) dk_1 \dots dk_m \right] d\tau \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Esta derivación es válida para los supuestos anteriores si la pluma es ergódica respecto a  $I_{\bar{Y}}$ .

Es posible calcular el coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo para una covarianza exponencial del campo de conductividades hidráulicas considerando un medio anisotrópico de dos dimensiones. Para ello se considera que  $i = j = 1, 2$  según sea la componente que se quiera obtener, donde:

$$C_Y(r) = \sigma_Y^2 \exp\left(-\sqrt{\frac{r_1^2}{I_{Y,1}^2} + \frac{r_2^2}{I_{Y,2}^2}}\right) \quad (\text{A.15})$$

con  $I_{Y,1}$  y  $I_{Y,2}$  la escala integral correspondiente a la dirección  $x_1$  y  $x_2$  respectivamente. Para esta covarianza es posible calcular su espectro de potencia en el espacio de Fourier, el cual queda descrito como sigue:

$$\widehat{C}_Y(k) = \frac{\sigma_Y^2 I_{Y,1}^2 I_{Y,2}^2}{[1 + (k_1^2 I_{Y,1}^2) + (k_2^2 I_{Y,2}^2)]^{3/2}} \quad (\text{A.16})$$

Utilizando la ecuación (A.16) y sustituyéndola en (A.14) se obtienen:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{11}(t) = D_{\infty,11} - \frac{2\sigma_Y^2 I_{Y,1} I_{Y,2} U_1^2}{\pi} \int_0^t \int_0^{\pi/\lambda_1} \int_0^{\pi/\lambda_2} \left(1 - \frac{k_1^2}{k_2^2}\right)^2 \\ \times \frac{\cos(U_1 k_1 t')}{[1 + (I_{Y,1} k_1)^2 + (I_{Y,2} k_2)^2]^{3/2}} dk_1 dk_2 dt' \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

donde  $D_{\infty,11}$  es el coeficiente de macrodispersión calculado utilizando la ecuación (A.13). Dagan(1989, p. 328) presenta la solución de este coeficiente para el caso en 2-D con un flujo planar en la dirección horizontal. Al reemplazar la ecuación (1.11) en la solución de Dagan, es posible obtener valores del coeficiente de macrodispersión para las distintas direcciones del problema, asumiendo un campo con una covarianza exponencial:

$$\frac{D_{\infty,11}(t')}{U_1 \sigma_Y^2 I_{Y,1}} = 1 + \frac{3}{2 \exp(t') t'^3} [2(\exp(t') - t' - 1) - \exp(t') t'^2] \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{D_{\infty,22}(t')}{U_1\sigma_Y^2 I_{Y,1}} = \frac{6[1+t' - \exp(t')] + 2t'^2 + \exp(t')t'^2}{2\exp(t')t'^3} \quad (\text{A.19})$$

donde  $t' = tU_1/I_{Y,1}$ . Luego, es posible integrar la ecuación (A.17) para un tiempo  $\tau$  y sobre  $k_2$ , obteniéndose la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} D_L^b(t) = \tilde{D}_{11}(t) = & D_{\infty,11} - \frac{\sigma_Y^2 I_{Y,1} I_{Y,2} U_1}{\pi} \int_0^{\pi/\lambda_1} \sin(U_1 k_1 t) \\ & \times \left[ \frac{a(2a^2 + 3k_1^2 + 2I_{Y,1}^2 a^2 k_1^2 + I_{Y,2}^2 a^2 k_1^2 + 3I_{Y,1}^2 k_1^4)}{k_1(1 + I_{Y,2}^2 a^2 + I_{Y,1}^2 k_1^2)^{1/2} (a^2 + k_1^2) (1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^2} \right. \\ & \left. - \frac{3(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2)}{(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^{5/2}} \tan^{-1} \left( \frac{a(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^{1/2}}{k_1(1 + I_{Y,2}^2 a^2 + I_{Y,1}^2 k_1^2)^{1/2}} \right) \right] dk_1 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

donde  $a = \pi/\lambda_2$ . El coeficiente de “macrodispersión de bloque efectivo” no es local, pero eventualmente debería llegar a un valor constante, que sería el límite Fickiano impuesto. La tasa a la que éste se aproxima a su valor límite asintótico es variable y depende inversamente del valor de  $\lambda$ . A medida que la longitud característica del espectro de la escala pequeña de la heterogeneidad removida disminuye en magnitud, la pluma transportada (la cual contiene el rango completo de información) alcanzará su valor límite de dicho coeficiente mucho más rápido.

Para un valor de  $\lambda$  del orden de  $50 \cdot I_Y$ , el coeficiente  $\tilde{D}_{11}$  se aproxima al coeficiente de macrodispersión ( $\tilde{D}_{\infty,11}$ ) de Dagan (1984). Para este rango de valores, la velocidad es modelada a través del valor esperado, y la variabilidad espacial es capturada por el coeficiente de macrodispersión en su totalidad.

Siguiendo un procedimiento similar al anteriormente expuesto, pero considerando  $i = j = 2$ , es posible derivar la componente transversal del coeficiente de macrodispersión de bloque efectivo:

$$\begin{aligned} D_T^b(t) = \tilde{D}_{22}(t) = & D_{\infty,22} - \frac{\sigma_Y^2 I_{Y,1} I_{Y,2} U_1}{\pi} \int_0^{\pi/\lambda_1} \sin(U_1 k_1 t) \\ & \times \left[ -\frac{ak_1(1 + 3I_{Y,2}^2 a^2 + I_{Y,1}^2 k_1^2 + 2I_{Y,1}^2 k_1^2)}{(1 + I_{Y,2}^2 a^2 + I_{Y,1}^2 k_1^2)^{1/2} (a^2 + k_1^2) (1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^2} \right. \\ & \left. + \frac{(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 + 2I_{Y,2}^2 k_1^2)}{(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^{5/2}} \tan^{-1} \left( \frac{a(1 + I_{Y,1}^2 k_1^2 - I_{Y,2}^2 k_1^2)^{1/2}}{k_1(1 + I_{Y,2}^2 a^2 + I_{Y,1}^2 k_1^2)^{1/2}} \right) \right] dk_1 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Para valores de  $\lambda$  razonables y comunes, el límite asintótico para  $\tilde{D}_{11}$  y  $\tilde{D}_{22}$  son alcanzados luego de poco tiempo transcurrido desde el inicio de la simulación del transporte (ver Figura

A.13). Para modelar el comportamiento de una pluma, ya sea su dispersión o valores asociados a la variación de la posición de ésta para un tiempo relativamente largo, se justifica *a priori* el utilizar el valor asintótico de  $\tilde{D}_{11}$  y  $\tilde{D}_{22}$ , sin embargo esta aproximación sobrestima los procesos asociados a mezcla y dilución en medios heterogéneos permeables.

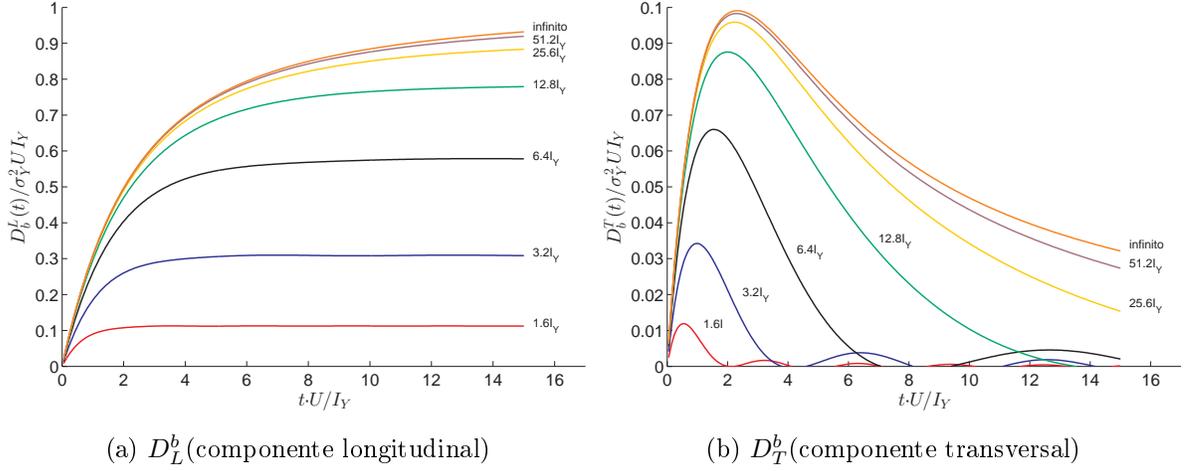


Figura A.13: Coeficiente  $D_b(t)$  versus el tiempo para distintos valores de  $\lambda$  considerando  $\sigma_Y^2 = 1$

### Escala integral y varianza de la variabilidad capturada por la grilla numérica

Para un modelo con covarianza exponencial e isotrópica, el modelo es descrito como:

$$C_Y(r_1, r_2) = \sigma_Y^2 \exp(-r'); \quad r' = \sqrt{\frac{r_1^2 + r_2^2}{I_Y^2}} \quad (\text{A.22})$$

El cual tiene el siguiente espectro de potencia:

$$\widehat{C}_Y(k_1, k_2) = \frac{\sigma_Y^2 I_Y^2}{[1 + (k_1^2 + k_2^2) I_Y^2]^{3/2}} \quad (\text{A.23})$$

Reemplazando (A.23) en (A.11), y asumiendo que  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ , se puede obtener luego de la integración la siguiente ecuación:

$$\sigma_{\bar{Y}}^2 = \frac{2}{\pi} \cot^{-1}\left(\frac{\lambda}{\pi^2 I_Y^2} \sqrt{2\pi^7 I_Y^2 + \lambda^2}\right) \sigma_Y^2 \quad (\text{A.24})$$

La escala integral de  $\bar{Y}$  a lo largo de la dirección  $x_1$  es obtenida sustituyendo (A.10) en (A.12)

e integrando, obteniéndose la siguiente formula:

$$I_{\bar{Y},1} = \frac{\pi^2 I_Y^2}{2\sqrt{\pi^2 I_Y^2 + \lambda^2} \cot^{-1}\left[\frac{\lambda}{I_Y^2 \pi^2} \sqrt{2\pi^2 I_Y^2 + \lambda^2}\right]} \quad (\text{A.25})$$

Descrito lo anterior es posible calcular la escala integral de  $\tilde{Y}$ , utilizando una metodología similar.

Finalmente, algunas de las características de los coeficientes de macrodispersión se pueden resumir a continuación:

1. Los coeficientes de dispersión dependen de la escala de la pluma y de las condiciones de flujo.
2. El tensor de macrodispersión  $D_{\infty,ij} = D_b(\infty)$  puede ser utilizado para modelar la tasa de deformación de la pluma de los soluto, si, estos cumplen con la condición de ergodicidad.
3.  $D_{\infty,ij}$  depende de las condiciones de flujo.
4. Un cuerpo de solutos se acerca a la condición de ergodicidad, si, éste incrementa sus dimensiones.
5. Una pluma ergódica es aquella que; tiene dimensiones mucho más grandes en la dirección normal al flujo con respecto a la longitud de correlación del desplazamiento Lagrangiano advectivo  $X$  para la dirección principal, o en su defecto, dimensiones mayores que el largo característico de correlación del medio ( $I_Y$ ).
6. Los coeficientes de macrodispersión son conocidos de manera determinista debido a que, la evolución de los momentos espaciales es conocida de manera determinista.

## A.5. Procesos de mezcla y reacción

### A.5.1. Derivación de transporte reactivo desde transporte conservativo

En esta sección se explica el método utilizado por los autores Cirpka y Valocchi (2007), el cual fue adaptado a las simulaciones realizadas en esta tesis para derivar el transporte reactivo, desde el caso del transporte conservativo.

La derivación se basa en el principio de que ciertas sumas de concentraciones no cambian con las reacciones, comportándose como componentes conservativos. Utilizando la condición de estado estacionario para la masa, y basándose en relaciones algebraicas que vinculan la concentración de los compuestos reactantes. A través de la concentración total y las relaciones auxiliares entre compuestos, es posible calcular las concentraciones de todos los compuestos en la fase acuosa, pudiendo obtenerse la producción de masa, mediante un post-procesamiento de datos obtenidos para el caso del transporte conservativo.

Para el transporte se considera un flujo paralelo en dos dimensiones, donde el compuesto se inyecta en una línea perpendicular al eje principal del flujo. Para el transporte reactivo, se considera una reacción irreversible, donde los compuestos  $A$  y  $B$  reaccionan instantáneamente formando un compuesto  $C$ :



$$-m \frac{dA}{dt} = -n \frac{dB}{dt} = p \frac{dC}{dt} = r \quad (\text{A.27})$$

donde  $m, n$  y  $p$  son los coeficientes estequiométricos de la reacción. En general cuando existen modelaciones de reacciones, la componente **A** está definida como la fuente de carbono del sistema o como el donador de electrones, mientras tanto la componente **B** es definida como el aceptor de electrones, pudiendo ser oxígeno disuelto o nitrógeno, y el compuesto **C**, es el metabolito como es por ejemplo el carbón inorgánico. Para la reacción bimolecular consideramos la siguiente ley:

$$r = k_r AB \quad (\text{A.28})$$

con  $k_r$  constante. Luego, las ecuaciones que gobiernan el problema son las siguientes:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + V \frac{\partial A}{\partial x} - D \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = -mr \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} + V \frac{\partial B}{\partial x} - D \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} = -nr \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = pr \quad (\text{A.31})$$

donde  $V$  es el tensor de velocidades y se asume que el coeficiente de difusión es el mismo para todas las especies.

Se realiza un cambio de variables para proseguir con la transformación:

$$F = A - \frac{m}{n} B \quad (\text{A.32})$$

$$G = A + \frac{m}{p} C \quad (\text{A.33})$$

Siendo posible definir las ecuaciones de transporte siguientes:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + v \frac{\partial F}{\partial x} - D \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{A.34})$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} + v \frac{\partial G}{\partial x} - D \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{A.35})$$

Por lo tanto, se asume que la reacción es rápida e irreversible, y que los reactantes se mezclan completamente formando un producto  $\mathbf{C}$ . Bajo esta condición, los reactantes  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  no pueden existir en la misma localización para el mismo tiempo. Una vez resuelto el transporte conservativo para la variable  $\mathbf{F}$ , es posible obtener los valores de  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  como sigue:

$$A = F; \quad B = 0 \quad \text{si } F \geq 0 \quad (\text{A.36})$$

$$A = 0; \quad B = -\frac{n}{m} F \quad \text{si } F < 0 \quad (\text{A.37})$$

para obtener la producción de compuestos es necesario solucionar la ecuación de transporte para  $\mathbf{G}$ , la cual difiere de la solución de  $\mathbf{F}$  en la condición inicial y de borde del problema. De la ecuación (A.33) es posible obtener la producción de compuestos una vez conocida la solución de la variable  $\mathbf{G}$  obteniéndose:

$$C = \frac{p}{m}(G - A) \quad (\text{A.38})$$

El valor de  $\mathbf{F}$  es conocido en la literatura como *Mixing Ratio*, el cual es un número adimensional que define la abundancia de un componente particular de la mezcla en relación a los demás componentes del sistema.

### A.5.2. Aplicación de las condiciones de borde e iniciales

Utilizando el método descrito en la sección A.5.1, se procede a derivar el transporte reactivo desde el caso conservativo.

Asumiendo que se ha resuelto el problema de transporte conservativo para un compuesto  $\mathbf{S}$ , y que la pluma de este compuesto tiene como condición inicial una concentración dada en las coordenadas donde se ubica inicialmente, condición definida como  $S(x_{pluma}, y_{pluma}, 0) = S_0 = 1$ , y en la zona externa a la pluma las concentraciones son nulas para el compuesto, quedando  $S(x_{ext}, y_{ext}, 0) = 0$ . Por lo tanto, es conocido el valor de  $S(x, y, t)$  para todo el dominio y tiempo simulados.

Descrito lo anterior, es posible derivar el transporte reactivo. Por lo tanto, se designa que las variables del problema reactivo obtengan valores acordes a la simulación del problema conservativo. Para la zona que contiene la pluma se tienen los siguientes valores:

1.  $A = A_0$  y  $B = 0$ , para el dominio inicial de la pluma
2.  $A = 0$  y  $B = B_0$ , para el resto del dominio.

donde  $A_0 = B_0 = 1$  y asumiendo estequiometría 1:1, implica que  $m = n = -p = 1$ .

Luego, es posible calcular las funciones del cambio de variables  $F(x,y,t)$ , y posteriormente, obtener  $G(x,y,t)$  resolviendo el transporte reactivo utilizando las ecuaciones (A.9), (A.10), (A.13) y (A.14), obteniéndose lo siguiente:

$$F = A - B \tag{A.39}$$

$$A = F; \quad B = 0 \quad \text{si} \quad F \geq 0 \tag{A.40}$$

$$A = 0; \quad B = -F \quad \text{si} \quad F < 0 \tag{A.41}$$

Por lo tanto, la función  $F(x,y,t)$ , que satisface las condiciones inicial planteadas y el cambio de variable tiene la siguiente forma:

$$F(x, y, t) = 2 \cdot S(x, y, t) - S_0 \tag{A.42}$$

el valor de  $G(x,y,t)$ , se obtiene utilizando la ecuación (A.33):

$$G = A - C \tag{A.43}$$

reemplazando en la ecuación (A.38) se obtiene que:

$$C = -(G - A) \tag{A.44}$$

finalmente la producción de masa se obtiene despejando de la ecuación (A.44) las condiciones iniciales del transporte:

$$C(x, y, t) = S(x, y, t) - A(x, y, t) \tag{A.45}$$

## A.6. Métodos numéricos utilizados

### A.6.1. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

El método numérico llamado “Smoothed Particle Hydrodynamics” (SPH) es un método basado en el enfoque Lagrangiano y fue desarrollado por Lucy (1977) y por Gingold y Monaghan (1977) para resolver problemas de dinámica de fluidos en astrofísica de galaxias. Este método prescinde de la utilización de una grilla numérica para el cálculo del transporte, siendo ésta una de sus principales características al estar libre de difusión numérica. Este enfoque está basado en la utilización de partículas las cuales se mueven con el fluido y cuentan con un volumen y masa dada, simulando el transporte de especies en el medio acuoso. El movimiento advectivo es calculado en las partículas a través de líneas de flujo y la dispersión es modelada como un proceso Fickiano asegurando el intercambio de masa.

En la formulación estándar del SPH, se realiza una “smoothed interpolation”, tomando un valor  $A_S(r)$  de la variable  $A(r)$  que es definida por la integral:

$$A_S(r) = \int A(r')W(r - r', h)dr' \quad (\text{A.46})$$

donde  $W(r - r', h)$  es la función de kernel con una smoothing length (largo de suavizado) de largo  $h$ , que satisface las siguientes restricciones (Tartakovsky et al., 2007):

$$\int W(r - r', h)dr = 1 \quad (\text{A.47})$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(r - r', h) = \delta(r - r') \quad (\text{A.48})$$

cuando  $h \rightarrow 0$  en el límite,  $W$  es el delta de Dirac y  $A_S(r) \rightarrow A(r)$ .

Debido a sus ventajas prácticas, es recomendado utilizar polinomios del tipo *spline* ya que ofrecen soporte compacto para distancias inferiores a  $2h$  (Monaghan, 1992).

La aproximación numérica para la ecuación (A.46) es:

$$A_s(r_a) = \sum_b \frac{A(r'_b)}{p_b} W(|r - r'_b|) \quad (\text{A.49})$$

donde  $p_b$  es la densidad espacial de partículas (también conocido como “spatial particle density”), la que es calculada considerando una distancia a la redonda de la partícula con radio

$r_b$ . Este valor puede aproximarse como:

$$p(r) = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} W(r - r_j) \quad (\text{A.50})$$

Una vez calculadas las aproximaciones de primer y segundo orden para las derivadas, se introduce la función escalar  $F(r)$ , que es interpretada como el gradiente del “spherically symmetric kernel”, valor que se relaciona de la siguiente manera:

$$\nabla W(r) = rF(r) \quad (\text{A.51})$$

Para una partícula  $i$  la cual es evaluada en un tiempo  $t$  en una posición  $x_i$ , es posible aproximar la solución de la concentración a través del método de integración Monte-Carlo:

$$C(x_i, t) = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p(x_i)} \frac{C(x_j)W(x_i - x_j)}{p(x_j)} \pm \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N_p}}\right) \quad (\text{A.52})$$

donde  $W$  es la función de kernel con soporte compacto  $H$  centrada en  $x = x_i$ , y  $N_p(x_i)$  es el número de partículas contenido en  $H$ .

Para la ecuación que aproxima la integral de los flujos dispersivos se puede revisar (Herrera et al., 2009):

$$\frac{dC_i}{dt} = 2 \sum_i^{N_p(x_i)} \frac{1}{p_{ij}} D_{ij} (C_j - C_i) \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|^2} \cdot \nabla W(r_{ij}) \quad (\text{A.53})$$

donde  $C_i$  es la concentración de la partícula  $i$  en un tiempo  $t$  en una posición  $x_i$  la que presenta una tasa de variación  $dC_i/dt$ . Además  $r_{ij}$  es la distancia entre la partícula  $i$  de la partícula  $j$  y  $\nabla W$  es el gradiente de la función de kernel  $W$ . También se definen las medias armónicas para la densidad de partículas y para el coeficiente de difusión,  $p_{ij} = 2p_i p_j / (p_i + p_j)$  y  $D_{ij} = 2D_i D_j / (D_i + D_j)$  respectivamente. Estos valores aseguran un intercambio simétrico de masa entre las partículas involucradas.

Como ventaja del método numérico es la posibilidad de seleccionar la estabilidad de la solución, utilizando la siguiente relación:

$$\Delta t \leq \frac{\varepsilon h^2}{D} \quad (\text{A.54})$$

para las simulaciones realizadas en esta tesis se utiliza  $\varepsilon = 0,1$  (Herrera et al., 2009) como un valor que garantiza la estabilidad del método. Con este valor es posible seleccionar un

“smoothing length”  $\mathbf{h}$  tal que el método sea estable para cualquier valor del coeficiente de dispersión y tipo de transporte, sobretodo para el caso donde la advección controla el transporte sobre la dispersión local y genera cambios bruscos en la concentración.

La principal fuente de error del método es debido al número de partículas contenido en el volumen  $H$  de  $W$ . Una distribución desigual lleva a un incremento del error al computar (A.52) y (A.53), error que es atenuado en parte por la ponderación  $\omega(x_j)$ . Esto es particularmente importante si se incrementa la heterogeneidad del medio (controlado por el valor de  $\sigma_Y^2$ ) y por consecuencia el desorden de las partículas respecto a su estado inicial (generalmente una distribución uniforme). Otro punto en contra es que es computacionalmente demandante debido a que el algoritmo debe rastrear todas las partículas vecinas a la partícula  $i$  dado un valor de  $\mathbf{h}$ , para todas los elementos del dominio.

A continuación se presentan valores del kernel que están definidos por una función *spline* cúbica:

$$W(q) = \frac{K_\nu}{h^\nu} \begin{cases} \frac{2}{3} - q^2 + \frac{1}{2}q^3 & \text{para } 0 \leq q < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - q)^3 & \text{para } 1 \leq q < 2 \\ 0 & \text{para } q > 2 \end{cases} \quad (\text{A.55})$$

donde  $q = |r_{ij}|/h$  y  $K_\nu$  es la constante de normalización que depende de la dimensión del espacio  $\nu$ .

### A.6.2. Random Walk Particle-Tracking (RWPT)

El método numérico “Random Walk Particle-Tracking” (RWPT) es conocido por su gran versatilidad al simular transporte de solutos en medios permeables. El método evita resolver la ecuación de transporte directamente, por lo cual está libre de dispersión numérica y de oscilaciones artificiales. Debido a la fácil implementación en todo tipo de problemas de transporte al utilizar partículas con masas discretas, automáticamente se logra satisfacer la conservación de masa para todo el sistema (Salamon et al., 2006b). Las partículas se mueven principalmente por la velocidad de advección del flujo en el medio y secundariamente debido a pequeños saltos aleatorios independientes para cada una, lo que modela los procesos de transporte dispersivo del sistema. La estadística de los saltos aleatorios corresponde a la estadística de las propiedades dispersivas. Esta componente es característica del movimiento Browniano, la que es utilizada para simular la dispersión hidrodinámica. (Salamon et al. (2006b)).

La trayectoria de las partículas queda definida por:

$$X_p(t + \Delta t) = X_p(t) + A(X_p, t)\Delta t + B(X_p, t) \cdot \xi(t)\sqrt{\Delta t} \quad (\text{A.56})$$

donde  $X_p(t)$  es la posición de la  $p$ -ésima partícula en el tiempo  $t$ .  $A$  es el vector de giro que toma en cuenta el efecto del campo de velocidades y el efecto de la divergencia del tensor de dispersión  $D$ ,  $B$  es la matriz de desplazamiento la cual depende de la velocidad y dispersión y  $\xi(t)$  es el arreglo de la desviación aleatoria estándar que tiene media cero y una varianza unitaria. Cuando  $N_p \rightarrow \infty$ , es posible obtener la solución analítica de la ecuación de Advección-Difusión.

La concentración media de los solutos es calculada tomando la masa media contenida en todas las partículas, por lo tanto, el valor de la concentración es función del número de partículas involucradas en la modelación numérica, de su volúmenes y de su distribución espacial en el medio.

El principal problema con este método es el gran número de partículas requeridas para simular correcta y precisamente el transporte de especies que presenten mezcla difusiva en medios heterogéneos u homogéneos. Por lo tanto al aumentar el número de partículas se disminuye el error del método, teniendo como consecuencia un aumento significativo del tiempo de cálculo por paso resuelto. Es necesario agregar un volumen de regulación de partículas (zona buffer) para una correcta caracterización de la difusión y mezcla, pudiendo capturar las variaciones de concentración en los bordes exteriores de la pluma, los cuales son importantes cuando existen procesos de dilución.

Cuando se simulan medios permeables heterogéneos, los soluto pierden rápidamente su orden inicial debido a la heterogeneidad del medio. Esto tiene como consecuencia que existan zonas en el dominio donde no se cuente el número suficiente de partículas para diluir e intercambiar masa, especialmente para tiempos largos de resolución donde el desorden se incrementa en relación al grado de heterogeneidad del medio. Debido a lo anterior el tamaño de la zona buffer debe incrementarse inicialmente si el tiempo de simulación es extenso. Además al aumentar el número de partículas, las fluctuaciones estadísticas son inversamente proporcionales a la raíz cuadrada del número de partículas en la celda numérica (Kinzelbach, 1988).

## A.7. Comparación del método numérico de resolución: Pollock vs Explícito

En este anexo se probó la eficiencia y exactitud de la solución obtenida al utilizar dos métodos de resolución numérica distintos, los cuales son; el método semi-analítico Pollock (1988), y, un método Explícito (Euler adaptativo, (Herrera, 2009)). Utilizando los parámetros indicados en la Tabla 4.1, se analizó la utilización de estos dos métodos numéricos, probando tres casos: una grilla fina de velocidades, una grilla gruesa de velocidades (64 veces más grande) con un  $D_b$  variable para cada celda y el último es una grilla gruesa de velocidades con un  $D_b$  constante para cada celda. Los resultados se presentan en la Figura A.14 y corresponde al índice de dilución.

De los resultados obtenidos se encontró que el método de Pollock funciona más rápido que el método explícito al resolver una simulación para un medio homogéneo, obteniéndose la misma solución en ambos métodos. Sin embargo, al simular el transporte de solutos en un medio heterogéneo (A.14), la solución obtenida con Pollock diverge de la solución del método Explícito, considerada la más exacta. Pese a que Pollock presenta una mayor velocidad de cómputo, entrega un resultado que presenta un error asociado al método, esto debido a que el método filtra mucha variabilidad del campo de velocidades simulado. Por lo cual, podría ser una fuente agregada de error. Este comportamiento se repite independiente del tipo de caso analizado.

Una de las principales motivaciones de este trabajo de tesis es, analizar la pérdida de variabilidad del campo de velocidades al filtrarlo, por lo cual, si se utiliza Pollock, se estará aumentando aún más este efecto indeseado. Por lo tanto, se recomienda utilizar un método Explícito de resolución, el cual entrega un resultado preciso sin aumentar el tiempo de cálculo excesivamente.

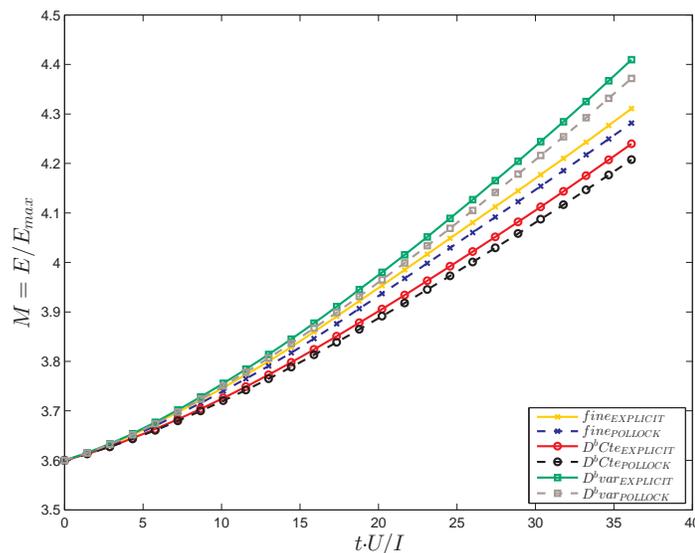


Figura A.14: Comparación entre los métodos de resolución numérica Pollock y Explícito.

## A.8. Resultados adicionales

### A.8.1. Tasa de disipación escalar (Scalar dissipation rate)

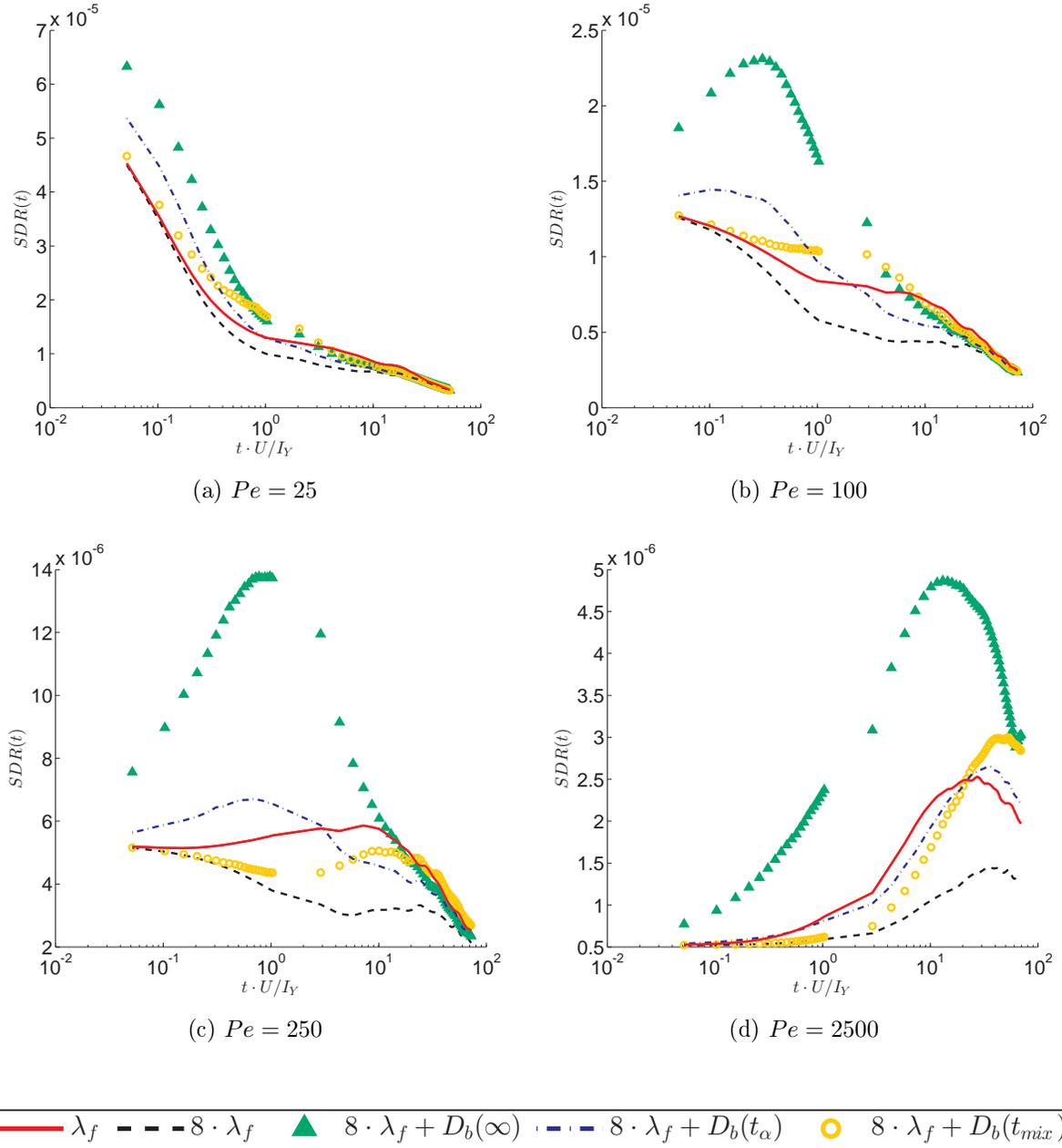


Figura A.15: Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la tasa de disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

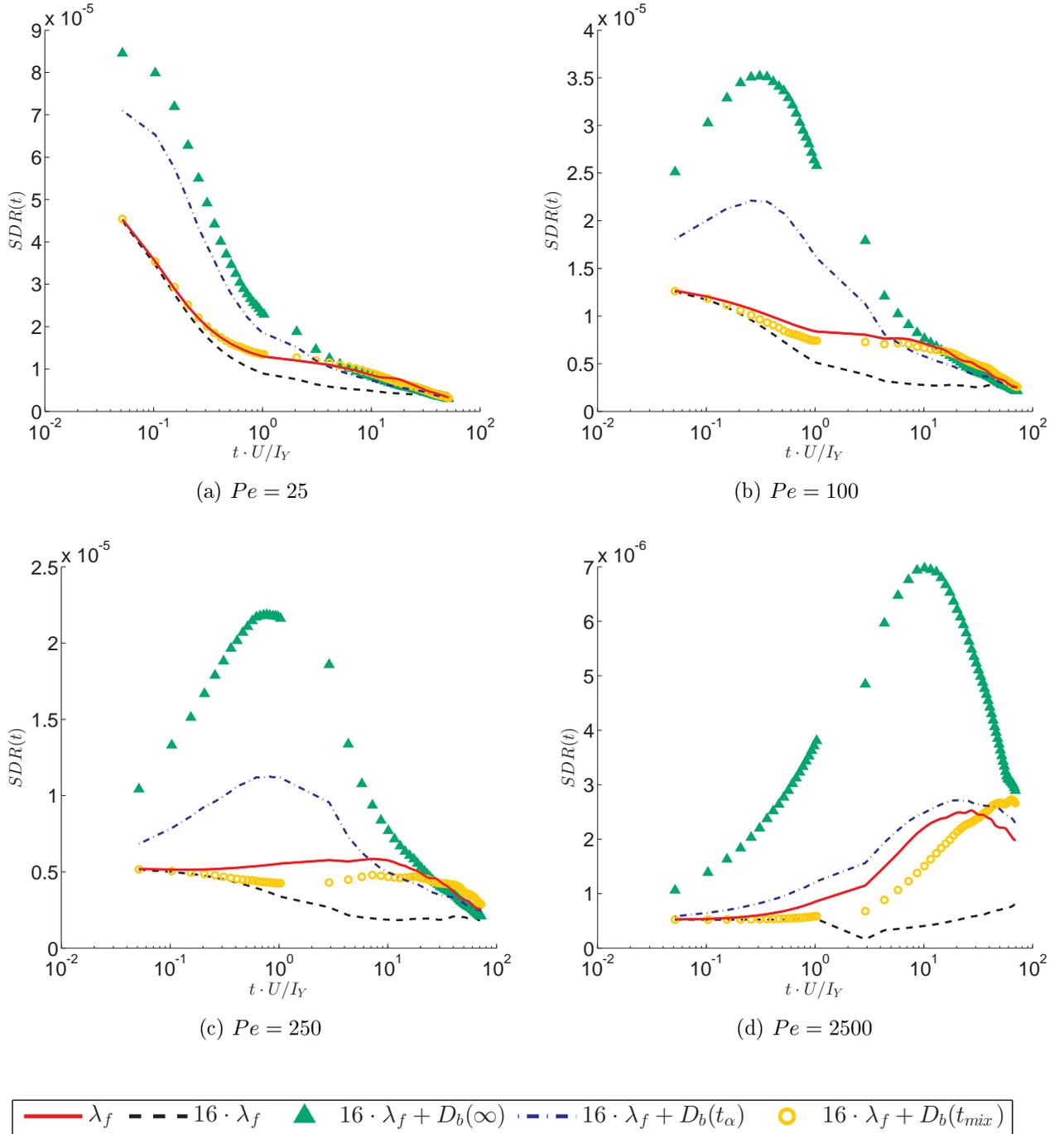


Figura A.16: Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la tasa de disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

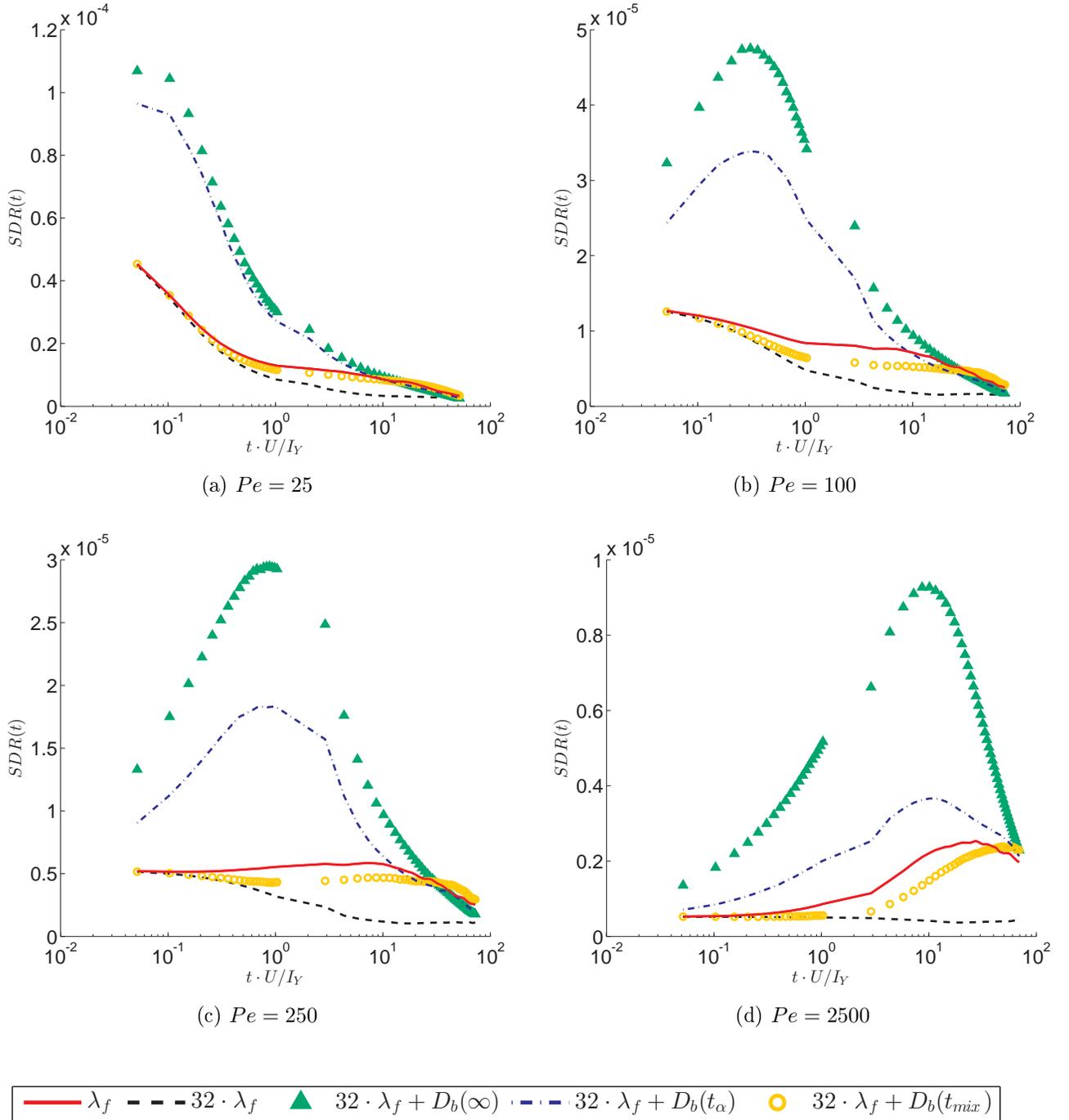


Figura A.17: Resultados de la tasa de disipación escalar para el promedio de 3 realizaciones del transporte conservativo, considerando diferentes valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la tasa de disipación escalar adimensionalizada por su valor inicial versus el tiempo adimensional.

**A.8.2. Función de densidad de probabilidad de la concentración,**  
 $t \cdot U / I_Y = 35$  y 70

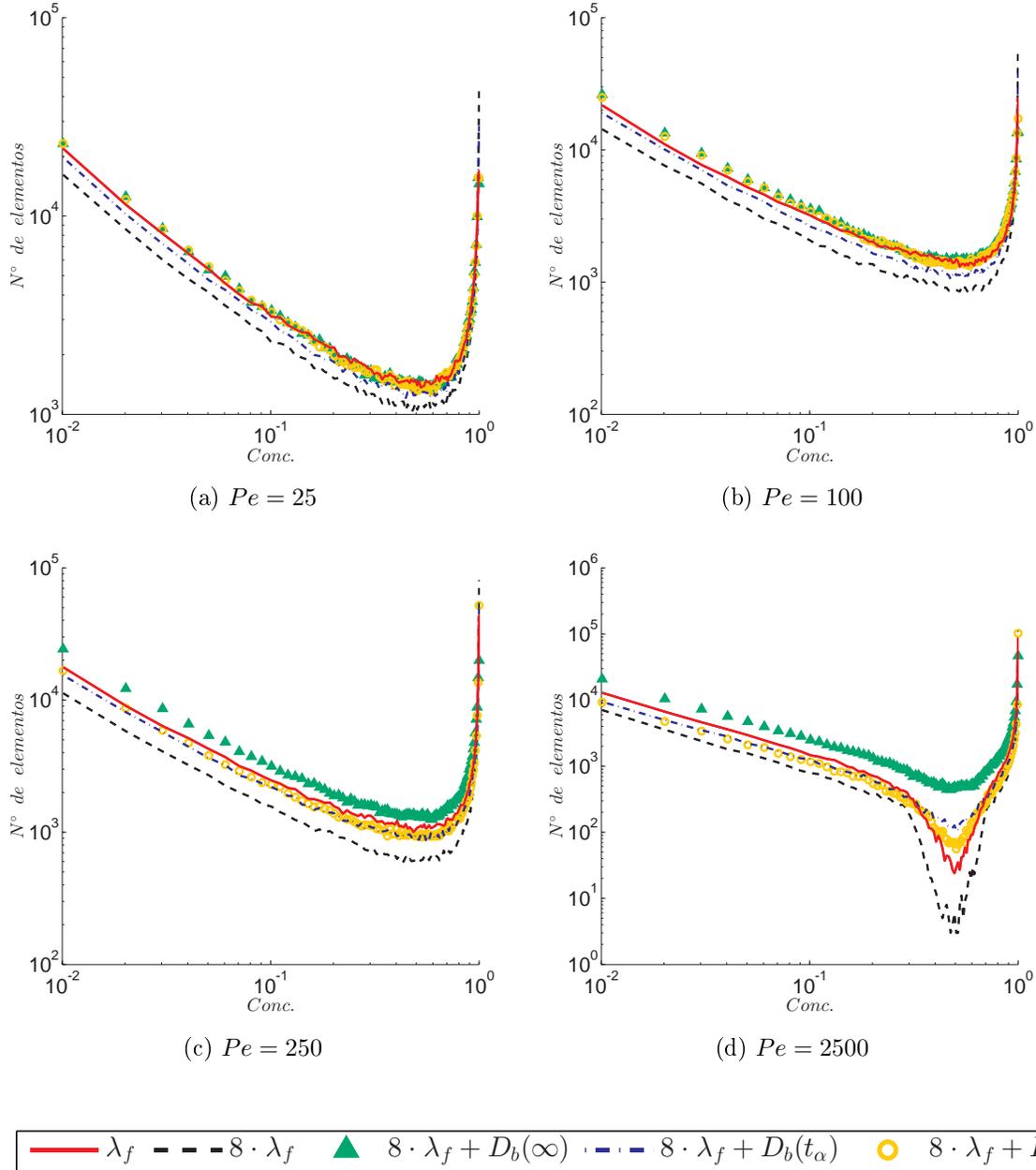


Figura A.18: Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización.

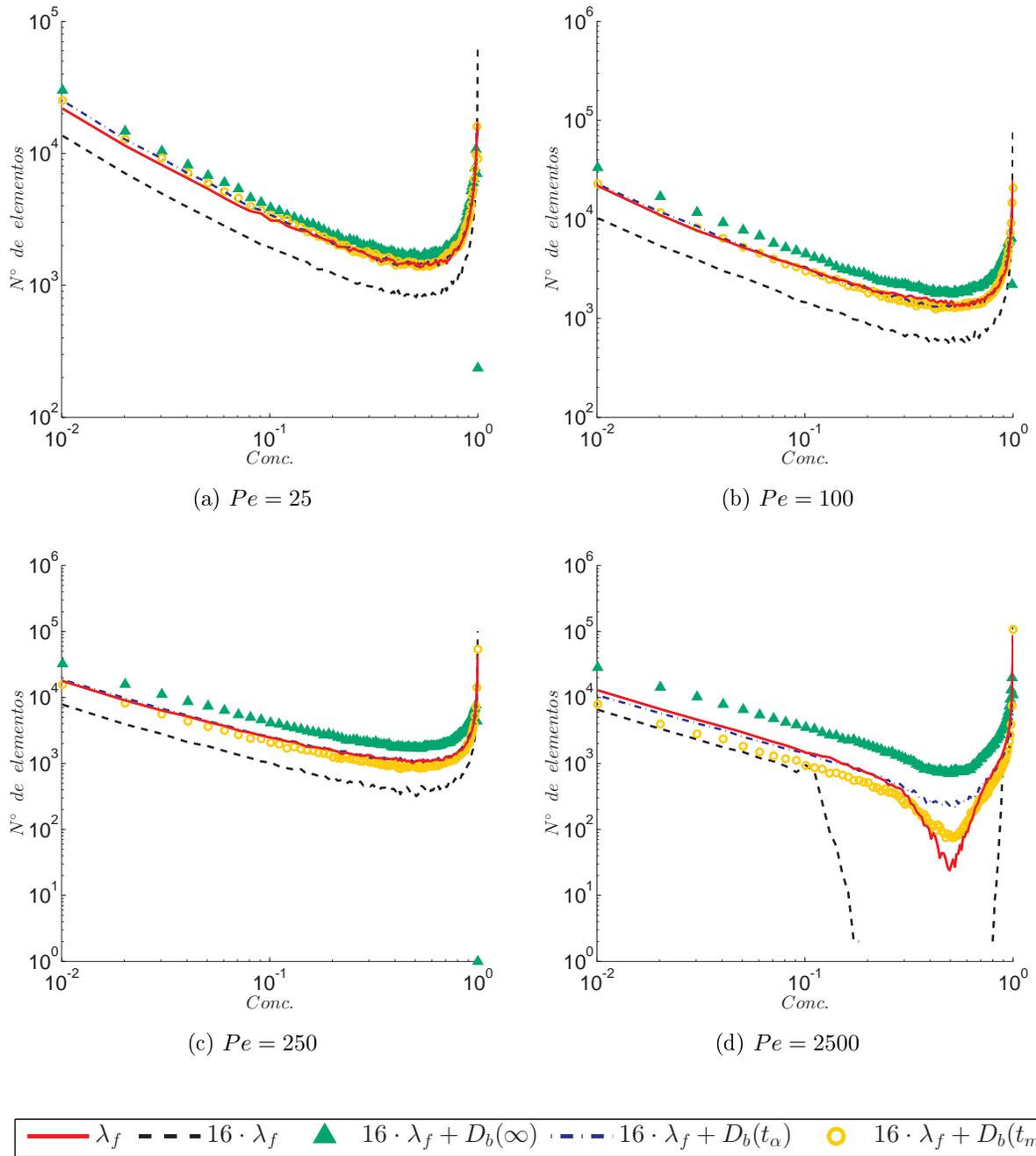


Figura A.19: Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización.

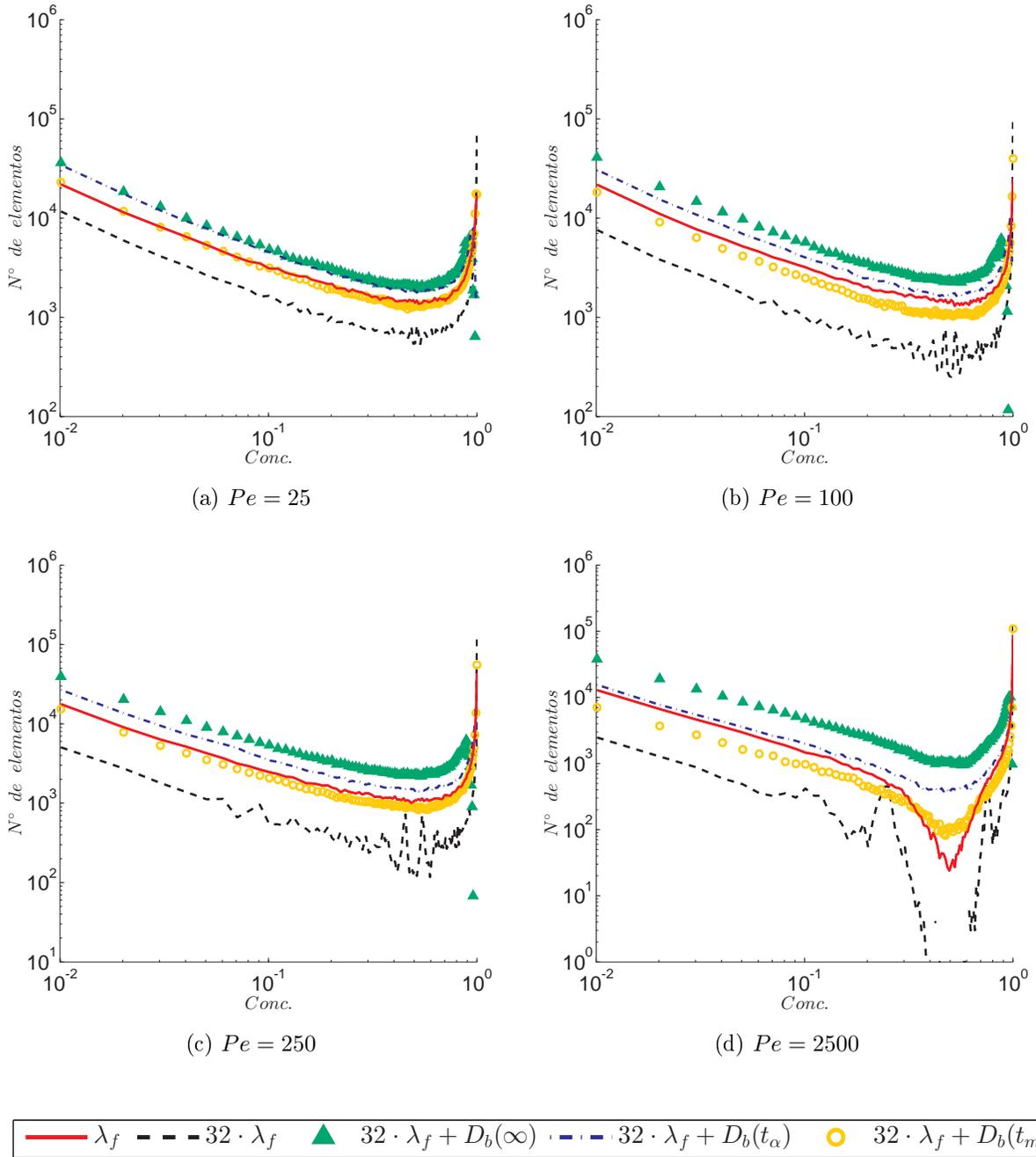


Figura A.20: Resultados de la función de densidad de la probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 35 escalas integrales para una realización.

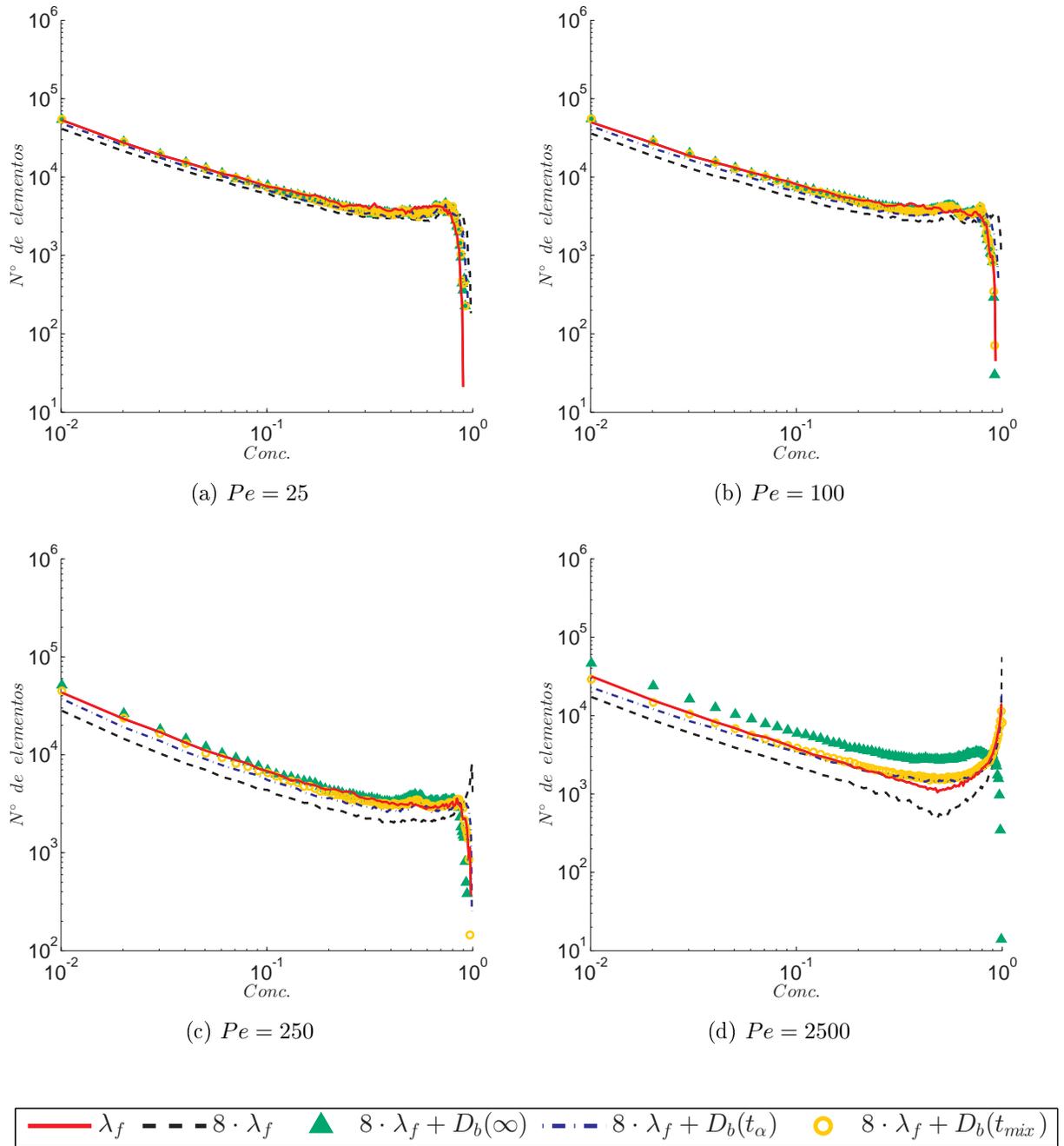


Figura A.21: Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 1,6 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización.

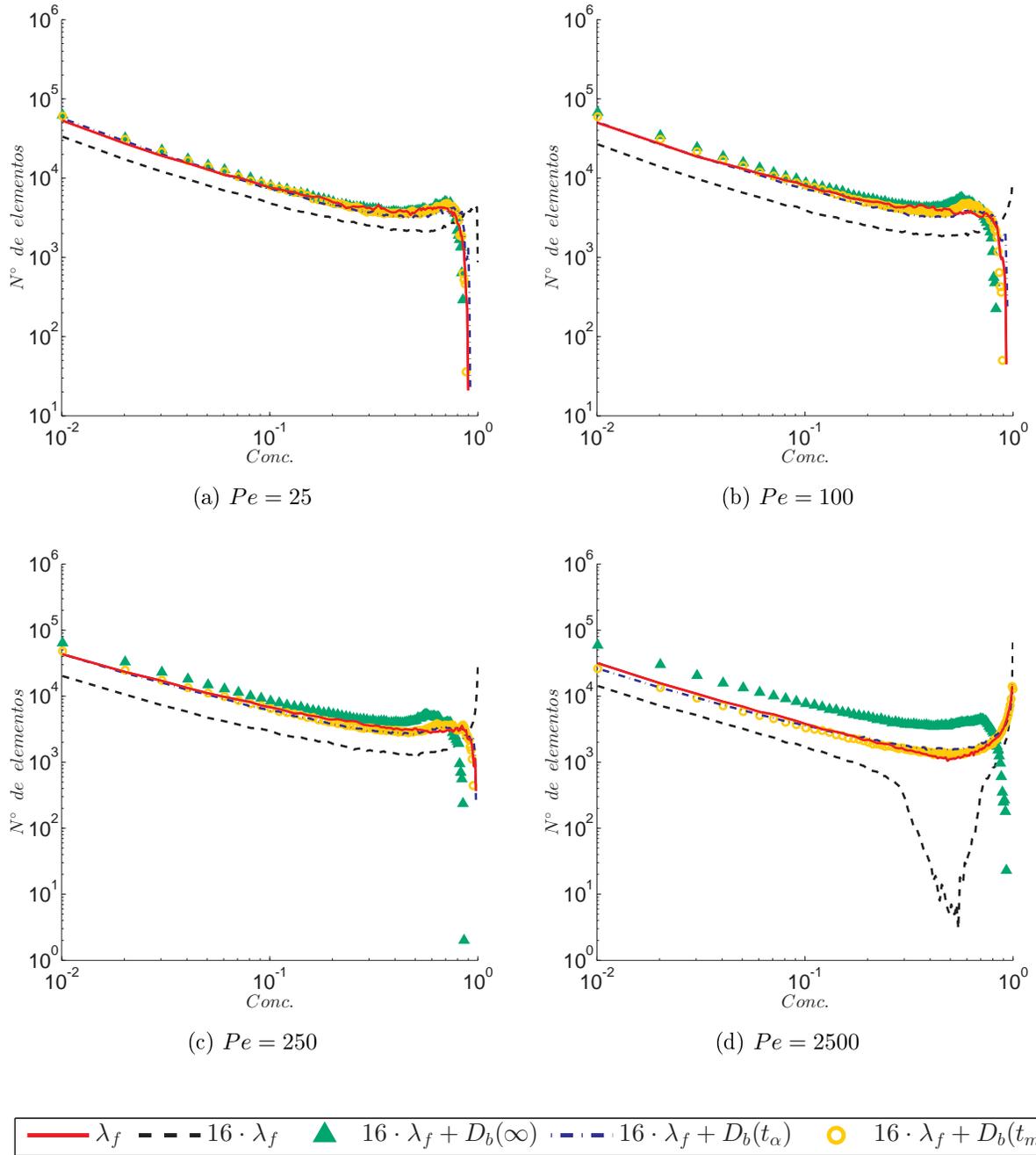


Figura A.22: Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 3,2 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización.

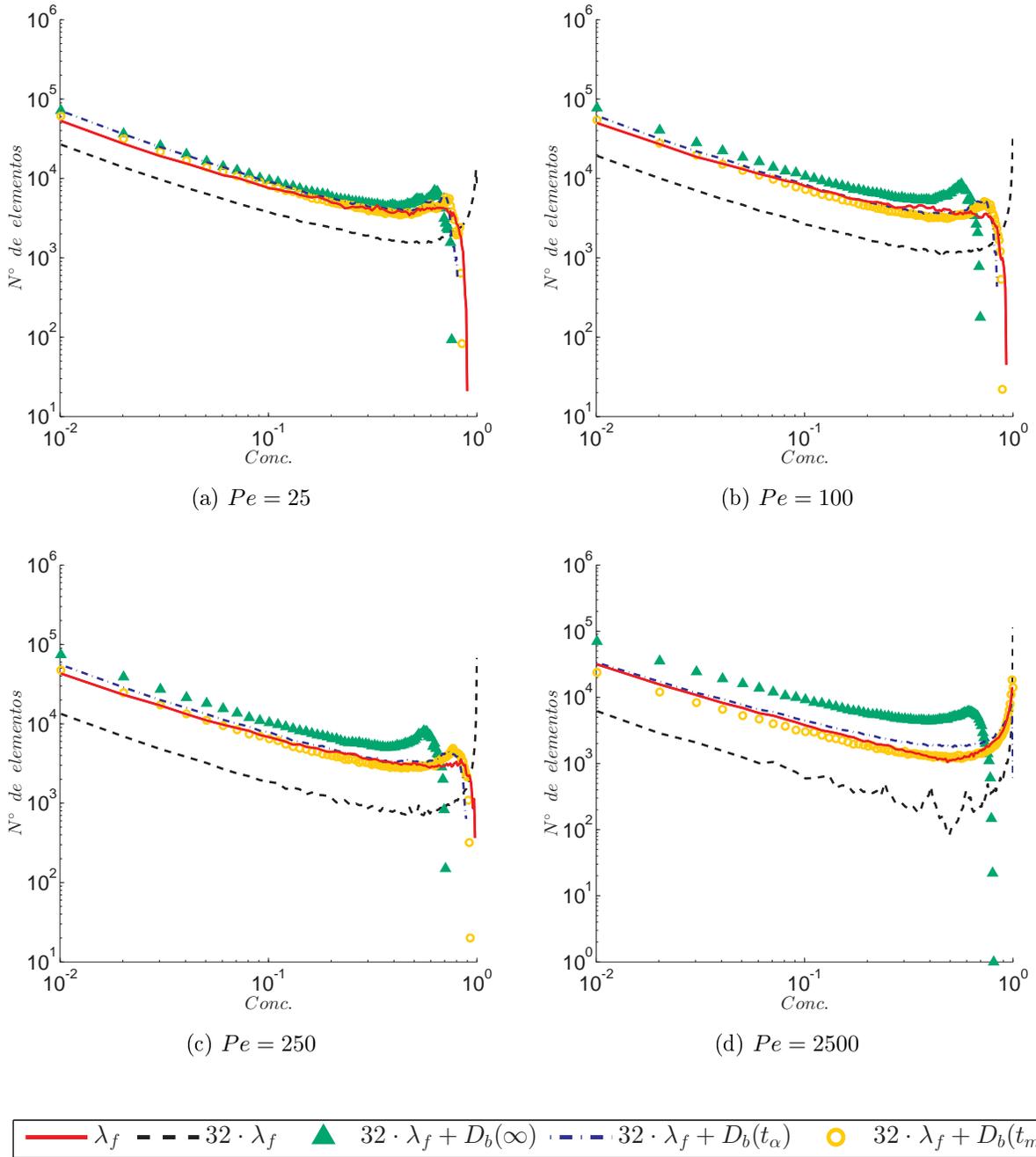


Figura A.23: Resultados de la función de densidad de probabilidad de la concentración para una realización del transporte conservativo, considerando distintos valores de  $Pe = (25; 100; 250; 2500)$  y un CGV con una discretización de  $\lambda_c = 6,4 \cdot I_Y$  de largo. Las Figuras muestran la distribución de las concentraciones para una pluma que ha recorrido 70 escalas integrales para una realización.

## Effective grid-dependent dispersion coefficient for conservative and reactive transport simulations in heterogeneous porous media

H21E-1105

Joaquín M. Cortínez<sup>1</sup>, Albert J. Valocchi<sup>2</sup> & Paulo A. Herrera<sup>1</sup>

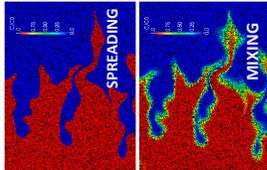
<sup>1</sup>Enviato: jpcortinez@ing.uchile.cl, valocchi@illinois.edu, pherrera@ing.uchile.com

<sup>2</sup>Civil Engineering, Universidad de Chile, Blanco Encalada 2002, Santiago, Reg. Metropolitana, Chile

<sup>3</sup>Department of Civil & Environment Engineering, University of Illinois, Urbana, Illinois, United States.

### I) Motivation

- 1.- Because of the finite size of numerical grids, it is very difficult to correctly account for processes that occur at different spatial scales to accurately simulate the migration of conservative and reactive compounds dissolved in groundwater.
- 2.- In one hand, transport processes in heterogeneous porous media are controlled by local-scale dispersion associated to transport processes at the pore-scale. On the other hand, variations of velocity at the continuum- or Darcy-scale produce spreading of the contaminant plume, which is referred to as macro-dispersion. Furthermore, under some conditions both effects interact, so that spreading may enhance the action of local-scale dispersion resulting in higher mixing, dilution and reaction rates.
- 3.- Traditionally, transport processes at different spatial scales have been included in numerical simulations by using a single dispersion coefficient. This approach implicitly assumes that the separate effects of local-dispersion ( $D_l$ ) and macro-dispersion ( $D^*$ ) can be added and represented by a unique effective dispersion coefficient.



### II) Objectives

- 4.- The selection of the effective dispersion coefficient for numerical simulations usually do not consider the filtering effect of the grid size over the small-scale flow features, we try to include this effect using a block-effective macrodispersion coefficient with our hybrid model. We test under which transport conditions of a uniform velocity field we can separate the effect of macro- and local-scale.

### III) Hybrid Model

5.- We have developed a multi-scale Lagrangian numerical method that allows using two different dispersion coefficients to represent local- and block-effective macro-scale dispersion. This technique considers fluid particles that carry solute mass and whose locations evolve according to a deterministic component given by the grid-scale velocity and a stochastic component that corresponds to a macro-dispersion coefficient.



- 6.- Mass transfer between particles due to local-scale dispersion is approximated by a reaction term, using a smoothed particle hydrodynamics (SPH) approximation.



### III) Numerical Experiment

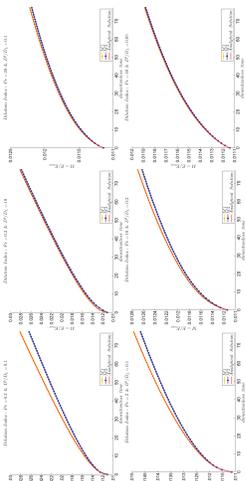
- 7.- "We use our model to test under which transport conditions the combined effect of local- and macro-dispersion are additive and can be represented by a single effective dispersion coefficient".

#### PROBLEM SETUP

- Constant head boundary conditions are imposed on the left and right boundaries and no flow on the top and bottom to obtain a quasi-1D mean flow from left to right, with a uniform velocity  $U|U|T$ .
- We used 100,000 particles for the simulation, which are initially distributed in a rectangular lattice of 5 meters spacing.
- In each case we use different values for the ratio between macrodispersion ( $D^*$ ) and local-dispersion ( $D_l$ ) coefficient, but always  $D = D^* + D_l$  (all dispersion coefficient use are isotropic).
- We simulate different scenarios using:
  - M1: single effective dispersion coefficient (D) solve using SPH approximation.
  - M2: two dispersion coefficient (new approach), to represent local- and macro-scale dispersion effect separately ( $D_l$  &  $D^*$ ), approximated by using a RandomWalk Particle Tracking (RWPT) for  $D^*$  and a SPH approach to account for  $D_l$ .
- Analytical solution, 2D ADE (D).

### IV) Results

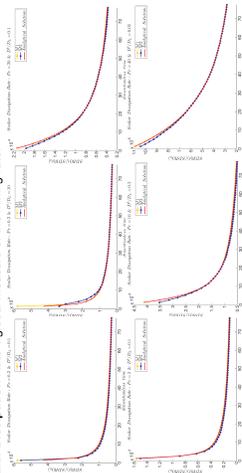
"Dilution Index": measures the dilution of a system (it has the dimensions of volume) and is related to the volume occupied by the solute plume.



M1:  $D = D_{local} + D_{macro}$  M2:  $D_{local}$  &  $D_{macro}$  Analytical solution

### IV) Results

"Scalar-Dissipation Rate": global measure of the mixing rate.



- With the use of the one dispersion coefficient we always obtained the same result in terms of mixing, in comparison to the analytical solution.
- Exist several cases when it is possible to use two dispersion coefficient to reproduce the same amount of mixing of the analytical solution.
- We found that the multiplied of the dimensionless variables,  $Pe$  and  $D^*D_l$ , is a good indicator of the range of validity of use two dispersion coefficient, values close to 2 let us obtain the correct amount of mixing and dispersion of the plume.
- SDR result indicate that it's possible to reproduce the same mixing rate of the analytical solution using two dispersion coefficient.
- The DI is related to the volume occupied by the plume, in some cases adding the RW effect produce different results to the analytical solution.

### V) Conclusions

The use of a meshless numerical method to simulate reactive solute transport allows a clear distinction local- and macro-dispersion for modeling spreading and mixing, opening new possibilities to correctly account for mixing in reactive transport simulations. We demonstrate that for the situations where both processes are additive, an effective grid-dependent dispersion coefficient can be derived based on the concept of block-effective dispersion and is able to reproduce dilution, mixing and reaction rates for a wide range of transport conditions similar to the ones found in many practical applications.

References:  
 Sun, A., Maxwell, P. and Rubin, A., 1998. The concept of block-effective macrodispersion: a grid-scale and particle-scale dependent transport. *J. Fluid Mech.*, 366, 161-180.  
 [2] P.A. Valocchi and Yoram Rubin. Modeling of block-scale macrodispersion as a threshold function. *J. Fluid Mech.*, 676, 254-266 (2011)  
 [3] P.A. Valocchi and Yoram Rubin. Modeling of block-scale macrodispersion for nonreactive solutes in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 36, 1242-2000.

Acknowledgments:  
 The present investigation was partly funded by FONDECYT through grant #1110226, and the travel grant has been financed by the Chilean government through FONDECYT through grant #1110226, and the travel grant has been financed by FONDECYT through grant #1110226, Universidad de Chile.