



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE GEOLOGÍA

**SIMULACIÓN DE FLUJO MÁSSICO Y CALOR EN MEDIOS FRACTURADOS:  
ESCENARIOS A PARTIR DEL CASO ESTUDIO PLOEMEUR, FRANCIA**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE GEÓLOGO

**MICHEL ALEXANDER KLEEBERG HURTADO**

PROFESORA GUÍA  
**DRA. DOLORINDA DANIELE**

MIEMBROS DE LA COMISIÓN  
**DRA. SASKIA ROELS**  
**DRA. DANIELA BLESSENT**

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto FONDECYT 1170569  
y el proyecto UNESCO IGCP636

SANTIAGO DE CHILE

2018

**RESUMEN PARA OPTAR AL TÍTULO DE:** Geólogo  
**POR:** Michel Kleeberg Hurtado  
**PROFESORA GUÍA:** Linda Daniele  
**FECHA:** 21/03/2018

## **SIMULACIÓN DE FLUJO MÁSCICO Y CALOR EN MEDIOS FRACTURADOS: ESCENARIOS A PARTIR DEL CASO ESTUDIO PLOEMEUR, FRANCIA**

Ante la tarea de proponer nuevas metodologías para la caracterización y modelación de reservorios fracturados se propone la implementación en el software FEFLOW 7.1 de un modelo de fractura simple que represente la inyección de soluto implementada en el sitio de experimentación de rocas fracturadas de Ploemeur, Francia y considerando un escenario de inyección de un pulso de calor para observar la respuesta del modelo en función de unas consideraciones experimentales propuestas para el sitio.

La calibración del modelo se realizó ajustando las curvas numéricas entregadas por el software a la respuesta másica experimental en conjunto con una curva calórica propuesta (y posible de encontrar en la zona), por medio de iteraciones desde un resultado inicial, obtenido desde los parámetros default del software y de acuerdo con la ley cúbica.

El modelo conceptual por representar corresponde a una discontinuidad horizontal que separa 2 grupos de capas (layers) sobre el cual se simularon dos pozos (inyección y recuperación) separados horizontalmente por 10.8m. Los tiempos de llegada de trazador bordean los 30 minutos mientras que la respuesta calórica propuesta ronda las 50 horas.

Dentro de los grandes controladores de la llegada de masa y calor al pozo de recuperación se encontraron la conductividad hidráulica y no así el espesor de fractura, además de tener efectos más intensos en el transporte calórico que en el másico. Factores como reacciones de sorción o efectos difusivos a esta escala local no tienen efectos notorios, sin embargo, a la hora de estudiar circulación a escala regional deben ser cuantificados y revisitados.

El ajuste propuesto es bueno, tanto estadística como visualmente. Los análisis de sensibilidad efectuados sobre el ajuste muestran la existencia de propiedades críticas como la porosidad de los elementos circundantes y la dirección de gradiente hidráulico utilizado. La determinación en terreno de este parámetro resulta fundamental para obtener una primera aproximación fidedigna de los parámetros del acuífero y su determinación no debiera revestir mayor dificultad, ya que puede aprovecharse la implementación de los pozos para obtener dichos valores. Como suele suceder en toda simulación, resulta de primera necesidad la corroboración de los datos experimentales en terreno. En caso de que la configuración experimental no entregue los resultados propuestos para la calibración del transporte de calor, deben revisitarse los supuestos del modelo y acotar mejor el problema, ya que se estaría llegando a configuraciones hidrogeológicas que no representen de la mejor forma la situación real del acuífero.

Finalmente, al considerar la extrapolación de los resultados a zonas de interés tanto chilenas como extranjeras debe tenerse en consideración el cambio de escalas y lo que esto conlleva: distintos tamaños de bloque y mayores tiempos de cómputo con requerimientos computacionales superiores.

Así, implementar esta metodología es una buena primera aproximación al desafío del flujo y transporte en rocas fracturadas. Dentro de sus ventajas está la de necesitar pocos parámetros de entrada y pruebas de campo, por lo que puede considerarse como una opción viable antes de realizar modelos más complejos y robustos pero que requieren de mayor cantidad de información base.

*Through all he said, even through his appalling sentimentality,  
I was reminded of something an elusive rhythm, a fragment of lost words,  
that I had heard somewhere a long time ago. For a moment a phrase tried  
to take shape in my mouth and my lips parted like a dumb man's, as  
though there was more struggling upon them than a wisp of startled air.  
But they made no sound, and what I had almost remembered was  
uncommunicable forever.*

F. Scott Key Fitzgerald

# TABLA DE CONTENIDO

## Índice

TABLA DE CONTENIDO .....	iii
Índice.....	iii
Índice de Figuras .....	v
Índice de Tablas .....	vii
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1 Formulación del Problema.....	1
1.2 Hipótesis de Trabajo .....	4
1.3 Objetivos.....	4
1.3.1 Objetivo General .....	4
1.3.2 Objetivos Específicos.....	4
2. MARCO TEÓRICO .....	5
2.1 Aproximaciones al Desafío de Roca Fracturada .....	6
2.2 Flujo de Agua Subterráneas .....	8
2.2.1 Procesos Fundamentales.....	8
2.2.2 Ecuaciones Gobernantes: Flujo .....	10
2.3 Procesos de Transporte de Masa.....	13
2.3.1 Mecanismos de Transporte de Masa .....	13
2.3.1.1 Advección .....	14
2.3.1.2 Dispersividad .....	15
2.3.1.3 Difusión Molecular .....	18
2.3.1.4 Reacciones de Sorción .....	20
2.3.2 Ecuaciones Gobernantes: Masa .....	22
2.3.3 Condiciones de Borde: Masa .....	23
2.4 Procesos de Transporte de Calor .....	24
2.4.1 Mecanismos de Transporte de Calor .....	24
2.4.1.1 Conducción .....	24
2.4.1.2 Advección .....	25
2.4.2 Ecuaciones Gobernantes: Calor .....	25
2.4.3 Condiciones de Borde: Calor .....	26
2.5 Influencias de Densidad y Viscosidad en el Transporte .....	27
2.6 Métodos de Simulación Computacional .....	28
2.6.1 Método de Diferencias Finitas .....	28

2.6.2	Método de Elementos Finitos .....	29
2.6.2.1	Ecuaciones de Diferencias Finitas .....	30
2.6.2.1	Condiciones de Borde .....	33
3.	METODOLOGÍA .....	35
3.1	Propuesta de Calibración de Modelo .....	35
3.2	Implementación de Simulaciones en Software FEFLOW .....	37
3.2.1	Configuración en Simulaciones de Transporte de Masa .....	42
3.2.2	Configuración en Simulaciones de Transporte de Calor .....	45
3.3	Aplicación de Métodos Estadísticos.....	47
3.4	Análisis de Sensibilidad de las Distintas Variables Hidráulicas .....	47
4.	RESULTADOS .....	48
4.1	Efecto Transporte por Cambios en Parámetros Hidráulicos .....	48
4.1.1	Cambios en el Módulo del Gradiente Hidráulico .....	48
4.1.2	Cambios en Parámetros de Fractura .....	49
4.2	Ajuste Propuesto .....	63
4.3	Análisis de Sensibilidad .....	65
5.	DISCUSIONES .....	66
5.1	Respecto de Cambios en Curvas de Temperatura y Concentración .	66
5.2	Respecto de la Representación de Rocas Fracturadas .....	73
5.3	Respecto del Modelo Conceptual Utilizado.....	74
5.4	Respecto del Ajuste Obtenido.....	75
5.5	Respecto de la Extrapolación de Resultados .....	80
6.	CONCLUSIONES.....	82
7.	BIBLIOGRAFÍA.....	84

## Índice de Figuras

Figura 2.1: (a) Modelo de fracturamiento continuo. Extraído de Blessent (2011b). (b) Modelo de fracturamiento discreto. Extraído de Barenblatt et al. (1960) .....	7
Figura 2.2: Elemento de dimensiones fijas $\Delta x * \Delta y * \Delta z$ , la flecha indica el sentido de flujo. ....	11
Figura 2.3: Geomodelo de simulación de canales perpendiculares al flujo E-W. ....	15
Figura 2.4: Pluma contaminante producto del efecto de dispersión. ....	16
Figura 2.5: Conceptualización de la dispersión Taylor-Aris, extraído de Bodin et al. (2013b). ....	17
Figura 2.6: Uso de distintos trazadores para distinguir mecanismos de transporte dominantes. Extraído de Maloszewski & Zuber (1990). ....	19
Figura 2.7: Análogo a reacciones de sorción, extraída de Fitts (2013). ....	21
Figura 2.8: (a) Ejemplo de grilla estructurada. (b) Ejemplo de grilla no estructurada. Extraído de Shewchuk (1999). ....	29
Figura 2.9: Nodo envuelto de elementos definidos por distintos nodos. ....	30
Figura 2.10: Función Base y nodos considerados en cálculo de integral de línea. Extraído de Fitts (2013). ....	32
Figura 3.1: Esquema del montaje experimental propuesto, extraído desde de la Bernardie (2017). ....	35
Figura 3.2: Concentración Medida y Temperatura Esperada en Pozos de Extracción. ....	36
Figura 3.3: Modelo Conceptual del Experimento (modificado desde de la Bernardie, 2017). ....	37
Figura 3.4: Configuración de los modelos numéricos, capas activas e inactivas .....	39
Figura 3.5: Condiciones de Borde de Flujo. Los banderines indican pozos de observación y extracción, los círculos la carga hidráulica y los círculos con flechas rojas indican condición de borde de pozos (adición de agua a un nodo). La marca blanca sobre el pozo con banderín rosa indica que está considerándose una función de modulación, la que cambiará los valores de inyección en el tiempo.....	41
Figura 3.6: Condiciones de Borde para el transporte de Masa. Los banderines indican pozos de observación y extracción, los círculos la concentración en el nodo y las líneas bajo éstas restringen la entrada de agua a una concentración de 0 mg/L en los bordes del modelo. ....	43
Figura 3.7: Zoom a la zona de inyección de la figura anterior.....	44
Figura 3.8: Condiciones de Borde para el transporte de Calor. En ella el banderín indica el pozo de extracción, los círculos la temperatura asociada al nodo y el énfasis blanco sobre ellos indica que está considerándose una función de modulación, la que cambiará los valores de concentración en el tiempo. ....	46
Figura 4.1: Efectos de cambios del módulo del gradiente hidráulico en el transporte de calor. ....	49

Figura 4.2: Efectos de cambios de en el módulo del gradiente hidráulico en el transporte de masa. ....	49
Figura 4.3: Efectos de cambios del espesor de fractura en el transporte de calor considerando la Ley Cúbica. ....	50
Figura 4.4: Efectos de cambios de conductividad hidráulica en el transporte de calor sin considerar la Ley Cúbica. ....	51
Figura 4.5: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de calor sin considerar la Ley Cúbica. ....	51
Figura 4.6: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de masa según ley cúbica. ....	52
Figura 4.7: Efectos de cambios de conductividad hidráulica en el transporte de masa. ....	52
Figura 4.8: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de masa. ....	53
Figura 4.9: Efectos de cambios de dispersión longitudinal de fractura en el transporte de calor. ....	54
Figura 4.10: Efectos de cambios de dispersividad longitudinal de fractura en el transporte de masa. ....	54
Figura 4.11: Efectos de cambios de dispersión transversal de fractura en el transporte de calor. ....	55
Figura 4.12: Efectos de cambios de dispersividad transversal en el transporte de masa. ....	55
Figura 4.13: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica del fluido al interior de la fractura en el transporte de calor. ....	56
Figura 4.14: Efectos de cambios de porosidad de fractura en el transporte de masa. ....	57
Figura 4.15: Efectos de cambios de la porosidad de los elementos circundantes en el transporte de calor. ....	57
Figura 4.16: Efectos de cambios de porosidad de elementos circundantes en el transporte de masa. ....	58
Figura 4.17: Efectos de cambios de la conductividad termal de matriz de los elementos circundantes en el transporte de calor. ....	59
Figura 4.18: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica de matriz de los elementos circundantes en el transporte de calor. ....	59
Figura 4.19: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica de fluido de los elementos circundantes en el transporte de calor. ....	60
Figura 4.20: Efectos de cambios de dispersión transversal de elementos circundantes en el transporte de calor. ....	61
Figura 4.21: Efectos de cambios de dispersión longitudinal de elementos circundantes en el transporte de calor. ....	61
Figura 4.22: Efectos de cambios de conductividad de elementos circundantes en el transporte de calor. ....	62
Figura 4.23: Efectos de cambios de conductividad hidráulica de elementos circundantes en el transporte de masa. ....	62
Figura 4.24: Ajuste propuesto transporte másico. ....	64

Figura 4.25: Ajuste propuesto transporte calórico.....	64
Figura 4.26: Análisis de sensibilidad para la porosidad en el transporte calórico .....	65
Figura 4.27: Análisis de sensibilidad para la porosidad en el transporte másico .....	65
Figura 5.1: Efectos de la dispersión de pluma sólo debido a efectos difusivos, extraída de Fitts (2013). .....	72
Figura 5.2: Comparación valores de eficiencia alcanzada con match visual.	76
Figura 5.3: Simulación con gradiente hidráulico W-E, solidario a los pozos (indicados con banderines). .....	78
Figura 5.4: Simulación con gradiente hidráulico N-S, perpendicular a los pozos (indicados con banderines). .....	79

## **Índice de Tablas**

Tabla 1-1: Códigos Numéricos Para Simulación, Extraído de Hecht-Méndez et al., 2010. ....	3
Tabla 3-1: Parámetros Experimentales. ....	37
Tabla 3-2: Parámetros Default del Software.....	38
Tabla 3-3: Escenarios Simulados y Condiciones de Borde Implementadas..	40
Tabla 4-1: Parámetros Obtenidos de la Implementación de Modelos. ....	63
Tabla 5-1: Valores Conductividad Hidráulica y Apertura Utilizados en Simulaciones, calculados en base a Snow (1969) con N=1.....	67

# **1. INTRODUCCIÓN**

## **1.1 Formulación del Problema**

En la historia del estudio del agua subterránea gran parte de los esfuerzos han sido dirigidos a la resolución de medios porosos. Es así como leyes fundamentales como la Ley de Darcy, fueron ideadas y probadas en arenas porosas no siendo del todo válida en otros sistemas como pueden ser rocas cristalinas fracturadas (Romm, 1966; Simmons et al., 2001; Bodin et al., 2002).

Hace un par de décadas que el flujo en roca fracturada comienza a cobrar protagonismo debido principalmente a dos factores: la existencia de acuíferos significativos en rocas fracturadas y la presencia de reservorios geotermiales importantes en las mismas. Producto de lo anterior, distintas aproximaciones han sido requeridas para tratar el problema desde distintos enfoques. Por ejemplo, Bodin et al. (2002) reconoce la importancia de separar flujos regionales de locales ya que los parámetros hidráulicos no funcionan de la misma forma a diferentes escalas mientras que Neuman (2004), da cuenta de la dificultad en la caracterización del fracturamiento y cómo el considerar modelos de fractura isótropos o anisótropos afecta a la caracterización del flujo.

Dentro del estudio de medios permeables las herramientas computacionales han cobrado fundamental importancia en los últimos años al permitir el desarrollo de complejas simulaciones en intervalos acotados de tiempo. Éstos resuelven las cientos de iteraciones de las distintas ecuaciones de flujo y transporte, necesarias para alcanzar la estabilidad de los modelos, permitiendo el estudio de variaciones leves en los parámetros hidráulicos y promoviendo la comparación rápida entre modelos.

Diversas discusiones se han llevado a cabo para determinar el comportamiento de los distintos parámetros hidráulicos en medios fracturados, dependientes de la escala de observación o de cambios en condiciones de transporte de solutos/calor. Es en base a esta discusión que se encuadra el desarrollo del proyecto UNESCO IGCP 636 en el cual se enmarca esta memoria. El objetivo de dicho proyecto es proponer nuevas metodologías para la caracterización y modelación de reservorios geotérmicos fracturados y para ello realizan trabajos en zonas de interés geotérmico ubicadas en Francia, Colombia, Canadá, Bélgica y a futuro en Chile. Si bien esta memoria es con respecto a flujos en rocas fracturadas ubicadas en la región de Bretaña, Francia, los resultados obtenidos pueden

ser extrapolables a zonas de interés chilenas. Un ejemplo puede ser la zona de falla Pocuro, previamente descrita como una falla con actitud N0-10W y subvertical, pero hasta hoy no completamente resuelta (Carter & Aguirre, 1965; Heuser, 2016). En ella, y con ayuda de simulación numérica, puede resultar interesante estudiar los flujos geotérmicos corticales someros presentes y pasados, lo que incluso puede dar pistas acerca de la geometría del sistema estructural.

Este estudio nace ante el interés por tratar el problema del flujo subterráneo desde distintos enfoques, se propone para esta memoria el uso de uno de los distintos códigos numéricos de modelación afín al problema. A fin de desarrollar nuevos conocimientos en la construcción de modelos conceptuales y numéricos para reservorios geotérmicos, se propone el desarrollo en paralelo de diferentes simulaciones en distintos softwares con el objetivo de identificar las fortalezas y debilidades asociadas a cada uno obteniendo así un modelo más robusto, aplicable como primera aproximación a zonas con escasa información de terreno que podría dar pistas de zonas de interés para investigación.

Actualmente el uso de software aplicado a la hidrogeología (y en específico a la simulación de flujo) está ampliamente extendido y el modelo numérico a utilizar responde íntimamente al objetivo de la investigación. El fin de la simulación será el de discretizar la zona de estudio en una grilla 3-D y calcular las ecuaciones generales de flujo para cada elemento hasta alcanzar la estabilidad. Es así como pueden simularse por separado flujos de calor, masa y transporte reactivo de manera acoplada o desacoplada. El último concepto tiene relación con como una variable a lo largo de las iteraciones influye en la evolución de las otras, por ejemplo, la temperatura influye directamente en la solubilidad y ésta en el transporte másico. Es así como una iteración que cambia de manera violenta la temperatura puede tener un efecto considerable en el cálculo correspondiente al movimiento de soluto, efecto que sólo será considerado en un modelo numérico acoplado. Finalmente, también la forma matemática de abordar la ecuación de flujo tiene efectos en el resultado de la simulación y todas estas consideraciones deben tomarse en cuenta a la hora de optar por uno u otro modelo para simular el problema en cuestión. Hecht – Méndez et al. (2010) propone un resumen de distintos softwares afines, tanto de código abierto como comercial, de acuerdo con sus características de simulación que se puede observar en la Tabla 1-1 presentada a continuación.

Tabla 1-1: Códigos Numéricos Para Simulación, Extraído de Hecht-Méndez et al., 2010.

Numerical Codes Suitable for Heat Transport Simulations of Shallow Geothermal Systems Considering Groundwater Flow (Not Meant to Be Exhaustive or Complete)						
Code Name	Numerical Method	Processes	Coupling of Processes <sup>1</sup>	Availability	Comments	References
AST/TWOW <sup>2</sup>	FD	H, T	H → T	Commercial	3D, calculates near-field heat transport around BHEs	Schmidt and Hellström (2005)
BASIN2	FD	H, T, C	H ↔ T, M, CH	Free code	2D, simulates sedimentary basin development. Cross-sectional view	Bethke et al. (2007)
COMSOL <sup>2</sup>	FE	H, T, C	H ↔ T	Commercial	3D, multi-physics (more processes can be coupled)	Holzbecher and Kohfahl (2008)
FEFLOW <sup>2</sup>	FE	H, T, C	H ↔ T, M, C	Commercial	2D, 3D	Diersch (2002)
FRACHEM	FE	H, T, C	H ↔ T, M, C	Scientific	3D, used for Hot Dry Rock modeling	Bächler (2003)
FRACture <sup>2</sup>	FE	H, T	H ↔ T, M	Scientific	3D, developed for Hot Dry Rock modeling	Kohl and Hopkirk (1995)
ROCKFLOW/GeoSys	FE	H, T, C	H ↔ T, C	Scientific	3D, fracture systems can be included. Allows for multi-phase flow	Kolditz et al. (2001)
HEATFLOW <sup>2</sup>	FE	H, T	H ↔ T	Free code	1D, 2D, 3D	Molson and Frind (2002)
HST2D/3D	FD	H, T, C	H ↔ T, M, CH	Free code	2D, 3D	Kipp (1986)
HydroTherm	FD	H, T	H ↔ T	Free code	2D, 3D, two-phase model. Can simulate 0 to 1200 °C	Kipp et al. (2008)
HYDRUS-2D	FE	H, T, C	H → T	Commercial	2D, unsaturated zone, plant water uptake is considered	Šimůnek et al. (1999)
SEAWAT	FD	H, T, C	H ↔ T, C	Free code	3D	Langevin et al. (2008)
SHEMAT <sup>2</sup>	FD	H, T, C	H ↔ T, C	Commercial	3D	Clauser (2003)
SUTRA	FE/FD	H, T, C	H ↔ T, C	Free code	2D, 3D	Voss and Provost (2002)
THETA <sup>2</sup>	FD	H, T, C	H ↔ T, CH	Scientific	3D	Kangas (1996)
TOUGH2	FD	H, T, C	H ↔ T, C, CH	Commercial	1D, 2D, and 3D, one of the most widely used code in geothermal energy technologies. Allows for multi-phase flow	Pruess et al. (1996)
TRADIKON 3D <sup>2</sup>	FD	H, T	H → T	Free code	3D, specially designed for BHEs assessments	Brehm (1989)
VS2DH	FD	H, T	H → T	Free code	2D	Healy and Ronan (1996)

Note: H, Hydraulic; T, Temperature; C, Contaminant (solute).  
<sup>1</sup>H → T, fluid flow is independent of T; H ↔ T, fluid flow depends on T; M, mechanical deformation (pore deformation); CH, chemical reaction.  
<sup>2</sup>Already used for GSHP simulations.

En esta memoria el modelo numérico a utilizar para la simulación será FEFLOW, basado en el método de resolución de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) por medio de elementos finitos, donde distintos escenarios de transporte y condiciones iniciales serán simulados.

## **1.2 Hipótesis de Trabajo**

En este trabajo, se considera como hipótesis que los flujos de calor y de masa en rocas fracturadas, a mesoescala, responden de manera estable a variaciones en los parámetros hidráulicos tales como advección, difusión y dispersión (al igual que sus equivalentes para el transporte de calor) correspondiéndose con los datos de terreno.

Al responder de manera estable, no existiendo grandes diferencias en la solución del modelo ante pequeños cambios en las variables hidráulicas, se considera que ante la ausencia de datos de terreno la implementación de un modelo de transporte de masa y calor en rocas fracturadas surte de una primera aproximación válida al estudio del problema.

## **1.3 Objetivos**

### 1.3.1 Objetivo General

El objetivo general de esta memoria es estudiar el comportamiento del flujo másico y calórico en rocas fracturadas por medio de la simulación numérica de transporte de solutos y calor.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

Los objetivos específicos son:

1. Implementación de un modelo de fractura simple para simular inyección de solutos y calor en rocas fracturadas.
2. Determinar los parámetros hidráulicos que de mejor forma ajusten al sistema que propone este problema, en base a datos experimentales de terreno y escenarios probables de encontrar en el Sitio de Investigación de Rocas Fracturadas en Ploemeur, Francia.
3. Establecer la fiabilidad de la simulación en base a correlaciones con estos datos.

## 2. MARCO TEÓRICO

Avances en la geología del petróleo, la necesidad de encontrar y entender otras fuentes energéticas no convencionales como la geotermia y los efectos que el cambio climático ha causado producto de la quema indiscriminada de combustibles fósiles con su repercusión en las aguas subterráneas han llevado al estudio de nuevas aproximaciones y el avance apresurado en los modelos numéricos aplicados a la hidrogeología. Lo anterior, sumado con el rápido desarrollo de las ciencias de la computación, permite hoy en día la simulación de distintos escenarios de largos periodos de duración en cortos tiempos de simulación.

Quizás no hay problema más difícil de resolver en el área de la modelación hidrogeológica que el flujo en rocas fracturadas (Faybishenko & Benson, 2000), la mayor dificultad radica en la poca información que se tiene del subsuelo al describir, delimitar y trazar los sistemas de discontinuidades ya sean diaclasas, fracturas o fallas. Ante la falta de esta delimitación surge la complicación de no tener una base fidedigna sobre la cual aplicar las ecuaciones de flujo y obtener un modelo que se ajuste a las necesidades de terreno.

Los esfuerzos han sido dirigidos a modelar el transporte en acuíferos alojados principalmente en rocas porosas no fracturadas, gracias a la facilidad de poder asumir condiciones de isotropía que facilitan el cálculo en estos medios, ya que los parámetros hidráulicos son asumidos como promedios de muchos poros (Neuman 2005): los medios que estén distribuidos de manera isótropa generarán un comportamiento continuo más sencillo de trabajar. Últimamente ha cobrado importancia la modelación numérica de rocas fracturadas mayor o menormente porosas (como por ejemplo granitos y gneisses o rocas sedimentarias clásticas) en donde asumir condiciones de isotropía puede no siempre ser la opción correcta (caso, por ejemplo, de un set de fracturas con orientación preferencial).

En este campo la geología estructural tiene importante influencia en los resultados numéricos, ya que, al describir los campos de esfuerzos regionales o locales, se pueden descubrir patrones estructurales que permitan postular modelos de fracturamiento acoplables con modelos de flujo numéricos y con ello obtener simulaciones que representen la información de terreno. Varias herramientas son aplicadas hoy en día que permiten aproximar el subsuelo y definir la extensión y geometría de la zona de fracturas como la geofísica, sísmica y ciertas aplicaciones en las pruebas de bombeo.

En base a lo anterior el objetivo de la simulación contemplará la simplificación de la información de terreno, para así ser objetivo de las ecuaciones gobernantes de flujo obteniendo velocidades y aceleraciones del

agua subterránea, entre otros parámetros de interés, para todo punto del espacio simulado.

Si bien existen distintos tipos de aproximación al desafío del flujo y transporte en roca fracturada, las simulaciones que serán revisadas a continuación comparten su metodología de construcción/implementación como bien propone Blessent (2011). La metodología se basa siempre en 3 pasos que llevarán la información de terreno a resultados numéricos y ella comprende: (i) construir un modelo geológico 3D (*geomodelo*) desde datos de terreno que incluya topografía e información de subsuelo obtenida, por ejemplo, estratigrafía, geofísica o información de pozos. (ii) Discretización del modelo como una grilla de elementos de volumen fijo y finalmente (iii) la simulación del flujo subterráneo y transporte asociado a la grilla de elementos recién creados. Dicha metodología es preferentemente aplicable para simulaciones resueltas computacionalmente donde el modelo más simple sería uno cuadrado compuesto por elementos de volúmenes cuadrados discretos sobre los cuales se aplican las ecuaciones gobernantes a fin de resolver el flujo a través de este modelo.

## **2.1 Aproximaciones al Desafío de Roca Fracturada**

Existen distintas aproximaciones para construir el geomodelo e incluir el fracturamiento. Neumann (2005) revisa dos modelos conceptuales diferentes, por un lado, uno de fracturamiento continuo y por otro un modelo de fracturamiento discreto, cuál usar responde íntimamente a la escala del problema e información disponible. Para entender las aproximaciones es necesario hacer una simplificación y asumir que el modelo se compone de la fractura con matriz entre ellas y que no siempre las fracturas actúan como caminos preferenciales de flujo, sino que hay ocasiones en que éstas funcionan como barrera impermeable. Dos enfoques muy utilizados para representar el fracturamiento son el modelo continuo y el de enrejado de fracturas discretas. Ejemplos de estas conceptualizaciones se encuentran en la Figura 2.1. En (a) el fracturamiento fue definido como facies continuas obtenido como resultado de un método probabilístico de Markov, va desde SFB (escasamente fracturado), SMFB (escasa a moderadamente fracturada), MHFB (moderada a altamente fracturada) a (altamente fracturada) mientras que la línea blanca indica uno de los sondajes desde el cual se extrapola la información. En la (b) las fracturas son medidas minuciosamente para lograr alto nivel de detalle, este modelo requiere alto esfuerzo tanto humano como computacional para ser desarrollado.

El modelo continuo asume la existencia de dos medios representables como continuos separables. Por un lado, se representa al total de las fracturas interactuando con otro medio que es la matriz. Si uno de los dos medios domina al otro, todo el modelo puede representarse por ese continuo.

Algunas salvedades pueden hacerse en este caso, como si la transferencia de agua y masa entre la matriz y la fractura es lo suficientemente rápida en comparación con el transporte dentro de la matriz se puede considerar ambos continuos en equilibrio y tratarlo como uno sólo. Si no existe tal equilibrio se puede usar un enfoque de doble porosidad, descrito inicialmente por Barenblatt et al. (1960) en donde la matriz actúa como un reservorio no conductor (baja conductividad hidráulica) y alto almacenamiento mientras que las fracturas actúan como reservorio con alta conductividad y bajo almacenamiento. En este caso la transmisión entre ambos medios es lineal al gradiente de concentración entre ambos medios.

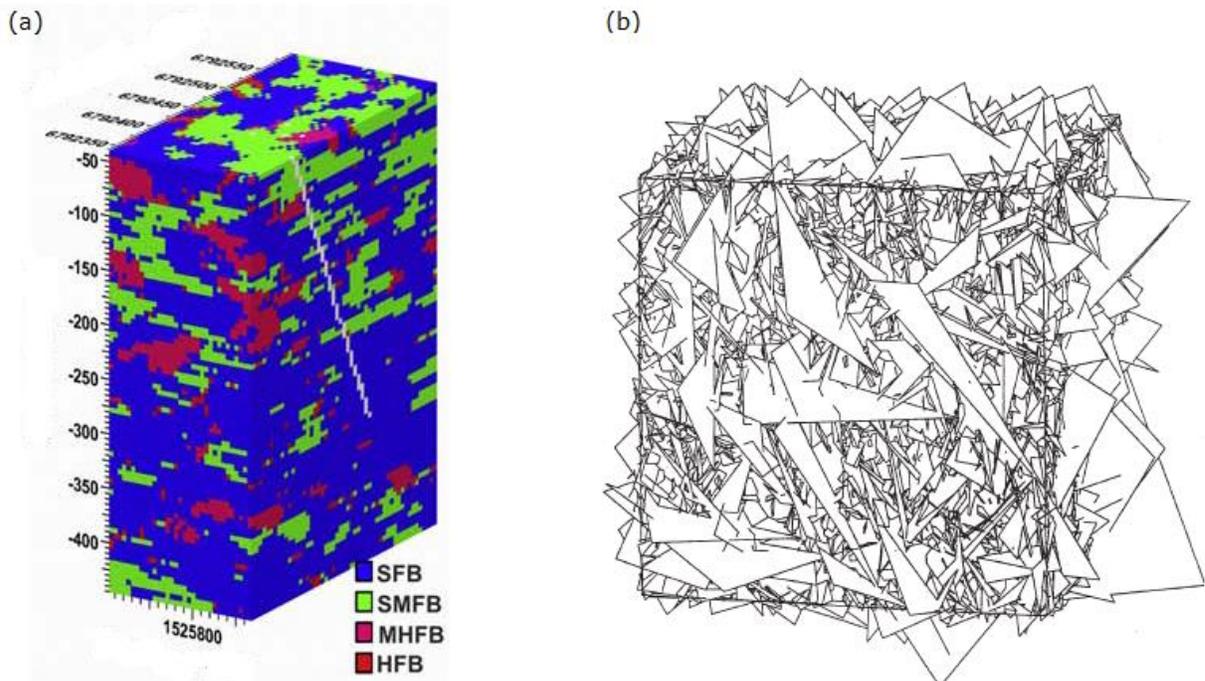


Figura 2.1: (a) Modelo de fracturamiento continuo. Extraído de Blessent (2011b). (b) Modelo de fracturamiento discreto. Extraído de Barenblatt et al. (1960)

El modelo de enrejado de fracturas discretas (*Discrete Fracture Network, DFN*), primeramente propuesto por Andersson and Dverstorp (1987), discretiza un gran número de fracturas con el fin de obtener parámetros hidráulicos equivalentes para los subdominios desde donde se obtuvieron los datos estructurales. Una vez discretizado el espacio pueden tomarse 2 caminos. La primera opción es generar numerosos DFN y con ello encontrar parámetros atribuibles a dicho fracturamiento que sean luego tratados como un continuo aleatorio como fue desarrollado por Cacas et al. (1990b). Otro enfoque es simular flujo y transporte en DFN's de alta resolución y calibrar el modelo según trazadores como fue realizado por el proyecto Stripa (SKB 1993). El mismo proyecto logró demostrar que pese a contar con una discretización de alto detalle, con un número de fracturas del orden de  $10^5$ , los resultados no son muy disimiles de los modelos de aproximación continua.

En ambas aproximaciones es posible generar modelos estocásticos (aleatorios) ante la falta de información de terreno o como medio de generalización del modelo a distintas condiciones de campo. Blessent (2011b) basada en la metodología de Park et al. (2004) hace modelación inversa (obtención de parámetros hidráulicos a partir de calibración de simulaciones) en un modelo de transición de probabilidades de fracturamiento. Esto es, después de definir facies de fracturamiento (que van desde muy fracturado a poco fracturado) y utilizando enfoque estadístico basado en cadenas de Markov crea probabilidades de transición entre las facies a las cuales se les considera como continuos usando un EPM (Medio Poroso Equivalente o *Equivalent Porous Medium*), al cual aplica las ecuaciones de flujo. Ejemplo de modelos aleatorios de DFN ya han sido mencionados en este documento, como es el caso de Cacas et al. (1990b).

El trabajar con uno sólo de los modelos puede llevar a resultados incompletos o erróneos por la sobre-simplificación del problema y se propone el uso de un método en conjunto (Neuman, 2005) dónde exista un continuo sobre el cual se aplican elementos discretos mayores que serán tratados como enrejado de discontinuidades (su propio modelo de fracturas discretas).

Sin perjuicio de lo anterior para la presente memoria se elige representar el experimento como una fractura discreta tratada como un EPM por la simpleza del modelo requerido, su fácil comparación con otros métodos de simulación y por ser un modelo que, bajo otras consideraciones, es fácilmente ampliable a uno de medios continuos previa realización de pruebas adicionales a fin de tener parámetros hidráulicos afines.

Para describir las ecuaciones que rigen el movimiento y transporte subterráneo es necesario describir los mecanismos principales que participan en el flujo y rigen el transporte de calor y masa. A continuación los formalismos matemáticos serán presentados en un comienzo en su versión 1-D, basta hacer una suma de los dos vectores restantes para obtener su versión 3-D.

## **2.2 Flujo de Agua Subterráneas**

### 2.2.1 Procesos Fundamentales

Antes de introducir los mecanismos responsables del transporte de calor/masa en roca fracturada y medios permeables en general, es necesario entender cuáles son los fundamentos del movimiento de aguas subterráneas.

Para medios porosos la ley que gobierna el flujo subterráneo es la de Darcy. Ésta relaciona flujo con conductividad hidráulica, sección de área perpendicular al flujo y carga hidráulica de acuerdo con la siguiente relación:

$$Q = -K * A * \nabla H \quad (1)$$

Con  $Q$  [ $L^3 T^{-1}$ ] el flujo,  $K$  [ $LT^{-1}$ ] conductividad hidráulica,  $A$  [ $L^2$ ] el área transversal y  $\nabla H$  [-] el gradiente hidráulico que ayuda a entender el sentido de avance del flujo, el signo negativo está presente debido a que el flujo positivo se define en dirección de mayor a menor gradiente. La conductividad hidráulica es dependiente del fluido y del medio poroso involucrado. Para obtener una propiedad independiente del fluido se define la permeabilidad intrínseca  $k$  como:

$$k = K \frac{\mu}{\gamma} \quad (2)$$

Con  $\gamma$  [ $FL^{-3}$ ] el peso específico del líquido (dependiente de la densidad del mismo) y  $\mu$  [ $ML^{-1}T^{-1}$ ] la viscosidad dinámica del líquido (que dependerá de la temperatura del fluido).

El hecho que la conductividad no sólo dependa del medio permeable es una primera limitación de la ley de Darcy. Una segunda es que la relación entre caudal y carga hidráulica no es lineal (en el caso que la velocidad sea muy alta o el caudal muy bajo).

Esto quiere decir que la ley de Darcy sólo es válida en fluidos laminares de baja velocidad. Lo anterior no necesariamente se cumple en fracturas ya que el fluido es principalmente turbulento debido a rugosidades asociadas al plano de fractura y adicionalmente la velocidad es mayor debido a la menor resistencia asociada a un plano abierto (Bodin et al., 2003b).

Una medida para estimar la validez de la ley de Darcy corresponde al número de Reynolds, parámetro que establecerá si un fluido es laminar o turbulento. A valores bajos de número de Reynolds el fluido corresponderá a uno laminar y a altos valores corresponde a uno turbulento, donde la transición ocurre alrededor de valores de  $Re=2450$  (Holman, 2010). La relación para el número de Reynolds puede verse en la Ecuación 3:

$$Re = \frac{\rho_w * u_w * D}{\nu} \quad (3)$$

Dónde  $\rho_w$  [ $ML^{-3}$ ] es la densidad del agua,  $u_w$  [ $LT^{-1}$ ] es la velocidad característica del fluido,  $D$  [ $L$ ] el largo característico del sistema y  $\nu$  [ $L^2T^{-1}$ ] la viscosidad cinemática. Cabe mencionar que en medios porosos el valor de transición utilizado es diferente y se encuentra en  $Re=1$  (Bear, 1993).

Para sopesar lo anterior, desde las ecuaciones de Navier-Stokes, puede

definirse un análogo a la ley de Darcy para rocas fracturadas diseñado para una fractura planar conocido como ley "cúbica" (Romm 1966). El nombre lo recibe debido a que el flujo es proporcional al cubo del espaciamiento de la fractura según la siguiente ecuación:

$$Q = \frac{\rho_w g b^3 w}{12\mu} \nabla H \quad (4)$$

Con  $\rho_w$  [ML<sup>-3</sup>] la densidad del agua,  $g$  fuerza de gravedad [LT<sup>-3</sup>],  $b$  [L] la apertura de la fractura,  $\mu$  [ML<sup>-1</sup>T<sup>-1</sup>] la viscosidad dinámica del fluido,  $w$  [L] el ancho de fractura paralela al flujo y  $\nabla H$  [-] el gradiente hidráulico. En base a una comparación con la ley de Darcy puede establecerse una relación entre conductividades y establecer una conductividad equivalente para flujo en medios fracturados:

$$K = \frac{\rho_w g N b^3}{12\mu} \quad (5)$$

Con  $N$  [L<sup>-1</sup>] el número de fracturas por unidad de ancho (perpendicular al flujo) y todos los demás parámetros ya definidos (Snow, 1969). Estas son las leyes base para establecer flujo subterráneo y transporte de especies en el mismo.

### 2.2.2 Ecuaciones Gobernantes: Flujo

A la hora de modelar se necesita una herramienta que permita entender el flujo y transporte constreñido a ciertas condiciones, en este caso principios físicos, que gobiernen el proceso a ser simulado. Lo anterior recibe el nombre de ecuaciones gobernantes y, en el caso de flujos y transportes subterráneos, son ecuaciones en derivadas parciales construidas en base a la ley de Darcy o la ley de conservación de masas. Así, cualquier solución de la ecuación cumplirá con estas leyes de transporte.

La derivación de las complejas ecuaciones gobernantes para transporte y masa se encuentran fuera del alcance de este documento, pero resulta pertinente entender a lo menos los constituyentes de sus versiones más simples y así entender el funcionamiento de formas más complejas. En base a este planteamiento se procederá a revisar una forma reducida y simplificada para deducir formas básicas de ecuaciones gobernantes de flujo y transporte de calor y masa, un análisis más completo puede encontrarse en Fitts (2013).

Para la explicación de las tres ecuaciones gobernantes básicas se propone la conceptualización de un elemento finito mediante un cubo, inmerso en la zona saturada, de dimensiones  $\Delta x * \Delta y * \Delta z$  fijas como aparece en la Figura 2.2, desde ahora llamado simplemente elemento.

Para comenzar se deducirá la ecuación general de flujo. El postulado que debe cumplirse según la ley de conservación de masa es que la variación de flujos de entrada y salida por los bordes del elemento debe ser igual a la tasa de cambio de masa del elemento en sí. Para la primera deducción, por motivos de simplificación, se asumirá solo flujo en x, esto es  $q_x \neq 0$  y  $q_y = q_z = 0$  y luego se procederá a extender el modelo a 3-D mientras que en los siguientes apartados se procederá a escribir sólo los resultados 3-D.

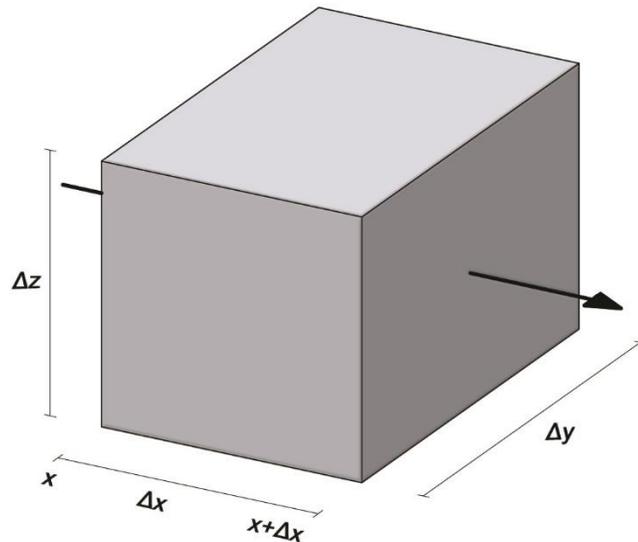


Figura 2.2: Elemento de dimensiones fijas  $\Delta x * \Delta y * \Delta z$ , la flecha indica el sentido de flujo.

Los flujos de masa para el borde izquierdo y el borde derecho quedan determinados por las siguientes relaciones:

$$\rho_w(x)q_w(x)\Delta y\Delta z \quad (6)$$

$$\rho_w(x + \Delta x)q_w(x + \Delta x)\Delta y\Delta z \quad (7)$$

Si dichos valores son distintos quiere decir que hubo o bien inyección o extracción de agua del elemento, lo que queda descrito con la definición de almacenamiento específico  $S_s$ :

$$dV_w = S_s dh dV_t \quad (8)$$

Recordando que tanto las dimensiones como el almacenamiento específico son independientes del tiempo y que el volumen se puede escribir en términos de la masa y densidad (en este caso del agua) podemos ver que la tasa de cambio de masas queda descrita de la siguiente forma:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \rho_w S_s \frac{\partial h}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (9)$$

Cabe mencionar que la carga hidráulica  $h$  no se considera en la ecuación como una constante, ya que esta varía espacial y temporalmente.

Así las Ecuaciones (7), (8) y (9) describen el sistema por completo que cumplirá tanto con la ley de conservación de masa y la ley de Darcy. Dicha ecuación cumple que la tasa de cambio de masas será igual a la resta del flujo másico saliente con el entrante.

Al reordenar, aplicar la definición de límite cuando  $\Delta x \rightarrow 0$  y expandir el interior de la derivada resultante se obtiene la siguiente relación:

$$-\rho_w \frac{\partial q_x}{\partial x} - q_x \frac{\partial \rho_w}{\partial x} = \rho_w S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (10)$$

Considerando que el segundo término de la ecuación es órdenes de magnitud más pequeño que el primero (Fitts, 2013), puede obviarse de la ecuación y al sustituir la definición de  $q_x$  según la ley de Darcy, se obtiene la ecuación gobernante unidimensional para flujos subterráneos saturados:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (11)$$

Después, al eliminar la restricción de  $q_y = q_z = 0$  se obtienen términos en la dirección "y" y "z" obteniendo la forma más universal de la ecuación de flujo subterráneo en situación saturada:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (12)$$

Esta ecuación tiene por solución una carga hidráulica  $h(x,y,z,t)$  que cumple con la ley de Darcy y balance de masas. Varias simplificaciones se pueden realizar, como por ejemplo asumir conductividad hidráulica homogénea.

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S_s}{K} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (13)$$

O bien usando la notación del laplaciano.

$$\nabla^2 h = \frac{S_s}{K} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (14)$$

Esta forma de deducir la ley gobernante utiliza la conservación de masas y ley de Darcy en sus supuestos, otras formas consideran la diferencia de flujos en razón de cambios volumétricos mientras otras lo hacen en favor de la velocidad de deformación de la matriz circundante en materiales de baja conductividad y cambios en la densidad de los fluidos (Freeze & Cherry 1979, Verruijt 1969, Gambolati 1973, 1974). Cuál usar dependerá íntimamente de las características del problema en cuestión

## **2.3 Procesos de Transporte de Masa**

### 2.3.1 Mecanismos de Transporte de Masa

Con respecto al transporte de masa en roca fracturada, teniendo en consideración que el medio se simplifica como una matriz y fracturas, se reconocen 4 fuentes de transporte principales:

- **Advección:** Producto del migrar del soluto con el flujo, acá se aprovecha la velocidad promedio de viaje del fluido en el plano de fractura para el movimiento de masa. La advección en la matriz es órdenes de magnitud menor que en el plano de fractura, debido principalmente a las diferentes conductividades hidráulicas. Este fenómeno incluye al de "convección libre", tema a profundizar en el apartado 2.5 de este documento.
- **Dispersión Hidrodinámica:** Corresponde a las desviaciones en el avance del soluto producto de diferencias de velocidad de avance del flujo debido a la geometría de los poros o irregularidades en el plano de fractura.
- **Difusión:** Difusión molecular de soluto por diferencias de concentración entre la fractura y la matriz. Es el mecanismo predominante de transporte en esta última debido a su baja conductividad hidráulica, producto de una baja permeabilidad.
- **Reacciones fisicoquímicas entre soluto y matriz sólida:** producto de absorciones, adsorciones, disoluciones, precipitaciones, etc. Afectan la concentración de soluto y producen retardo, transformación o atenuación en la velocidad de transporte.

A continuación se procederá a profundizar en conceptos relacionados a estas cuatro fuentes de transporte con consideraciones, descripción matemática, y ejemplos.

### 2.3.1.1 Advección

La advección corresponde al movimiento de soluto aprovechando el movimiento del flujo, es decir, el transporte de sustancias disueltas en un flujo de agua subterránea. Tiene unidades de  $ML^{-2}T^{-1}$  y está descrita por la siguiente ecuación:

$$F_a = qc \quad (15)$$

Con  $c$  [M] concentración de soluto y  $q$  [ $L^{-2}T^{-1}$ ] la velocidad de Darcy en dirección del flujo, íntimamente ligada a la conductividad hidráulica del medio. Ya se ha revisado en este documento que la ley de Darcy puede no ser el mejor método para describir el flujo en rocas fracturadas y que debe preferirse un enfoque como la ley cúbica descrita en la Ecuación 4. La ley cúbica es descrita en términos de la apertura media de las fracturas y precisamente esto incide directamente sobre el flujo advectivo con los distintos canales que puedan formarse (efecto de canalización o *channeling* en inglés). Estos canales son caminos preferenciales para el flujo producto de, por ejemplo, variaciones en el espaciamiento medio de ciertas secciones de la fractura, ya que el flujo ocurrirá preferencialmente por los caminos con menor conductividad hidráulica (coincidentes con dichas secciones con mayor apertura).

Este efecto de los canales puede explicar algunas formas de las curvas de concentración v/s tiempo obtenidas típicamente en inyecciones de soluto de baja duración en los pozos de salida, como algunas colas (*tailing*) o las curvas multimodales con más de un peak de concentración cuando el efecto de los canales es independiente entre sí (Bodin et al., 2003a).

El efecto de canales está bien documentado tanto en experimentos de laboratorio, campo y simulaciones numéricas. A modo de ejemplo Abelin et al. (1994) en el sitio experimental de Stripa y con ayuda de un experimento multitrizador, logró determinar que existían canales preferenciales de hasta 50mm de ancho que correspondían del 5 hasta 20% del plano de fractura. A escala de laboratorio destaca el experimento de Watanabe et al., (2009) en granitos fracturados donde el flujo a través de las fracturas inducidas por cizalle muestra el desarrollo de caminos preferenciales de flujo producto de las heterogeneidades en el espaciamiento de la apertura.

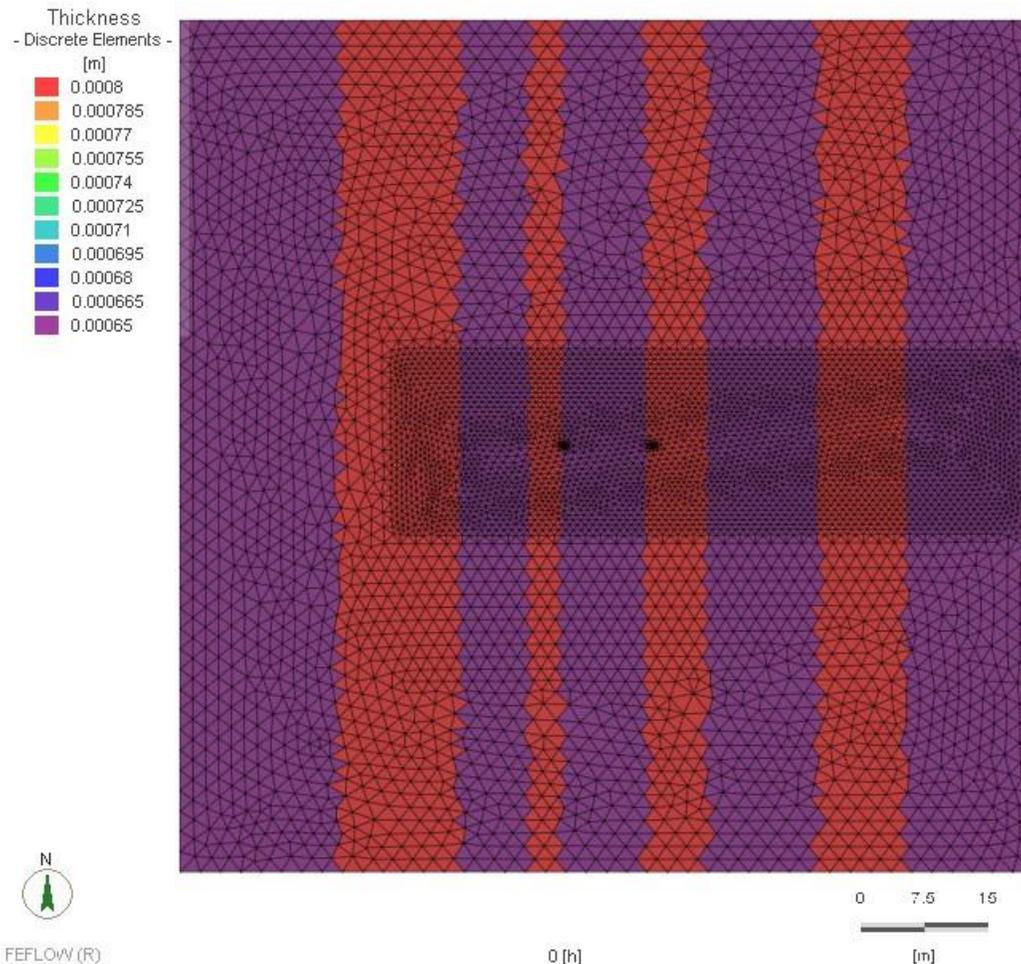


Figura 2.3: Geomodelo de simulación de canales perpendiculares al flujo E-W.

La implementación del efecto de canales en los códigos numéricos no reviste de mayor dificultad y la mayoría de los modelos computacionales que resuelven flujo y transporte en planos discretos de fractura pueden simular el efecto *channeling* (Bodin et al., 2003a). Lo anterior se consigue sumando un parámetro de espaciamiento de fractura, que en la mayoría de los códigos numéricos es variable, y asignar a distintos elementos de la grilla distintos valores de espaciamiento obteniendo como resultado un modelo de canales. Especial cuidado debe tenerse en que el modelo cuente el cambio en la conductividad hidráulica asociado al incremento o disminución del espaciamiento, ya que como se ha revisado están en íntima relación debido a que la primera se calcula a partir de la ley cúbica. Un ejemplo de una grilla con distintos valores de espaciamiento que simulen canales se puede observar en la Figura 2.3, donde los canales se ubican perpendiculares al flujo que ocurre en dirección E-W.

### 2.3.1.2 Dispersividad

La advección no solo trabaja movilizandando masa, sino que tiende a separarla, o dispersarla, si es que existen cambios en el sentido de la velocidad

a lo largo del recorrido del soluto. Para imaginarlo puede hacerse el ejercicio de inyectar con una jeringa de radio  $R$  un trazador en un medio acuoso fluyendo en un sentido, si es que no existiera dispersión el soluto avanzaría formando un cilindro de radio  $R$  a medida que se inyecta hasta acabar el input, luego de lo que se mantendría con esa forma avanzando con el flujo. Al tener dispersión en el medio lo que ocurre es que las partículas se separan de este cilindro porque experimentan aceleraciones producto de la geometría de los poros o del medio por donde se mueve (en el caso del interior de una fractura pueden ser pequeñas variaciones en el espaciamiento) formando una pluma de contaminante como se observa en la Figura 2.4. En ésta los colores más cálidos indican mayores concentraciones y los más fríos concentraciones menores. De no existir dispersión la forma de la pluma debiera ser tubular coincidente con el área del ingreso de contaminante. Es así como la dispersividad puede ser vista como la evolución del tamaño de la pluma de contaminante o bien como la evolución de la concentración de soluto en el espacio, ya que la dispersión es responsable también de la extensión en los tiempos de llegada de las partículas trazadoras (Bodin et al., 2003a).

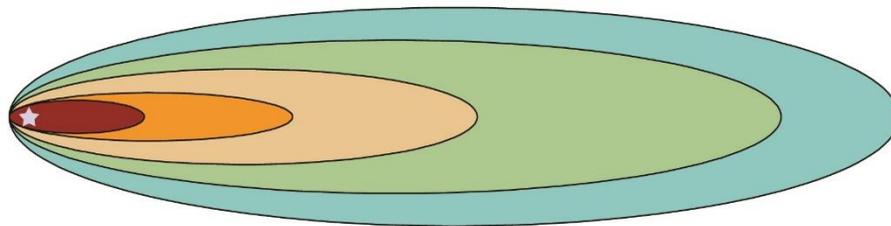


Figura 2.4: Pluma contaminante producto del efecto de dispersión.

La dispersión tiene unidades de  $L^2T^{-1}$  y matemáticamente está descrita por:

$$D_x = \alpha_x |\bar{u}| \quad (16)$$

Con  $\alpha_x$  [L] el coeficiente de dispersividad en dirección  $x$  y  $\bar{u}$  [ $LT^{-1}$ ] velocidad promedio del fluido.

Se debe hacer una salvedad, ya que otros procesos pronto a revisar como la difusión o reacciones fisicoquímicas del soluto en el sistema fractura-matriz también tienden a separar la pluma de contaminante, en este sentido nos referiremos en este apartado sólo a la causada por las diferencias de velocidad asociadas a la geometría del medio, conocida como dispersión hidrodinámica.

Una primera aproximación al concepto de dispersividad corresponde al desarrollado por Taylor (1953) y Aris (1956). La dispersión Taylor-Aris se sustenta en el perfil parabólico de velocidad sufrido por un flujo laminar entre dos placas paralelas, principio que en rocas fracturadas se mantiene válido

localmente pese a que su forma varíe a lo largo del plano de fractura (Bodin et al., 2003b), por lo que el uso de la dispersión de Taylor-Aris puede extenderse a casos más allá de flujo en placas paralelas.

En la Figura 2.5 se observa la evolución de la dispersión de Taylor-Aris desde un comportamiento transiente hasta, después de un tiempo transcurrido o una distancia recorrida, llegar a un estado asintótico. En la figura las dos líneas oscuras marcan dos estadios de la dispersión, uno inicial donde la dispersión tiene su menor valor y otro más cercano al asintótico. Para solutos no reactivos este tiempo crítico (tiempo en llegar al estado asintótico) es proporcional a la dispersión transversal (Bodin et al., 2003a).

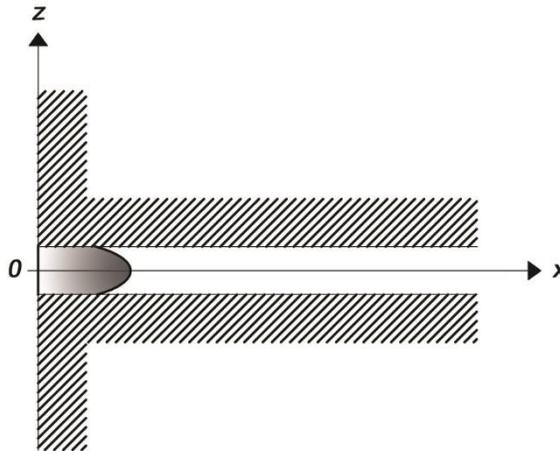


Figura 2.5: Conceptualización de la dispersión Taylor-Aris, extraído de Bodin et al. (2013b).

La rugosidad de la fractura incide directamente en el valor de dispersividad alcanzado al añadir otro mecanismo de dispersión, así este parámetro es mayor en las fracturas más rugosas que en las más lisas donde la dispersión de Taylor-Aris es la única fuente dominante de dispersión hidrodinámica. Ippolito et al. (1993) demostró que la dispersión Taylor-Aris no es suprimida por la rugosidad de la fractura sino sobreimpuesta a ésta trabajando ambas en conjunto.

Las variaciones de apertura tienen efecto importante en el flujo advectivo, influyendo también directamente en la dispersión hidrodinámica, ya que éstas se encargarán de cambiar la dirección del vector velocidad. Para observar el cambio, sin embargo, se requiere que dichos canales sean caminos independientes con velocidades contrastantes: si existen zonas de mezcla que conecten dichos canales, éstas funcionarán como estabilizadores de velocidad, lo que significará en una menor diferencia de velocidad plasmado en una menor dispersión del contaminante. Moreno (1988) propone que la dispersión producto de variaciones en la apertura puede ser obviada si existe una zona de mezcla lo suficientemente grande entre los canales o los caminos preferenciales de flujo que funcione como homogeneizador de velocidades. La contribución relativa propuesta por Roux et al., (1998) indica que a altas

velocidades de fluido el mecanismo predominante es la dispersión de Taylor-Aris mientras que en condiciones naturales de flujo el mecanismo predominante es producto de variaciones de apertura. Estas consideraciones deben ser tomadas en cuenta a la hora de analizar los modelos generados, especialmente en flujos regionales.

Así, la dispersión hidrodinámica en fluidos no reactivos es consecuencia de hasta 3 mecanismos que en fracturas suelen funcionar en conjunto: Dispersión Taylor-Aris, Dispersión debido a rugosidad y dispersión asociada a cambios en la apertura de la fractura. Para el caso de fluidos reactivos Berkowitz & Zhou (1996) establecieron que los mecanismos de dispersión pueden interactuar y sus contribuciones relativas a la dispersión total dependen de la velocidad del fluido, mientras algunos pueden obviarse a algunas velocidades en otras son el principal componente.

### *2.3.1.3 Difusión Molecular*

El tercer mecanismo de movimiento de masas corresponde a la difusión molecular, producto de la diferencia de concentraciones entre el fluido y la matriz rocosa. Inicialmente fue despreciado en el cálculo del transporte, pero luego tomado en cuenta y revisado como gran influencia en medios porosos (Bodin et al., 2003a). Algunos autores proponen que la difusión a nivel de matriz puede controlar el movimiento de soluto cuando la porosidad es baja (Grathwohl, 2012), dejando relegado al transporte advectivo o a la dispersión hidrodinámica a un segundo plano.

La difusión tiene unidades de  $L^2T^{-1}$  y matemáticamente está descrita por una forma de la primera ley de Fick:

$$F_d = -nT^*D\nabla c \quad (17)$$

Con  $F_d$  el flujo másico difusivo en la dirección de flujo [ $ML^{-2}T^{-1}$ ],  $n$  [-] porosidad,  $T^*$  [-] la tortuosidad de la fase líquida en la dirección de flujo,  $D$  [ $L^2T^{-1}$ ] el coeficiente de difusión molecular y  $\nabla c$  [ $ML^{-4}$ ] el gradiente de concentración.

Ver en las curvas de concentración qué efectos corresponden a la dispersión y cuáles corresponden a la difusión puede ser complejo, por ejemplo, que la suavización de un peak sea producto de la dispersión o de la difusión molecular no es sencillo de dilucidar. Ante esto Maloszewski & Zuber (1990) proponen el uso de distintos trazadores, donde estos presenten un comportamiento distinto ante la difusión (debido a sus distintos coeficientes difusivos, producto de sus diferentes tamaños moleculares). Si ante el uso de distintos trazadores las curvas de concentración no varían significativamente se puede establecer que el comportamiento observado es producto de otros

mecanismos ajenos a la difusión, si el comportamiento cambia de forma extrema se propone que se explican principalmente por difusión molecular, así por ejemplo en la Figura 2.6 el comportamiento se explica principalmente por este mecanismo.

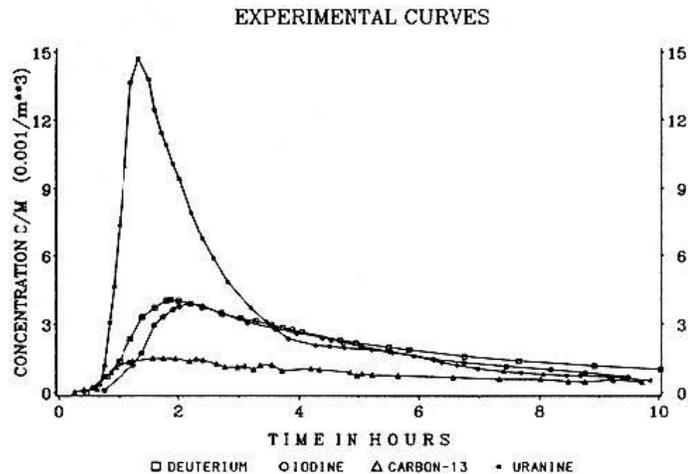


Figura 2.6: Uso de distintos trazadores para distinguir mecanismos de transporte dominantes. Extraído de Maloszewski & Zuber (1990).

Distintas características relacionadas a la matriz porosa pueden influir directamente en la difusión, dependiendo así de la estructura y alteración de la roca. Bodin et al. (2003a) los enlista como la porosidad efectiva, tortuosidad y constrictividad (la tortuosidad aumenta trayectorias de transporte al hacer que los caminos de difusión no sean paralelos al gradiente de concentración y la constrictividad, al aumentar el diámetro de la sección perpendicular a lo largo del flujo, reducirá las áreas de difusión). Bradbury & Green (1986) establecieron, mediante experimentos realizados sobre granitos, que la alteración de la roca puede aumentar las propiedades difusivas por un factor de 20 a 200. Moreno & Neretnieks (1993a) establecieron que lo anterior se debe a que el relleno de fracturas (producto de alteración) no afecta este mecanismo de transporte, pese a que lo importante en flujos difusivos es la superficie libre de contacto entre el fluido y la roca fracturada. Moreno (1988) propone que el efecto de canales disminuye la dispersión producto de mecanismos difusivos pues tiende a reducir la superficie de contacto efectivo entre matriz y fluido proponiendo que el sistema difusivo se puede separar en tres comportamientos: intercambios másicos entre canales y matriz, intercambios entre canales y zona estancada e intercambios entre zona estancada y matriz.

Pese a que los procesos difusivos son largos, sus efectos llevan a retrasar los tiempos de llegada de los peaks y disminuir su concentración. De acuerdo a Sudicky & Frind (1982), que mostraron comparando con resultados obtenidos de expresiones analíticas, los tiempos de llegada de trazadores en sistemas porosos en donde se consideró la difusión de matriz eran

considerablemente mayores a los donde no se consideró, incluso para rocas cristalinas. Novakowski & Bogan (1999) experimentaron en rocas con porosidad de 1%: en distancias de viaje mayores a 100 metros y tan solo considerando difusión en la matriz lograron retrasar en medio orden de magnitud los tiempos de llegada de los peaks de concentración y disminuir su valor máximo en 1 orden de magnitud. Es así como efectos de difusión de matriz no deben ser obviados ya que, producto de las características del medio como fracturamiento o alteración, pueden tener un mayor impacto que el esperado para medios no permeables como rocas cristalinas.

#### *2.3.1.4 Reacciones de Sorción*

Al pensar en procesos difusivos resulta difícil no considerar que el contaminante interactúe y reaccione con el medio por el cual se está moviendo, es en relación a procesos fisicoquímicos que el movimiento de masas suele sufrir de un retardo. Las reacciones consideradas son variadas y comprenden en general procesos de sorción, disolución, reacciones de óxido-reducción, decaimiento de solutos entre otros.

La sorción corresponde a la combinación de dos procesos: absorción y adsorción de masa en la matriz rocosa. El primero corresponde a la incorporación de soluto a la matriz, mientras que el segundo corresponde a la retención en superficie (sin asimilación) del soluto en las paredes de los sólidos del acuífero (como pueden serlo rugosidades o paredes del mismo).

La mayoría de estas reacciones son relativamente rápidas y alcanzan el equilibrio desde los pocos minutos a horas (Fitts, 2013). Este tiempo se puede ver incrementado si la matriz juega un factor importante en los sitios de sorción (como puede ser un espacio intraporo, con agua estancada). A diferencia de la que fluye por un canal de la fractura.

El formalismo matemático para incluir las reacciones de sorción comprende un factor retardante  $R$ . Esta constante compara las velocidades de movimiento de masas incluyendo reacciones de sorción versus la situación sin incluirlas. Una buena analogía propuesta por Fitts (2013) es imaginar una huincha transportadora con naranjas como la de la Figura 2.7, si no tomamos en cuenta reacciones es como dejar transportar las naranjas sobre la huincha y la velocidad de avance de naranjas es la de la huincha (en el caso del transporte de soluto corresponde al flujo advectivo). Al considerar reacciones de sorción el análogo es sacar naranjas del frente de avance (solute adsorbiéndose en sorbente) y ponerlas en el fin de la cola (solute sorbente volviendo a pluma contaminante). En este caso las naranjas avanzan más lento que la correa y se requiere aplicar un factor retardante a su velocidad para obtener la velocidad de transporte de las naranjas (o de la pluma en el medio saturado).

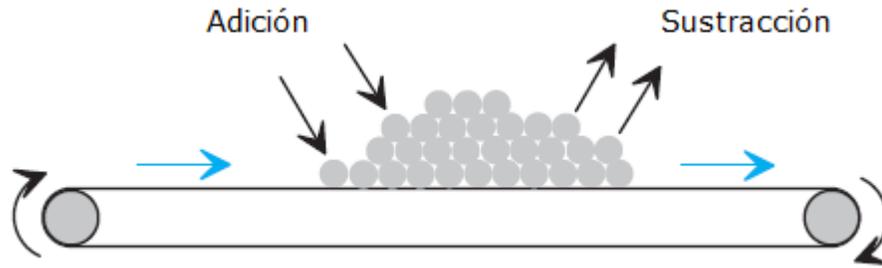


Figura 2.7: Análogo a reacciones de sorción, extraída de Fitts (2013).

Las ecuaciones que modelan esta variación de velocidad son las siguientes:

$$\bar{u}_s = \frac{\bar{u}}{R} \quad (18)$$

Con  $\bar{u}_s$  la velocidad de avance de soluto considerando sorción,  $\bar{u}$  la tasa promedio de avance de soluto y  $R$  el factor retardante definido por:

$$R = 1 + \frac{\rho_b K_d}{n} \quad (19)$$

Con  $\rho_b$  la densidad total seca del acuífero,  $n$  porosidad y  $K_d$  corresponde al coeficiente de distribución definido por:

$$K_d = \frac{C_{ad}}{C_{aq}} \quad (20)$$

Este coeficiente relaciona la concentración adsorbida  $c_{ad}$  [ML<sup>-3</sup>] con la concentración acuosa  $c_{aq}$  [ML<sup>-3</sup>] del contaminante, ambas alcanzadas en el equilibrio. Los supuestos para establecer esta relación son un valor constante para el coeficiente de distribución, único para cada par acuífero/soluto.

Existen muchas situaciones en que un modelo de retardo simple como el que aquí se propone no es aplicable debido a que los supuestos mínimos no se cumplen, por ejemplo, la existencia de un valor constante del coeficiente de distribución no aplica generalmente en metales (Fitts, 2013). A su vez el supuesto de equilibrio no debe siempre usarse, ya que la difusión molecular limita el flujo de moléculas de soluto a algunos sitios de sorción, es así como una porción significativa de sitios de sorción preferencial no está disponible (producto, por ejemplo, de canales preferenciales de flujo). También algunos poros están medianamente aislados y al estancarse la difusión es el único mecanismo para llevar a las moléculas de soluto a sitios de sorción. En base a esto, este modelo de retardo simple debe de tratarse con cuidado.

En el caso de rocas cristalinas fracturadas de baja porosidad primaria, Abelin et al. (2013a) propone que, debido a que la difusión en la matriz es un mecanismo lento, la sorción ocurre principalmente en superficies de fracturas cuando el flujo es rápido.

Es así como para describir el movimiento de masas una buena aproximación debe contar con advección, dispersión, difusión y reacciones de sorción, Todos estos procesos deben ser considerados en los modelos numéricos y han de estar representados en las ecuaciones gobernantes de flujo y transporte como se verá en breve.

### 2.3.2 Ecuaciones Gobernantes: Masa

Para deducir las ecuaciones gobernantes de transporte de masa se sigue un razonamiento similar al propuesto para estudiar las ecuaciones de flujo. Los índices y subíndices  $x$  corresponden a la deducción de los parámetros en la dirección  $x$ , la diferencia con el caso anterior es que se consideran como entradas y salidas los flujos advectivos (ec. (15)) y difusivos (ec. (17)). Al considerarse además la tasa de cambio de soluto guardada en el elemento y pensando los límites cuando  $\Delta x \rightarrow 0$  como derivadas espaciales se obtiene la ecuación base para definir el transporte másico:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(q_x c) + \frac{\partial}{\partial x}\left(nD_{mx} \frac{\partial c}{\partial x}\right) = \frac{\partial(cn)}{\partial t} \quad (21)$$

Donde el primer término describe el transporte por dispersión, el segundo por advección y el lado derecho de la igualdad evidencia la tasa de cambio de concentración de soluto.

Si consideramos que la  $D_{mx}$  como constante, independiente de la dirección, se divide por la porosidad y se consideran las tres direcciones de movimiento, se obtiene la ecuación estándar tridimensional para transporte de masas debido a advección y difusión (de soluto no reactivo). Se puede escribir en su forma simple y notación laplaciana, respectivamente:

$$D_{mx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}(\bar{v}_x c) + D_{my} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial y}(\bar{v}_y c) + D_{mz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z}(\bar{v}_z c) = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (22)$$

$$D_m \nabla^2 c - \nabla(\bar{v}c) = \frac{\partial(c)}{\partial t} \quad (23)$$

Para el caso de transporte de masas con decaimiento y reacciones de sorción deben incluirse dos términos al lado izquierdo (puesto que influyen en el transporte y no en la tasa de cambio). En primer lugar está el efecto de la

desintegración radiactiva, en términos de la constante de desintegración del contaminante  $\bar{\lambda}$ . Para la sorción debe incluirse el factor retardante R, que actúa sobre los términos de transporte dispersivo y advectivo. Una vez aplicadas ambas, la ecuación gobernante de transporte de masas que considera desintegración y reacciones de sorción se expresa como:

$$\frac{1}{R} [D_{mi} \nabla^2 c - \nabla(\bar{v}_i c)] - \bar{\lambda} c = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (24)$$

Si bien la Ecuación 24 es la forma más general para describir el transporte másico, en el ajuste desarrollado en esta memoria no se observan variaciones por efectos retardantes o de decaimiento radiactivo, entonces nodo a nodo la ecuación que se resolverá será la 25.

$$D_{mi} \nabla^2 c - \nabla(\bar{v}_i c) = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (25)$$

### 2.3.3 Condiciones de Borde: Masa

El enfoque que se les dará a las condiciones de borde es en su efecto en los mecanismos que, posteriormente, serán utilizados en la deducción de las ecuaciones gobernantes. En los códigos numéricos puede tratarse de un post procesamiento de datos a efectuarse luego del cálculo numérico nodo a nodo, explicado en la sección 2.5.

La primera condición de borde es la de imposición de concentración  $c_b$ , usualmente mantenida en el tiempo y aplicable sobre nodos, líneas o superficies. Esta CB tipo Dirichlet impone la siguiente relación:

$$c(x, y, z, t) = c_b \quad (26)$$

Dónde x, y, z y t evidencian la posición y el tiempo sobre el que se aplica la condición de borde. Al tener ya la concentración asignada no debe realizarse cálculo alguno para determinar la masa.

La segunda condición de borde, tipo Neumann impone un flujo másico  $F_b$  producto del transporte. Así, al considerar el transporte producto de advección y difusión en las ecuaciones (15) y (17) se obtiene:

$$q_b c - n T_X^* D \nabla c = F_b \quad (27)$$

Con todos los otros parámetros definidos anteriormente.

## 2.4 Procesos de Transporte de Calor

### 2.4.1 Mecanismos de Transporte de Calor

Para entender el transporte calórico debe existir una comprensión previa de conceptos como energía, calor, temperatura, entalpía y entropía que escapan al alcance de esta memoria. Para su entendimiento se remite al lector a los apuntes de Fitts (2013) donde existe una buena introducción a estos tópicos.

El calor en subsuperficie se mueve principalmente en dos formas, migra por vibración intermolecular (conducción), sin la necesidad de un movimiento de fluidos, o aprovechando el flujo de forma advectiva. Otras formas de transporte de calor incluyen la dispersión termal y transferencia de calor radiactivo, que son generalmente insignificantes en relación a los dos mecanismos recién propuestos y por tanto o considerados en las ecuaciones gobernantes.

Para la simplificación a la hora de comprender los fenómenos de transporte de calor, se asumirán condiciones de equilibrio local entre la temperatura de la matriz sólida ( $T_s$ ) y la del fluido ( $T_f$ ) a una temperatura  $T$ . En caso de que no exista tal equilibrio el cálculo nodo a nodo se realizará para las distintas fases (sólida y líquida), ponderadas según abundancia, de acuerdo al valor de la porosidad (" $n$ " y " $(1-n)$ ") y luego sumadas obteniendo así el balance energético asociado a cada nodo.

#### 2.4.1.1 Conducción

La conducción está descrita matemáticamente por la ley de Fourier, con  $T$  [ $\Theta$ ] temperatura y  $q_c$  flujo conductivo en dirección de máximo gradiente, con unidades de  $W/m^2$ :

$$q_c = -\lambda \nabla T \quad (28)$$

Nótese que es idéntica conceptualmente a la ley de Darcy para medios porosos, siendo  $q_c$  análogo a la velocidad de Darcy y con  $\lambda$  correspondiendo a conductividad térmica [ $MLT^{-3}\Theta$ ]. Se debe tener precaución si en subsuperficie existe más de un medio capaz de transmitir calor por conducción con propiedades contrastantes como lo son la matriz y el fluido intraporo. Para esto se puede establecer un coeficiente de conductividad térmica equivalente como el señalado por Sass et al. (1971):

$$\lambda = (\lambda_s)^{1-n} (\lambda_f)^n \quad (29)$$

Donde los coeficientes  $s$  y  $f$  corresponden al medio sólido y fluido respectivamente, con  $n$  porosidad.

#### 2.4.1.2 Advección

Ya se ha estudiado la advección en este documento por lo que su revisión no será en extenso. Es necesario distinguir que también tiene su contraparte en el transporte calórico y matemáticamente está descrito por la siguiente relación:

$$q_a = q\rho H \quad (30)$$

Con  $q_a$  flujo advectivo,  $q$  [ $L^3T^{-1}$ ] al flujo por unidad de área,  $\rho$  [ $ML^{-3}$ ] densidad del fluido y  $H$  [ $EM^{-1}$ ] entalpía por unidad de masa en el fluido.

Al igual que en el caso anterior, para casos donde existe más de una fase, la solución se remite a una suma ponderada de todas las fases participantes como se expresa como una suma de  $n$  fases:

$$q_a = \sum_{i=1}^n q_i \rho_i H_i \quad (31)$$

Al considerar los efectos de calor, una de las principales precauciones que se debe tener son los cambios en la viscosidad y densidad que las diferencias de temperatura generen en el modelo, ya que estos parámetros influyen directamente en las propiedades de transporte por lo que resulta pertinente revisar en breve sus repercusiones.

#### 2.4.2 Ecuaciones Gobernantes: Calor

Para deducir las ecuaciones de transporte de calor el razonamiento, similar a los anteriores, consiste en ver la tasa de cambio en la energía guardada por un elemento y entenderla como resultado de los flujos de energía saliente, entrante y la generada en el propio volumen.

Recordando de secciones anteriores conceptos como flujo conductivo, flujo advectivo, entalpía y entropía, la ecuación unidimensional estándar gobernante de transporte de calor en medios permeables saturados está descrita por:

$$-\nabla q_c - \nabla q_a + S_i = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_t H_t) \quad (32)$$

En el caso que exista el supuesto ya planteado de equilibrio local de

temperatura entre fases, la Ecuación (32) puede reorganizarse, reemplazar los valores de flujo advectivo/conductivo y con ello, si los cambios en entalpia son producto principalmente por cambios de temperatura, reemplazarse por:

$$\nabla(\lambda\nabla T) - \nabla(q_w\rho_w c_w T) + S_i = \frac{\partial}{\partial t}(\rho_t c_t T) \quad (33)$$

En donde los valores de  $\lambda$  corresponden a una suma de conductividad térmica ( $\lambda_{eq}$ ) y a la dispersión térmica ( $\lambda_{dis}$ ):

$$\lambda = \lambda_{eq} + \lambda_{dis} \quad (34)$$

$$\lambda_{eq} = (1 - n) * \lambda_s + n * \lambda_{liq} \quad (35)$$

Y la capacidad volumétrica total corresponde a una suma ponderada (dependiendo de la porosidad) de las capacidades volumétricas del sólido y fluido:

$$\rho_t c_t = (1 - n) * \rho_s c_s + n * \rho_{liq} c_{liq} \quad (36)$$

El uso del supuesto de equilibrio térmico local es razonable cuando se trabaja con un enfoque macroscópico del problema y en este caso el intercambio de calor entre el sólido y el líquido es mucho más rápido que el flujo (Saeid et al., 2014).

Nótese en la ecuación anterior la presencia de  $q_w$ . Esto indica que un modelo de transferencia de calor válido debe estar acoplado a uno de flujo. Otros ejemplos donde existe acoplamiento con el transporte de masas se pueden encontrar en Simmons (2001), en ese caso el acoplamiento viene dado por el efecto de la temperatura en la densidad, acoplada linealmente con la concentración según la relación:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial C}(C - C_0) \quad (37)$$

#### 2.4.3 Condiciones de Borde: Calor

El funcionamiento de las condiciones de borde en el transporte calórico sigue las mismas directrices que en el transporte másico, las cuales se presentan a continuación.

La primera condición de borde es la de imposición de temperatura  $T_b$  en un borde, usualmente mantenida en el tiempo y aplicable sobre nodos, líneas o superficies. Esta CB tipo Dirichlet impone la siguiente relación:

$$T(x, y, z, t) = T_b \quad (38)$$

Dónde  $x$ ,  $y$ ,  $z$  y  $t$  evidencian la posición y el tiempo sobre el que se aplica la condición de borde. La segunda condición de borde, tipo Neumann impone un flujo calórico  $F_b$  producto del transporte. Así, al considerar el transporte producto de advección y difusión de la Ecuación (33) se obtiene:

$$-\nabla q_c - \nabla q_a + S_i = F_b \quad (39)$$

Con todos los parámetros definidos anteriormente.

## 2.5 Influencias de Densidad y Viscosidad en el Transporte

Ghebart et al. (1988) propone que los gradientes de densidad causados por diferencias en la concentración y/o temperatura juegan un rol importante en el transporte de solutos en los sistemas de agua subterránea, donde los flujos con grandes diferencias de densidad con respecto a otros tienden a formar inestabilidades en forma lobulada en un proceso conocido como "convección libre". La convección libre es distinta a la convección forzada derivada de flujos advectivos y pueden presentarse en conjunto, fenómeno llamado "convección mixta", que considera el comportamiento producto de factores hidráulicos como los conducidos por la flotabilidad de especies contaminantes en las aguas subterráneas. La convección libre promueve el transporte y es importante principalmente por 3 características: (1) es generalmente más importante que el transporte difusivo, (2) repercute en las dimensiones temporales en el proceso de mezcla acortándolos e (3) incrementa la dimensión de la zona de mezcla, típicamente grande para estos casos Simmons (2001).

El rol que juega el transporte de calor en el modelo resultará en cambios en la viscosidad y densidad que, como ya se revisó, son clave para entender ciertos fenómenos en el transporte de masa por lo que su estudio debiera ser desarrollado en conjunto. Esto se puede lograr con un enfoque de modelo acoplado, donde existe una dependencia en cada ciclo de cálculo de la temperatura en las condiciones de densidad que, a su vez, serán parámetro de entrada en el siguiente ciclo de cálculo. El considerar un modelo acoplado lleva asociado mayores tiempos de modelación y mayores esfuerzos computacionales, pues se agregan varias etapas de resolución matricial para cada volumen de control a considerar.

La variación de temperatura que se espera es producto del montaje experimental es de  $50^\circ \text{C}$ , generando un cambio de densidad cercana a  $-20 \text{ kg/m}^3$  (Kell, 1975), lo que dependiendo de los tiempos de pérdida de calor y distancias de transporte pueden significar cambios considerables por efectos convectivos.

## 2.6 Métodos de Simulación Computacional

Antes de proceder con la modelación en si misma es pertinente hacer una pequeña introducción y comentario de los métodos computacionales que cumplen esta tarea. Se revisarán los dos métodos más importantes de resolución para este tipo de problemas: el método de diferencias finitas (Finite Difference Method o FDM) y el método de elementos finitos (Finite Element Method, FEM). Mayores referencias se pueden encontrar en Fitts (2013), Harbaugh (2005) y Diersch (2014).

Ambos modelos, en vez de usar soluciones analíticas a las ecuaciones generales de flujo, se aproximan a la solución por una serie de ecuaciones algebraicas basadas en relaciones físicas como conservación de masa o la ley de Darcy (al igual que en la deducción de las ecuaciones gobernantes), reduciendo el problema a la solución de un sistema matricial.

### 2.6.1 Método de Diferencias Finitas

El método más ampliamente usado es el de las diferencias finitas, debido a su versatilidad, simpleza y la presencia del software gratuito MODFLOW, implementado por el USGS. El método discretiza el espacio en diferentes bloques regulares (cada bloque con propiedades hidráulicas constantes y homogéneas), formando grillas estructuradas en donde cada elemento está asociado a un nodo, los que pueden estar en los bordes o centrado en el cubo. Un ejemplo de grilla estructurada se muestra en la Figura 2.8.

Las ecuaciones que se establecen resultan de igualar todos los flujos asociados al volumen con la diferencia de carga hidráulica obteniendo, así, la conservación de masas. El nombre de diferencias finitas lo recibe al discretizar el diferencial de carga en tiempos finitos como muestra la siguiente relación:

$$\text{entradas} + \text{salidas} + \text{fuentes o sumideros} = Sdx dy \frac{h(t) - h(t + dt)}{dt} \quad (40)$$

El tiempo sobre el que se realizará la simulación también es discretizado en pasos, siendo los primeros de menor duración que los últimos debido al equilibrio que va alcanzando el sistema.

La Ecuación (40) se puede descomponer para cada una de las caras de los volúmenes que, luego de aplicar restricciones en relación al flujo entre elementos vecinos, generan matrices que definen la solución de la ecuación para la carga hidráulica. Estas matrices son resueltas con métodos iterativos que calculan un valor de carga en cada iteración, el programa sigue iterando hasta que la diferencia de cargas calculada es lo suficientemente pequeña

(parámetro designado según preferencias de usuario).

### 2.6.2 Método de Elementos Finitos

El método de los elementos finitos discretiza el espacio y el tiempo al igual que el DFM. La principal diferencia es que en este caso el espacio está discretizado en triángulos, prismas triangulares o tetraedros siendo bastante más flexible a la hora de establecer distintas geometrías. Las grillas generadas son grillas no estructuradas en su mayoría, donde los elementos no siguen una regla general para su posición espacial, como la que se observa en la Figura 2.8. En la subfigura (a) los nodos siguen reglas claras para su disposición mientras que en la (b) los nodos no siguen reglas establecidas para su posición, sino que cumplen con restricciones geométricas y se ajustan a estas

En el FEM el problema se reduce a descubrir la función de carga hidráulica que discretiza el área a nivel elemental, esto es, determinar la mejor distribución de carga hidráulica dentro de cada elemento triangular. La manera de alcanzar estas funciones es por medio de distintas aproximaciones, de ellas las más utilizadas son: 1. El método Galerkin, donde se minimiza un parámetro llamado "residual" que indica cuanto se aleja la solución para la carga hidráulica a las ecuaciones gobernantes 2. El método variacional, donde se requiere de un parámetro físico a minimizar. En el caso de flujos de agua subterránea puede corresponder a la cantidad de energía mecánica disipada por fricción. Este parámetro físico será minimizado por la mejor aproximación de carga hidráulica.

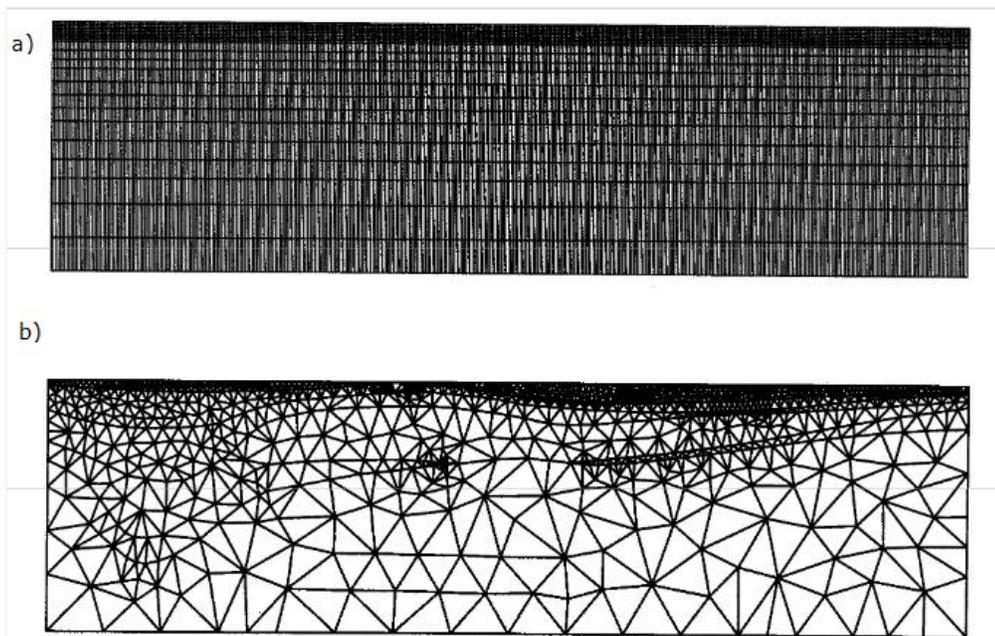


Figura 2.8: (a) Ejemplo de grilla estructurada. (b) Ejemplo de grilla no estructurada. Extraído de Shewchuk (1999).

El planteamiento del formalismo matemático completo de este método escapa a este documento, en caso de ser necesario el lector queda referido al libro de usuario de FEFLOW (Diersch, 2014). No obstante resulta útil hacer, al igual que en el caso de las ecuaciones gobernantes, una introducción de las ecuaciones de un caso básico en donde la aproximación sea según el método Galerkin. En este método de resolución el cálculo de carga se hace a nivel de nodo, encontrando una función de carga hidráulica  $h(x,y)$  que cumple con las ecuaciones de flujo y minimiza el residual. Esta función se calcula según la geometría de los elementos que rodean al nodo objetivo, como se observa en la Figura 2.9.

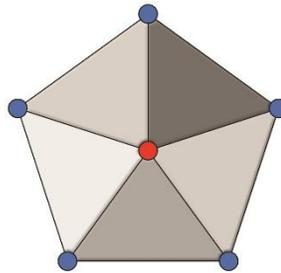


Figura 2.9: Nodo envuelto de elementos definidos por distintos nodos.

Dicho proceso, al igual que en el caso anterior genera una matriz que describe la carga hidráulica para cada punto  $(x,y)$  determinando así la carga hidráulica en el modelo. En la Figura 2.9 el valor de carga será calculado para el nodo objetivo, señalado en rojo, en base a la geometría definida por el resto de los nodos. Este proceso se hace para todos los nodos de la grilla.

### 2.6.2.1 Ecuaciones de Diferencias Finitas

Para introducir las ecuaciones del método de diferencias finitas, entender el funcionamiento de las condiciones de borde y a fin de hacer el análisis lo más abordable posible se revisará el caso de elementos triangulares 2-D en régimen permanente de un acuífero homogéneo gobernado por la ecuación de Laplace. En caso de requerir mayor profundidad, el lector queda referido a los textos de Fitts (2013), Diersch (2014), Hutton (2004) y Wang & Anderson (1982).

Definamos como solución de la carga para los elementos a la siguiente función:

$$\hat{h}(x,y) = \sum_{n=1}^{\text{nodos cercanos}} \hat{h}_n f_n \quad (41)$$

Esta solución estará definida si todos los nodos tienen asignada su carga hidráulica, ya que la carga en cualquier punto dentro de los elementos será una ponderación de los nodos cercanos  $\hat{h}_n$  con una función  $f_n$  (o función base)

que diga cuán rápido decrece el valor de la carga desde el nodo mismo hasta el borde opuesto del elemento. Esta función toma un valor desde de 1 en el mismo nodo a 0 en la arista opuesta al nodo, situación ilustrada en la Figura 2.10 Para la solución se requiere de n ecuaciones de nodos cercanos, es decir una ecuación  $\hat{h}_n$  para cada uno de los n nodos del modelo.

Para cada nodo, al ser  $\hat{h}(x,y)$  solución de la ecuación de Laplace, se obtiene la siguiente relación, donde el miembro en paréntesis es conocido como residual y es quien debe ser minimizado. Esta ecuación entregará el valor de cota hidráulica para cada nodo y con ello cada punto del espacio:

$$\iint_{\mathcal{D}} \left( \frac{\partial^2 \hat{h}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{h}}{\partial y^2} \right) f_n dx dy = 0 \quad (42)$$

Acá el dominio a integrar es todo el modelo, sin embargo la función base sólo tiene valor distinto de cero en los elementos que encierran a cada nodo y se termina integrando sobre un dominio como el de la Figura 2.9. Así el método de elementos finitos determinará un set de cargas hidráulicas  $\hat{h}$  para satisfacer las n ecuaciones (42).

La Ecuación (42) al ser integrada por partes puede ser reducida a la suma de una integral de dominio con una integral de borde (más detalles en Wang & Anderson, 1982):

$$- \iint_{\mathcal{D}} \left( \frac{\partial \hat{h}}{\partial x} \frac{\partial f_n}{\partial x} + \frac{\partial \hat{h}}{\partial y} \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) dx dy + \int_{\mathcal{B}} \frac{\partial \hat{h}}{\partial b} f_n ds = 0 \quad (43)$$

Donde  $\mathcal{B}$  corresponde al borde del dominio  $\mathcal{D}$ , b es la dirección alejándose del nodo y s es una variable definida positiva en sentido de giro antihorario. Esto se realiza para poder incluir condiciones de borde, las cuales se añadirán sobre la integral de línea.

Ahora, el objetivo es entender que realizar la integral de superficie es igual a sumar uno a uno las integrales individuales de los elementos que encierran al nodo objetivo (tal y como muestra la Figura 2.9). Al analizar el primer miembro veremos que en cada elemento las derivadas parciales tanto de  $\hat{h}$  y  $f_n$  son constantes, por lo que la integral se puede considerar una suma en base al área  $A_m$  de cada elemento circundante.

$$\iint_{\mathcal{D}} \left( \frac{\partial \hat{h}}{\partial x} \frac{\partial f_n}{\partial x} + \frac{\partial \hat{h}}{\partial y} \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) dx dy = \sum_{m=1}^{n \text{ elem. circundante}} A_m \left( \left[ \frac{\partial \hat{h}}{\partial x} \right]_m \left[ \frac{\partial f_n}{\partial x} \right]_m + \left[ \frac{\partial \hat{h}}{\partial y} \right]_m \left[ \frac{\partial f_n}{\partial y} \right]_m \right) \quad (44)$$

Las funciones base  $f_n$  solo dependen de la geometría de cada elemento triangular y no de la función carga hidráulica  $\hat{h}$ . En tanto las derivadas parciales que involucran la función de carga hidráulica  $\hat{h}$  son función de los tres nodos que encierran a cada elemento y las derivadas parciales de la función base por lo que finalmente la integral de área de la Ecuación (43) se reduce a:

$$\iint_D \left( \frac{\partial \hat{h}}{\partial x} \frac{\partial f_n}{\partial x} + \frac{\partial \hat{h}}{\partial y} \frac{\partial f_n}{\partial y} \right) dx dy = \sum_{p=1}^{\text{nodos cercanos}} G_p \hat{h}_p \quad (45)$$

En donde  $G_p$  son constantes que dependen de las funciones base del nodo siendo calculado (relacionado con los elementos circundantes que lo envuelven) y de las cargas de estos. Es decir, la integral de superficie se reduce a una ponderación lineal de las cargas de los nodos circundantes al nodo objetivo (6 en el caso de la Figura 2.9) con funciones  $G_p$  que dependen de la geometría y de las mismas cargas.

Consideremos ahora los bordes del modelo para lograr entender la integral de línea de la Ecuación (43):

$$\int_B \frac{\partial \hat{h}}{\partial b} f_n ds = 0 \quad (46)$$

En la Figura 2.10 se encuentra el nodo a calcular (nodo n) y los nodos contiguos (nodo n-1 y nodo n+1). Producto que observamos el borde del modelo sólo interesa entender el comportamiento en los segmentos marcados con L1 y L2, aristas de los elementos 1 y 2 respectivamente, las otras aristas están incluidas en la integral de dominio.

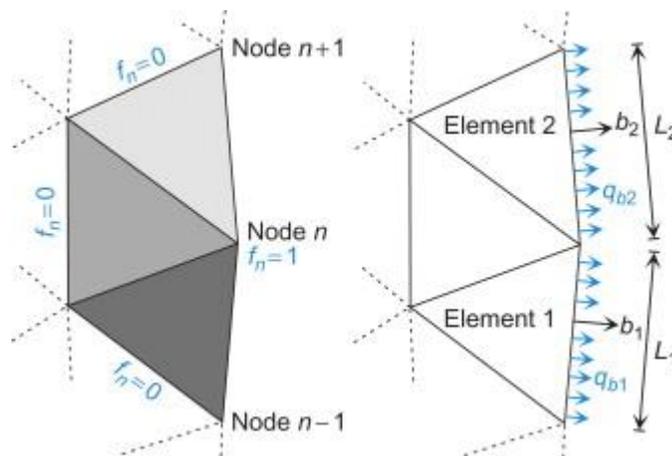


Figura 2.10: Función Base y nodos considerados en cálculo de integral de línea. Extraído de Fitts (2013).

Siguiendo con el cálculo del nodo central, y debido a la función base  $f_n$ , los únicos valores distintos a cero serán los de los segmentos de largo  $L_1$  y  $L_2$ . En ese caso la solución de la integral se facilita pues  $\partial\hat{h}/\partial b$  es una constante para el segmento entre los elementos involucrados y  $f_n$  varía linealmente de 0 a 1. Así, la integral se reduce a una constante:

$$\int_{\mathcal{B}} \frac{\partial\hat{h}}{\partial b} f_n ds = \frac{\partial\hat{h}_1}{\partial b_1} \int_{n-1}^n f_n ds + \frac{\partial\hat{h}_2}{\partial b_2} \int_n^{n+1} \frac{\partial\hat{h}}{\partial b} f_n ds = \frac{\partial\hat{h}_1}{\partial b_1} \frac{L_1}{2} + \frac{\partial\hat{h}_2}{\partial b_2} \frac{L_2}{2} = H \quad (47)$$

Acá  $\hat{h}_1$  y  $\hat{h}_2$  corresponden a las cargas hidráulicas modeladas para los elementos 1 y 2.

Así, reemplazando las relaciones (46) y (48) en la (44) se obtiene la ecuación a computar para cada nodo en la resolución del modelo.

$$\sum_{p=1}^{nodos\ cercanos} G_p \hat{h}_p + H = 0 \quad (48)$$

Este sistema matricial determinará, sin necesidad de conocer  $G_p$ , los distintos valores de  $\hat{h}_p$ , dando la distribución de carga para todo el modelo. Sin embargo para determinar el sistema es necesario determinar  $H$ , lo cual se logra estableciendo condiciones de borde.

### 2.6.2.1 Condiciones de Borde

Ya se mencionó brevemente el efecto en el transporte másico y calórico que tienen las condiciones de borde en las ecuaciones gobernantes. Teniendo ya las ecuaciones del método de elementos finitos puede comprenderse como actúan matemáticamente las condiciones de borde en el flujo, se ejemplificarán en el caso acá descrito (elementos triangulares 2-D en régimen permanente de un acuífero homogéneo gobernado por la ecuación de Laplace con la Ecuación 48 como solución). Detalles aplicados al FEM en las condiciones de borde de transporte de masas, calor y un análisis exhaustivo puede encontrarse en Diersch (2014) y Wang & Anderson (1982).

Cuando se tiene una ecuación de borde de no flujo, el gradiente hidráulico normal al borde  $\mathcal{B}$  es igual a cero ( $\partial\hat{h}_1/\partial b_1 = 0$  y  $\partial\hat{h}_2/\partial b_2 = 0$ ). Con ello, la Ecuación 48 se reduce al sistema determinado:

$$\sum_{p=1}^{nodos\ cercanos} G_p \hat{h}_p = 0 \quad (49)$$

Cuando se tiene una condición de borde de cota hidráulica fija para un nodo (*Fixed Hydraulic Head BC, condición de tipo Dirichlet*), no es necesario generar una función a resolver puesto que ya se tiene el valor de la cota en el nodo.

Cuando el flujo normal al borde es fijo (*Fixed Fluid Flow BC*) se genera una ecuación como la Ecuación 48. En ella el gradiente hidráulico en los elementos del borde,  $\partial \hat{h}_1 / \partial b_1$  y  $\partial \hat{h}_2 / \partial b_2$ , se puede calcular usando la ecuación de Darcy de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \hat{h}_1}{\partial b_1} = \frac{q_{b1}}{K_{b1}} \quad (50)$$

Donde  $b_1$  es el flujo normal al elemento 1 de la Figura 2.10,  $q_{b1}$  es la velocidad de Darcy en dirección de  $b_1$  y  $K_{b1}$  es la conductividad en la dirección  $b$  del elemento  $b_1$ , así reemplazando en la Ecuación 48 se tiene:

$$\sum_{p=1}^{\text{nodos cercanos}} G_p \hat{h}_p + \frac{q_{b1} L_1}{K_{b1} 2} + \frac{q_{b2} L_2}{K_{b2} 2} = 0 \quad (51)$$

### 3. METODOLOGÍA

Para el desarrollo de los objetivos específicos planteados, se propone la realización del trabajo en tres pasos: implementación de modelos en FEFLOW, aplicación de métodos estadísticos para la validación del modelo y finalmente un análisis de sensibilidad a fin de determinar parámetros críticos en el transporte.

#### 3.1 Propuesta de Calibración de Modelo

Con el fin de encontrar nuevas formas de representar flujos calóricos y másicos en roca fracturada, se realizó la implementación de la siguiente configuración experimental para el sitio de investigación en rocas fracturadas de Ploemeur, Francia. Este sitio está localizado sobre un acuífero inmerso en rocas cristalinas fracturadas, que en la zona propuesta corresponde a granitos y mica esquistos en donde se implementó un pozo único de inyección/extracción. Los parámetros de profundidad de fractura, espesor y geometría son desconocidos.

Ambos pozos están separados verticalmente por aislantes neumáticos (*packers*) a una distancia de 10.8 [m], de modo que cualquier respuesta que se obtiene en el pozo de extracción ocurre por medio de transporte a través de la fractura. La configuración experimental se puede observar en la Figura 3.1.

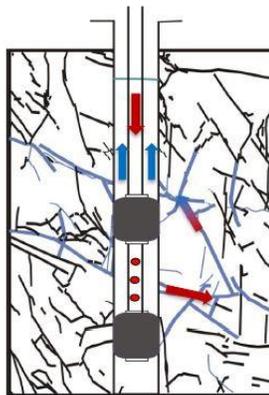


Figura 3.1: Esquema del montaje experimental propuesto, extraído desde de la Bernardie (2017).

Sobre el pozo de inyección se inyectaron fluidos trazables al sistema que posteriormente fueron registrados en el pozo de recuperación. En conjunto con la inyección de masa se propone un escenario de inyección de un pulso de calor a fin de calibrar el modelo para ambas curvas. Para el caso del calor, la respuesta es que la temperatura en el pozo de observación subirá; para el caso del transporte de masas se comenzaron a registrar concentraciones de trazador en el pozo de extracción.

Cabe hacer la distinción que para la inyección de contaminante se utilizaron dos bombas en un mismo pozo, una que inyecta agua con trazador y otra que inyecta agua pura, mientras que para la inyección de calor se considera el uso de una sola bomba. En la Tabla 3-1 (de La Bernardie, 2017) se encuentran los datos experimentales másicos y la propuesta calórica sobre las cuales se propone realizar la calibración del modelo. Se presentan la masa total de trazador a inyectar, la concentración del trazador, el tiempo de inyección y tasas de inyección/ extracción. Para la temperatura se presentan la temperatura inicial del fluido inyectado ( $T_i$ ), temperatura base del fluido en el medio permeable ( $T_0$ ) y el tiempo de inyección. La respuesta experimental másica (de La Bernardie, 2017) y la propuesta para el escenario calórico se observan en la Figura 3.2.

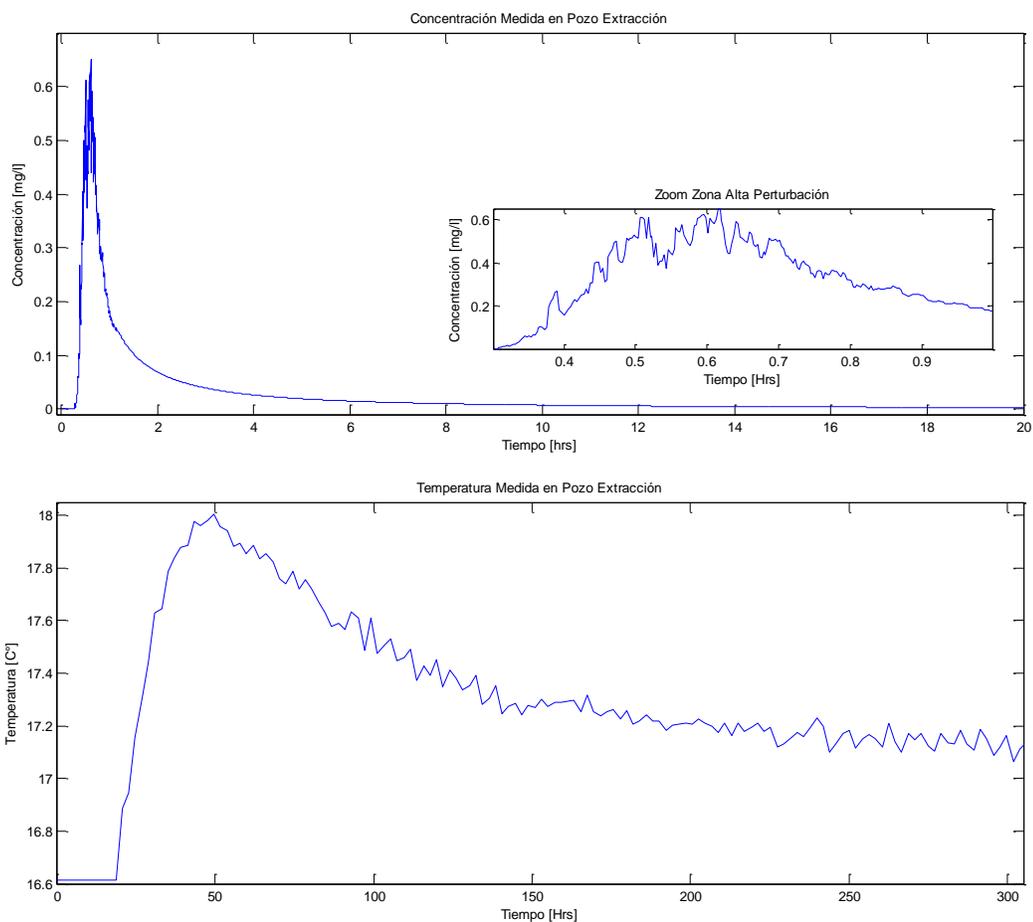


Figura 3.2: Concentración Medida y Temperatura Esperada en Pozos de Extracción.

Tabla 3-1: Parámetros Experimentales.

Masa		Temperatura	
Tasa Inyección Soluto	10 l/min	Tasa Inyección	15.6 l/min
Tasa Inyección Agua	15.6 l/min	Tasa Extracción	15 l/min
Tasa Extracción	22 l/min	$T_i$	56°C
Masa Inyectada	1.4 g	$T_0$	16,6°C
Tiempo Inyección	2 minutos	Tiempo Inyección	15 minutos
Concentración	0,07 g/L		

### 3.2 Implementación de Simulaciones en Software FEFLOW

Se utilizará el software de modelación FEFLOW que resuelve las ecuaciones diferenciales de flujo (tanto para transporte calórico como másico) con el método de elementos finitos.

A fin de encontrar nuevos métodos de resolución para el flujo en rocas fracturadas, la propuesta de configuración experimental se simulará como dos capas impermeables separadas por una discontinuidad que representa la zona permeable y por donde avanza el flujo. Esto es producto que se busca simplificar la zona de fractura como una única superficie horizontal, lo cual es válido ya que al contar con un gradiente hidráulico definido los efectos gravitacionales no son considerables. Cabe mencionar que los pozos de inyección y recuperación se representan por caudales de entrada y de salida. El modelo conceptual por simular y su justificación se ilustra en la Figura 3.3 presentada a continuación:

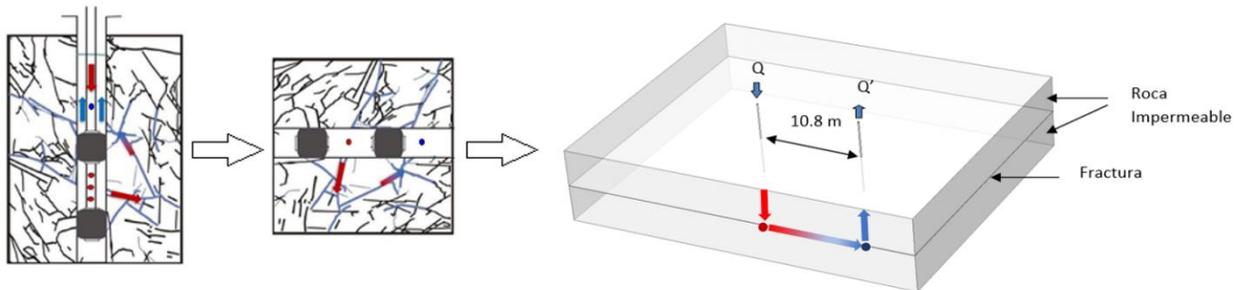


Figura 3.3: Modelo Conceptual del Experimento (modificado desde de la Bernardie, 2017).

En la representación del transporte de masas se implementan dos caudales de entrada, que representan las dos bombas de inyección mientras que para el transporte calórico es necesario sólo un caudal de entrada.

Se espera con el modelo poder hacer simulaciones de distintos escenarios, fáciles de encontrar en acuíferos en roca fracturada. Con ello se pueden implementar simulaciones para el transporte de calor, para el de masa y después de obtener parámetros hidráulicos que ajusten ambas propuestas

experimentales.

La calibración del modelo se realizará en base a iteraciones, es decir, después de obtener resultados con los parámetros default del software se procederán a cambiar distintos parámetros hidráulicos (como por ejemplo espesor de fractura, conductividad hidráulica, porosidad, etc.). Los parámetros base se pueden encontrar en la Tabla 3-2. Cabe mencionar que los valores iniciales de espesor de fractura y conductividad se obtienen por medio de la aplicación de la ley cúbica y se eligen valores de conductividad hidráulica para matriz rocosa dentro del rango de granitos fracturados (Domenico and Schwartz, 1990).

Tabla 3-2: Parámetros Default del Software.

<i>Parámetro</i>	<i>Elementos de Matriz</i>	<i>Elementos de Fractura</i>
Módulo de Gradiente Hidráulico [ ]	0,3	0,3
Espesor [m]	-	0,002
Conductividad en x-y-z [m/s]	3e-13/3e-13/3e-14	0,00528
Almacenamiento Específico [1/m]	0,0001	0,0001
Porosidad [ ]	30%	100%
Constante de Decaimiento [1/s]	0	0
Difusión Molecular [ $10^{-9}$ m <sup>2</sup> /s]	1	1
Coefficiente de Expansión de Calor [1/K]	-	0
Capacidad Volumétrica, Fluido y Sólido [MJ/m <sup>3</sup> /K]	4,2 / 2,52	4,2 / 2,52
Conductividad Termal, Fluido y Sólido [J/m/s/K]	0,65 / 2	0,65 / 2
Parámetro de Sorción [ ]	-	0
Dispersividad Longitudinal para Calor [m]	5	5
Dispersividad Longitudinal para Masa [m]	5	5
Dispersividad Transversal [m]	0,5	0,5

Para la implementación de las simulaciones se considera un modelo de 4 *layers* y 5 *slides* apiladas verticalmente, formado por 15740 nodos, 24744 elementos prismáticos de base triangular y 6186 elementos de características discretas (desde ahora *discrete features elements*, por su nombre en inglés) ubicadas en las caras basales de los elementos en contacto con el *slide* central. Los elementos prismáticos se eligen por la facilidad de establecer una fractura planar en el modelo, definida por las caras basales de estos elementos volumétricos. La configuración para las simulaciones numéricas se puede observar en la Figura 3.4.

Cabe mencionar que en las zonas críticas de transporte, como las que son directamente recorridas por la pluma o los pozos de inyección y extracción requieren una discretización del espacio mucho más fina, es por ello por lo que en la Figura 3.4 se observa que existen tres densidades que van desde

0.00031 a 3.29754 m<sup>3</sup>. Esto se logra al momento de la creación de la grilla, donde basta con poner densidades elementales diferentes, que luego con el comando *gridbuilder* devolverá el resultado obtenido. El comando *gridbuilder* crea grillas bastante regulares dando la posibilidad de refinar en torno a líneas y puntos (representando discontinuidades y pozos, por ejemplo).

Las *discrete features* permiten modelar de manera cómoda zonas con conductividades hidráulicas muy diferentes a las de los elementos circundantes, ya sean zonas con altas o bajas conductividades. Estas características resultan ideales para modelar zonas de fractura o fallas gracias al fácil manejo de parámetros tanto de flujo como de transporte asociados a un sistema de discontinuidades. Adicionalmente existe la posibilidad de elegir distintos modelos de flujo al interior de la discontinuidad, ya sea uno de Darcy, Place-Holder, Manning-Strickler o Hagen-Poiseuille. Las *discrete features* permiten cambiar las propiedades geométricas de la fractura sin alterar el geomodelo.

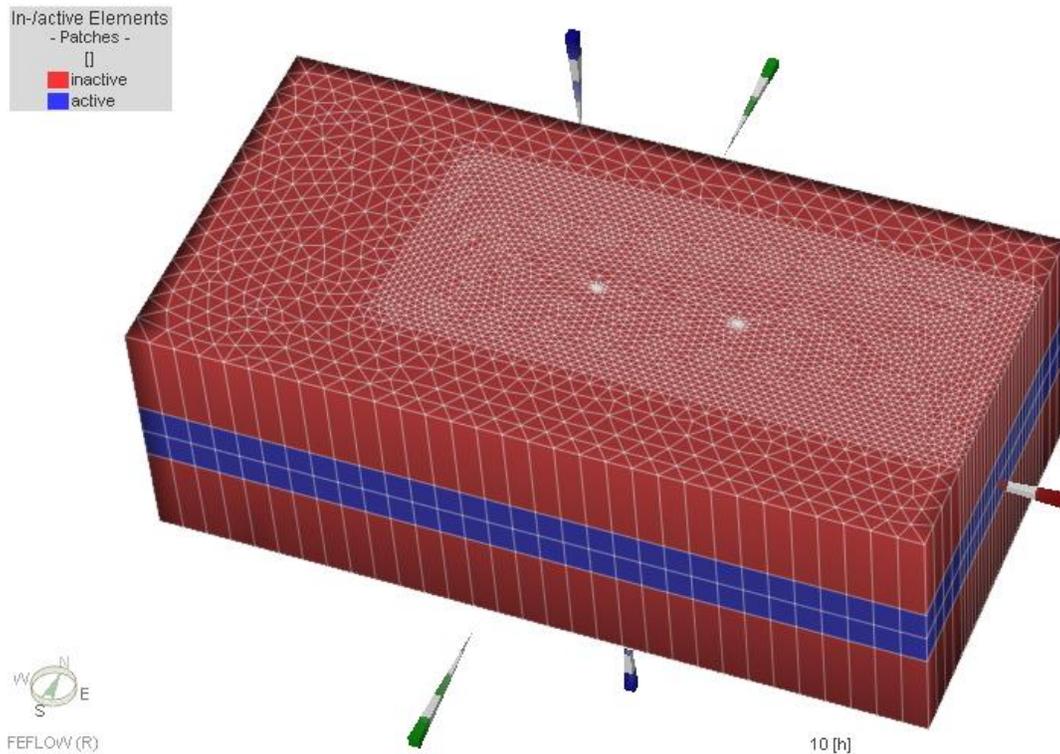


Figura 3.4: Configuración de los modelos numéricos, capas activas e inactivas

En un comienzo se encuentran activas solo las capas contiguas a la *discrete feature* con la posibilidad de extender el modelo a las capas inactivas considerando efectos difusivos o agregando discontinuidades asociadas a las caras basales y laterales de los elementos, teniendo la posibilidad de considerar sistemas de fracturas horizontales o verticales.

La configuración para el ajuste inicial, con las capas activas e inactivas,

se puede observar en la Figura 3.4. La representación de la fractura se encuentra entre las capas intermedias.

Los escenarios a simular se resumen en la Tabla 3-3, presentada a continuación. En la misma se encuentran las condiciones de borde utilizadas que son comunes a ambas y las que corresponden sólo al transporte calórico o másico.

Tabla 3-3: Escenarios Simulados y Condiciones de Borde Implementadas

<i>Escenario</i>	<i>Condiciones de Borde Comunes</i>	<i>Condiciones de Borde Específicas</i>
Transporte Calórico	-Hydraulic Head BC -Well BC	-Fixed Concentration BC -Nodal Source BC
Transporte Másico		-Fixed Temperature BC

La Figura 3.5 presenta la configuración común a ambos modelos para el flujo subterráneo.

Para el transporte de masas y el calórico la evolución del modelo y la representación del mismo varía debido al uso en terreno de una o dos bombas de inyección. Es en base a lo anterior que conviene hacer un análisis por separado y ver como se realiza la representación de los experimentos en ambos modelos:

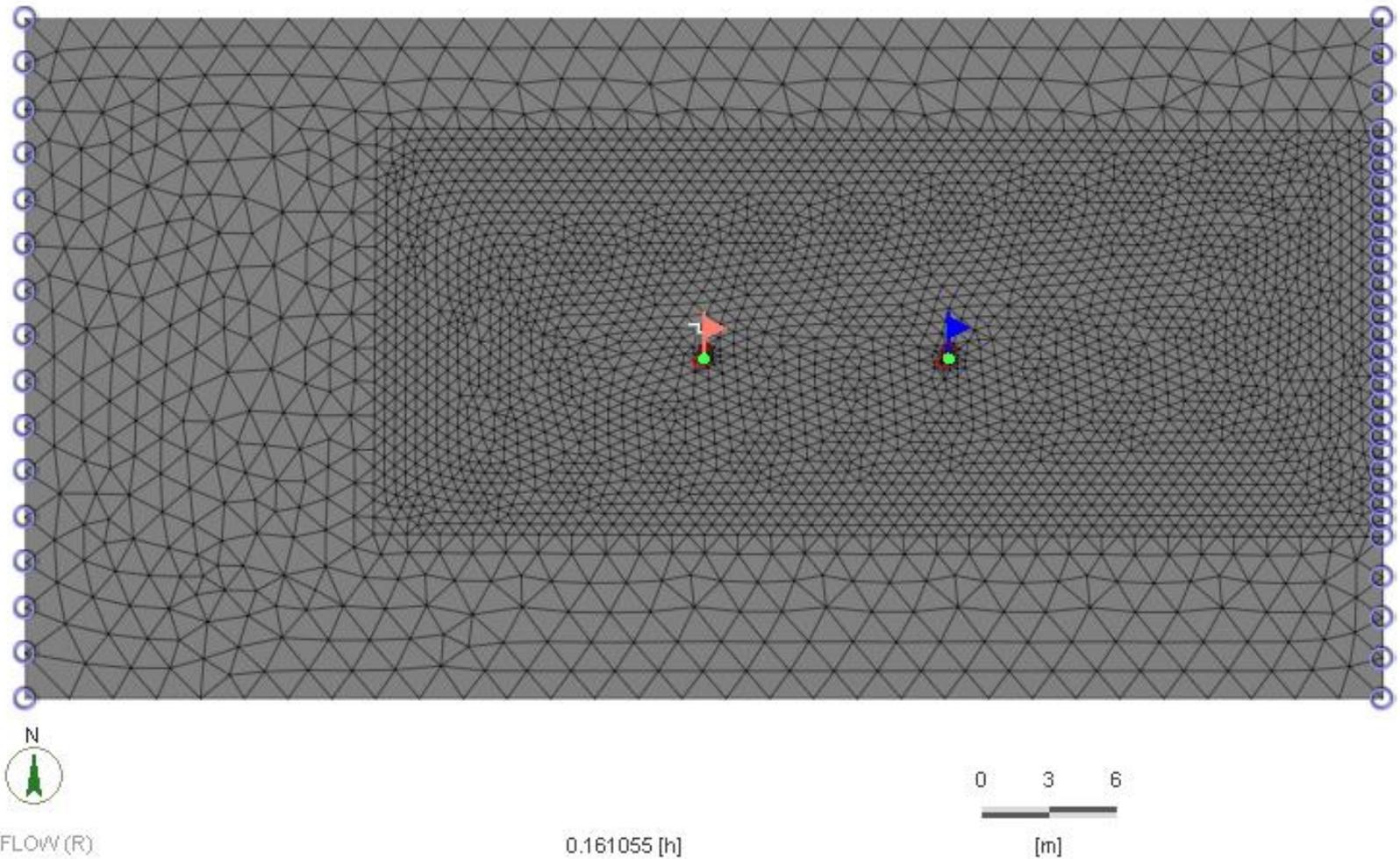


Figura 3.5: Condiciones de Borde de Flujo. Los banderines indican pozos de observación y extracción, los círculos la carga hidráulica y los círculos con flechas rojas indican condición de borde de pozos (adición de agua a un nodo). La marca blanca sobre el pozo con banderín rosa indica que está considerándose una función de modulación, la que cambiará los valores de inyección en el tiempo.

### 3.2.1 Configuración en Simulaciones de Transporte de Masa

Para representar los distintos parámetros presentados en la tabla 2 se debe implementar una doble inyección: por un lado, una inyección de agua sin trazador en combinación con otra que incorpore masa. La Figura 3.6 muestra las condiciones de borde para el transporte másico. Los banderines indican pozos de observación y extracción, los círculos la concentración en el nodo y las líneas bajo éstas restringen la entrada de agua a una concentración de 0 mg/L en los bordes del modelo.

Los modelos numéricos tienen problemas al asignar al mismo nodo más de una condición de borde de velocidad, por lo que aplicar una condición de borde de pozo y al mismo tiempo una de inyección másica puede llevar a la no convergencia del modelo (Diersch, 1998). Es en base a lo anterior que se opta por trabajarlo en dos nodos contiguos aprovechando que en la realidad la inyección másica no es puntual, sino que es dentro de un pozo con diámetro determinado. Esto es válido debido a la fina discretización alrededor del pozo, que permite que ambos nodos estén separados tan sólo por 10cm de diferencia. Esta situación se observa en un zoom de la Figura 3.6, alrededor del pozo de inyección, en la Figura 3.7. Los círculos con flechas rojas representan la inyección másica a la derecha y el pozo de inyección de agua a la izquierda. Sobre ambos existen énfasis de color blanco que indican que existe una función modular afectando su comportamiento en el tiempo de simulación y permitiendo, entre otras cosas, apagar las condiciones de borde (simulando el fin de la inyección, por ejemplo) o modificar sus valores (permitiendo devolver a un solo nodo los flujos asociados a las dos bombas de inyección).

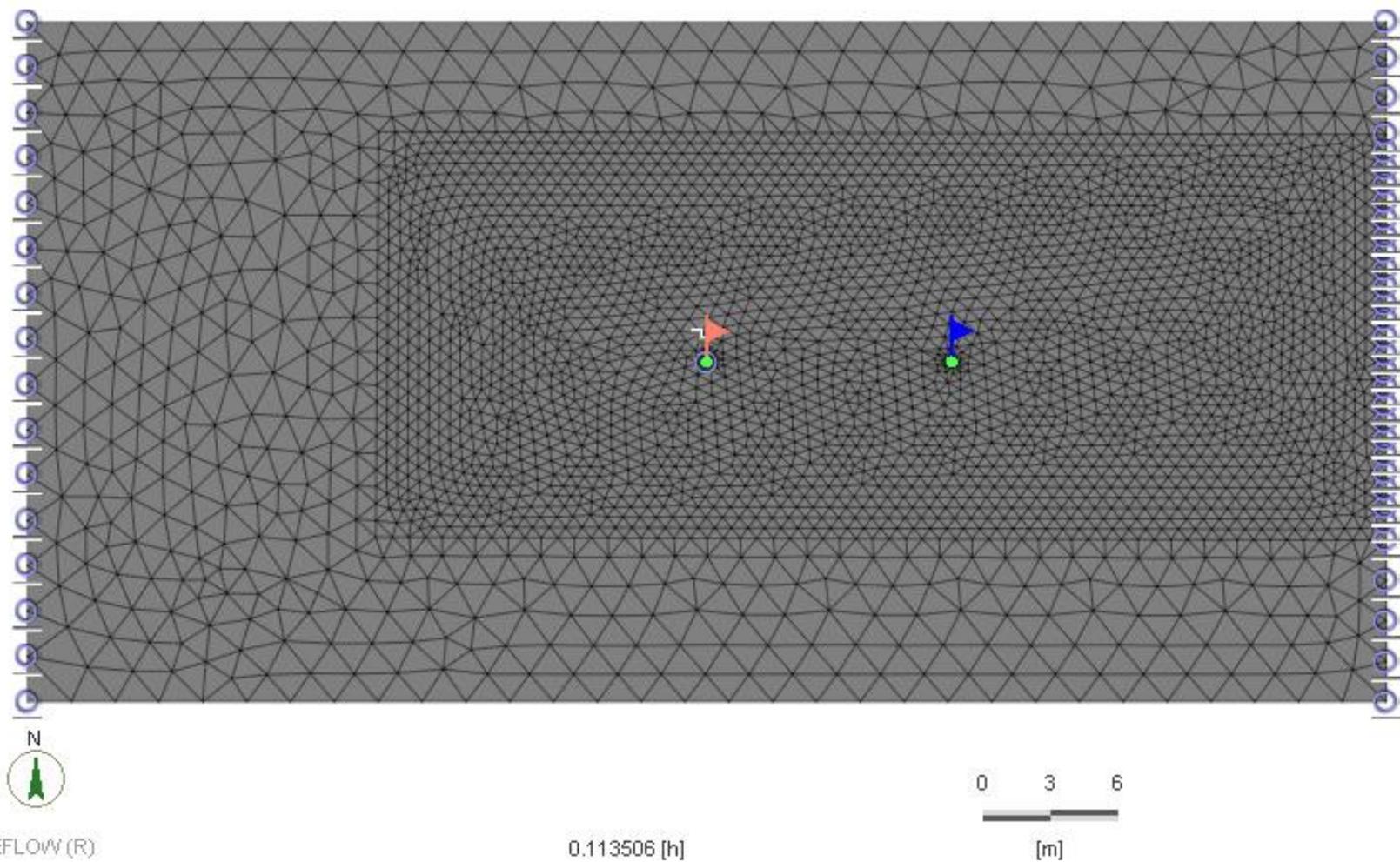


Figura 3.6: Condiciones de Borde para el transporte de Masa. Los banderines indican pozos de observación y extracción, los círculos la concentración en el nodo y las líneas bajo éstas restringen la entrada de agua a una concentración de 0 mg/L en los bordes del modelo.

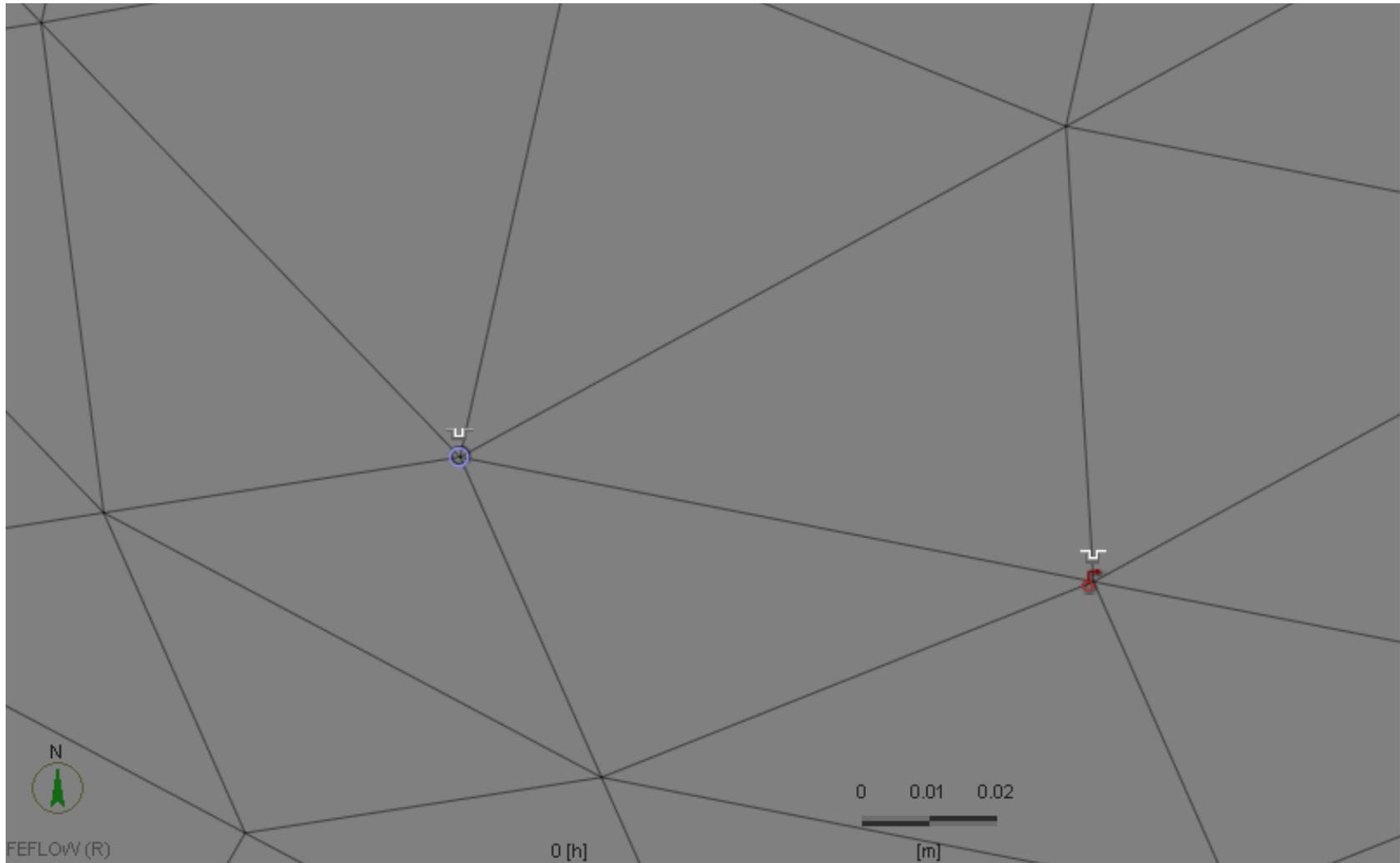


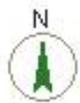
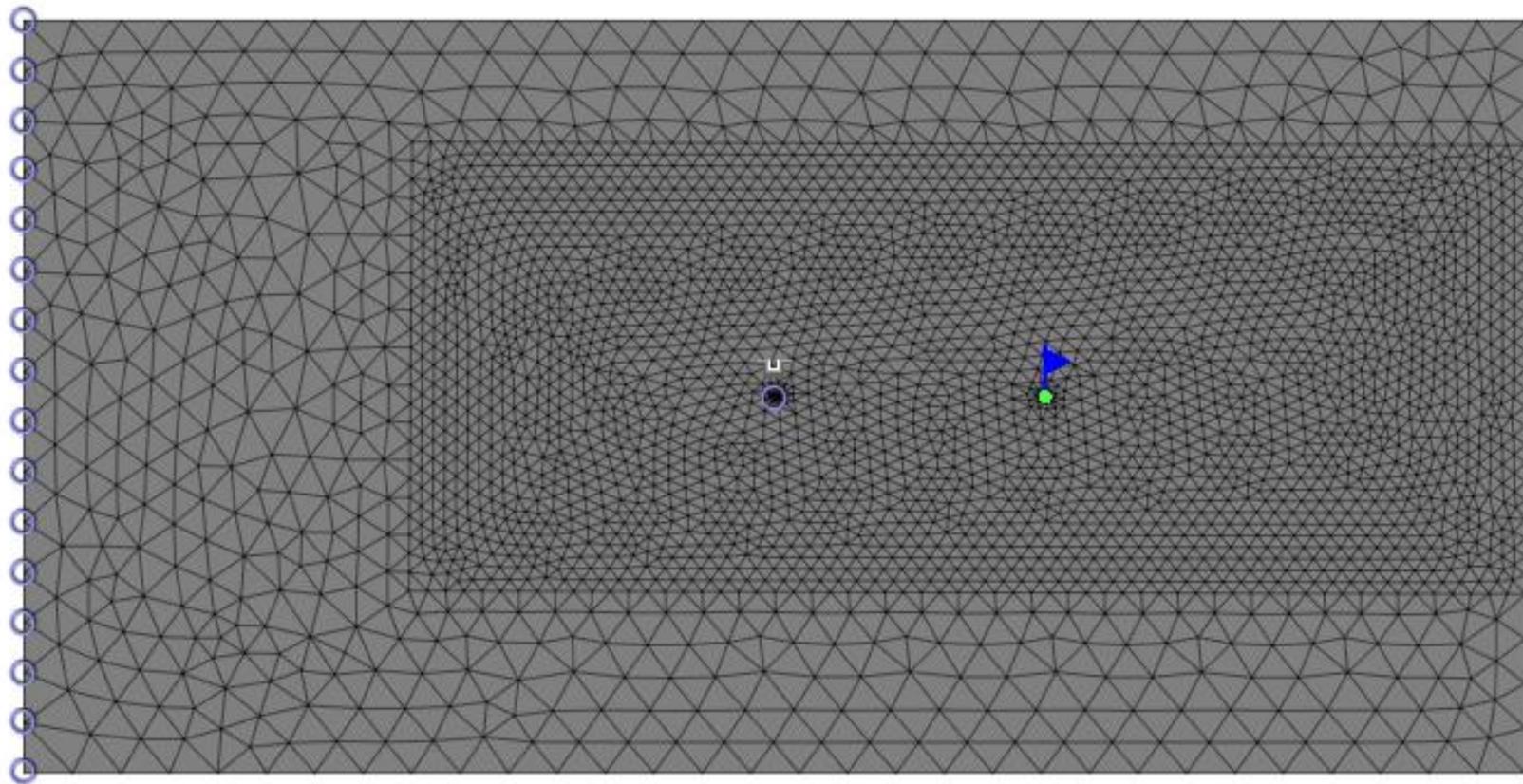
Figura 3.7: Zoom a la zona de inyección de la figura anterior.

Adicionalmente se requiere especificar que el agua infiltrada una vez terminada la inyección de masa es un agua sin trazador, lo cual se logra aplicando una condición de borde de concentración fija 0 mg/L en el nodo sobre el cual se aplica la inyección de agua. El modelo también es forzado a una concentración inicial de 0 mg/L en los bordes para que la única fuente disponible de trazador sea la entregada por la inyección de soluto. Es así como en base a condiciones de borde y funciones de modulación se representa la inyección másica por medio de dos bombas en el modelo de transporte de masa.

### *3.2.2 Configuración en Simulaciones de Transporte de Calor*

Para el transporte de calor la configuración resulta más sencilla al trabajar sólo con una bomba. El modelo calórico se representa como un nodo con temperatura fija, condicionada por una función de modulación, el que es acompañado de las condiciones de borde de pozos para el flujo y temperatura fija para la entrada de agua al modelo. La configuración de las condiciones de borde para el transporte calórico puede encontrarse en la Figura 3.8 presentada a continuación. En ella el banderín indica el pozo de extracción, los círculos la temperatura asociada al nodo y el énfasis blanco sobre ellos indica que está considerándose una función de modulación, la que cambiará los valores de concentración en el tiempo.

Para ambos casos la discretización de tiempo es automática (y creciente), con un salto máximo de 0.05 horas en el transporte másico y 2 horas en el calórico.



FEFLOW (R)

0 [h]



Figura 3.8: Condiciones de Borde para el transporte de Calor. En ella el banderín indica el pozo de extracción, los círculos la temperatura asociada al nodo y el énfasis blanco sobre ellos indica que está considerándose una función de modulación, la que cambiará los valores de concentración en el tiempo.

### 3.3 Aplicación de Métodos Estadísticos

A fin de verificar la validez de la información se propone el uso de herramientas estadísticas. Se utiliza el método basado en eficiencias propuesto por Loague & Green (1991) ya usado en estudios similares (Hecht- Méndez et al., 2010). El método se resume en aplicar la siguiente relación:

$$EF = \frac{\sum_{i=1}^n (X_{(i)} - \bar{X})^2 - \sum_{i=1}^n (X'_{(i)} - X_{(i)})^2}{\sum_{i=1}^n (X_{(i)} - \bar{X})^2} \quad (52)$$

Con  $X_{(i)}$  correspondiente a los resultados experimentales,  $\bar{X}$  al promedio de dichos valores y  $X'_{(i)}$  a los de la simulación de FEFLOW. Así, la aplicación de este método consiste en comparar ordenadamente y uno a uno las discretizaciones de las curvas numéricas con los datos experimentales. Este método devuelve un parámetro, eficiencia, que va de 1 a menos infinito: un valor de máxima eficiencia corresponde a 1, donde las curvas ajustan perfectamente, mientras que un valor de 0 indica que los datos experimentales tienen igual correlación que ocupar el promedio simple de los datos experimentales. Un valor negativo indica que la correlación es peor que el caso anterior. Este método permite proponer rangos aceptables de correlación (Hecht-Mendez et al., 2010).

### 3.4 Análisis de Sensibilidad de las Distintas Variables Hidráulicas

A fin de comprobar la estabilidad de la solución se realiza un análisis de sensibilidad cambiando las variables hidráulicas de interés, con esto se podrá establecer cuanto varía el modelo ante pequeños cambios en los parámetros que lo definen. Por ejemplo, los parámetros hidráulicos que se pueden cambiar son la rugosidad de las fracturas (implementado con incrementos o disminuciones de la conductividad hidráulica), el espaciamiento de las mismas, la posición de la fractura con respecto a la dirección de flujo, valores como la dispersividad o porosidad, entre otros.

## 4. RESULTADOS

En primera instancia se presenta cómo los principales parámetros hidráulicos de la fractura y matriz rocosa repercuten en las recepciones de masa y calor en el pozo de observación, con esto es posible proponer tendencias para cada simulación de acuerdo a un eventual cambio de propiedad. Posteriormente, se propondrá un set único de parámetros hidráulicos que calibren las simulaciones de ambos experimentos, exponiendo sus respectivas eficiencias. Estas últimas serán medida de la calidad del ajuste.

### 4.1 Efecto Transporte por Cambios en Parámetros Hidráulicos

Para identificar los efectos que tienen los cambios de estos parámetros se observan las curvas de temperatura y las de concentración en el tiempo. En ellas se, para el caso del calor, consideran 4 respuestas: Temperatura máxima o peak de Temperatura, cambios en el tiempo de la primera llegada de calor al pozo de producción (evidenciado gracias a que la temperatura comienza a subir), cambios en el tiempo de llegada del peak y temperatura alcanzada en la respuesta asintótica de la curva mientras que para el caso de concentración se consideran sólo el tiempo de primera llegada, la llegada de concentración máxima o peak y concentración máxima alcanzada. Además, se observará la duración del pulso de trazador, esto es la duración aproximada del peak en el tiempo de observación.

Se procede a variar 3 tipos de propiedades determinantes del sistema: el gradiente hidráulico, los parámetros de los elementos de la fractura y de los elementos circundantes a la misma (matriz rocosa).

#### 4.1.1 Cambios en el Módulo del Gradiente Hidráulico

Para comenzar se puede observar el efecto en el transporte de temperatura debido a cambios en el módulo del gradiente hidráulico, esta dependencia se explicita en el gráfico de la Figura 4.1.

Se observa que el gradiente controla en buena medida la temperatura máxima obtenida en las simulaciones, donde gradientes más altos implican mayores temperaturas alcanzadas. También se ve que las primeras llegadas en las simulaciones ocurren antes con gradientes mayores que con menores, igualmente observados en los tiempos de llegada de los peaks. En los tres casos se observan respuestas asintóticas diferentes, donde nuevamente existe un desplazamiento hacia temperaturas mayores en gradientes más altos que en los más bajos.

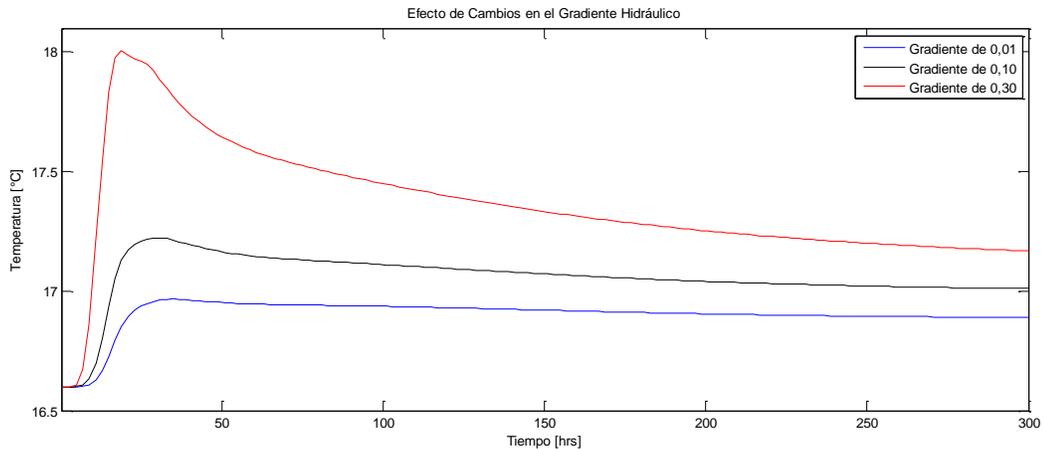


Figura 4.1: Efectos de cambios del módulo del gradiente hidráulico en el transporte de calor.

Para el caso del transporte de masas, los cambios en el módulo producen un efecto como el mostrado en la Figura 4.2.

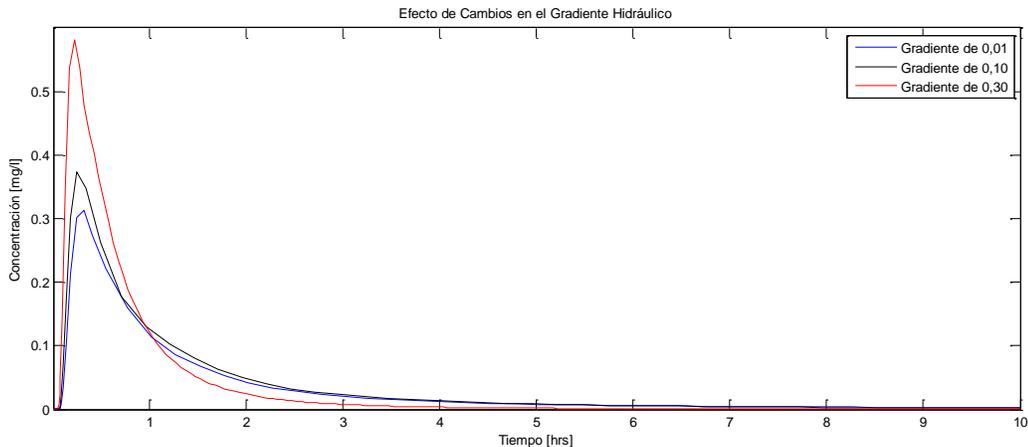


Figura 4.2: Efectos de cambios de en el módulo del gradiente hidráulico en el transporte de masa.

Se observa que mayores gradientes hidráulicos conllevan mayores concentraciones peak alcanzadas, a su vez vienen acompañada de primeras llegadas más cortas con un pulso de menor duración que el esperado en presencia de menores gradientes.

#### 4.1.2 Cambios en Parámetros de Fractura

La Figura 4.3 muestra como el espesor de la fractura influye en el transporte calórico. Cabe mencionar que el cambio de espesor viene acompañado de cambios en la conductividad de acuerdo a la ley cúbica (Romm, 1966). En este caso, los cambios en el tiempo de llegada del peak son similares que en el caso anterior y en las temperaturas son mayores, evidenciando efectos de dispersión de calor y no sólo un trabajo advectivo o

de sólo cambios en la velocidad de fluido. Las primeras llegadas de calor obedecen fuertemente a cambios en este parámetro, siendo más lentas en espesores menores y más rápidas en espesores mayores.

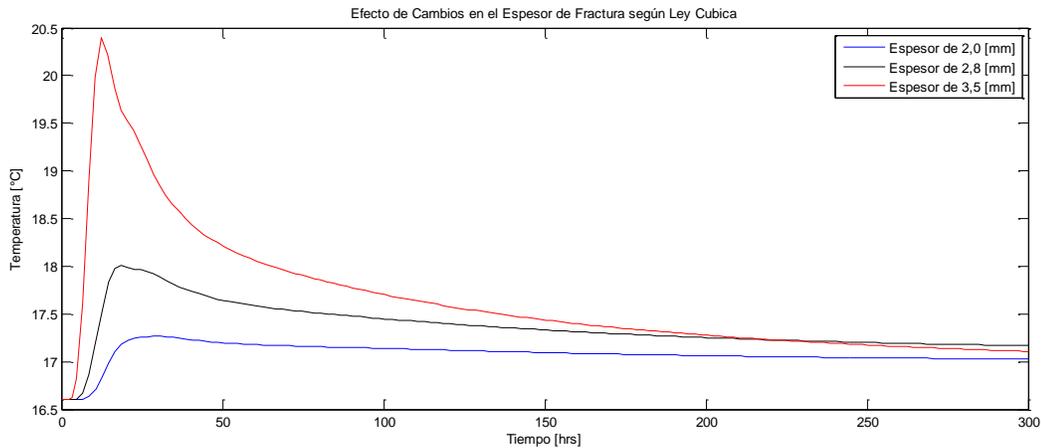


Figura 4.3: Efectos de cambios del espesor de fractura en el transporte de calor considerando la Ley Cúbica.

En este caso la curva no sufre un alza homogénea en la temperatura, sino que se focaliza en el peak de la curva. Lo anterior conlleva a que el espesor de la discontinuidad influya directamente en el tiempo requerido para llegar al estado asintótico y los menores espesores demorarán considerablemente menos tiempo en llegar a dicho estado que los espesores y conductividades más altas.

Al ser la ley cúbica una idealización, como se ha mencionado, del comportamiento hidráulico de una fractura horizontal con un espaciado homogéneo conviene analizar los efectos del cambio de apertura y cambios en la conductividad hidráulica por separado.

La Figura 4.4 muestra los efectos de un cambio de conductividad hidráulica no acompañados por cambios en la apertura.

Como puede observarse tanto la primera llegada como el peak de calor sufren un retraso al disminuir la conductividad hidráulica y, a su vez, mayores conductividades hidráulicas vienen acompañadas por mayores concentraciones máximas alcanzadas. En tanto las respuestas asintóticas se ven aumentadas con respecto al peak en menores conductividades.

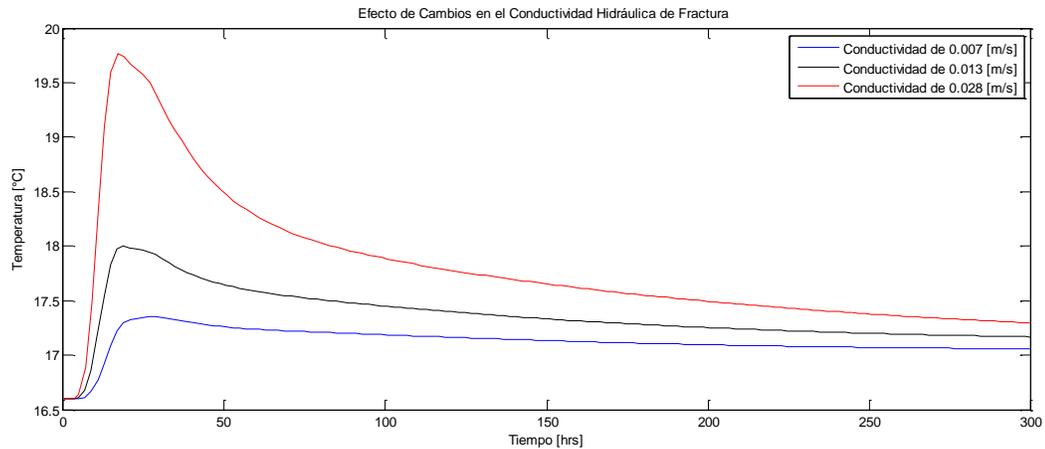


Figura 4.4: Efectos de cambios de conductividad hidráulica en el transporte de calor sin considerar la Ley Cúbica.

Como es necesario analizar cambios en la conductividad hidráulica de fractura, también lo es observar los productos de cambios el espesor, esto se presenta en la Figura 4.5. En este caso los tiempos de las primeras llegadas son levemente mayores a menor espaciamiento de fractura, igualmente reflejado en los tiempos de llegada del peak de temperatura. En tanto, los valores máximos alcanzados son mayores en el pozo de recuperación cuando el espaciamiento es más alto. Cambios de hasta 10% en el espesor generan diferencias de hasta  $\pm 0.4^{\circ}\text{C}$ . En tanto las respuestas asintóticas no revisten mayores diferencias en donde se observa que se alcanzan antes en los de mayor espaciamiento.

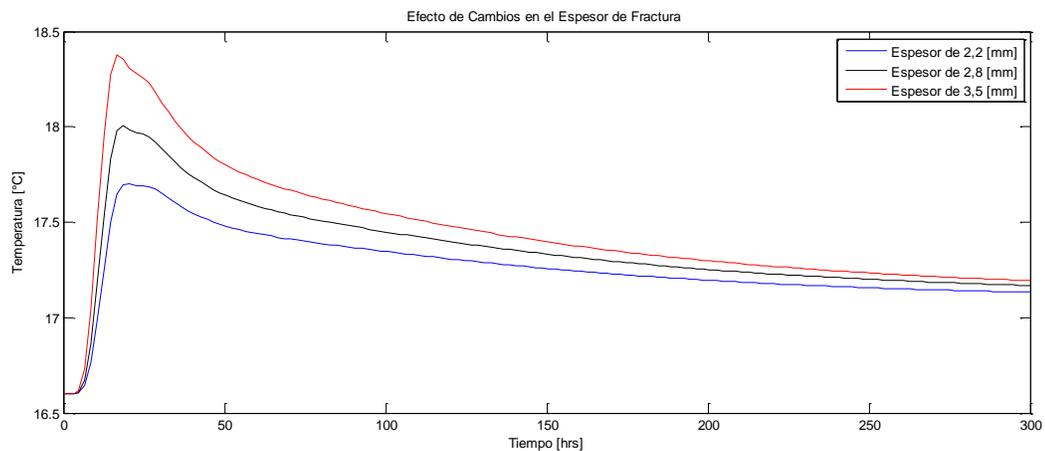


Figura 4.5: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de calor sin considerar la Ley Cúbica.

Mismo análisis puede realizarse para el transporte de trazador. La Figura 4.6 ilustra los efectos que generan cambios en el espesor de fractura y conductividad hidráulica en el transporte de masa (relacionados según la ley cúbica).

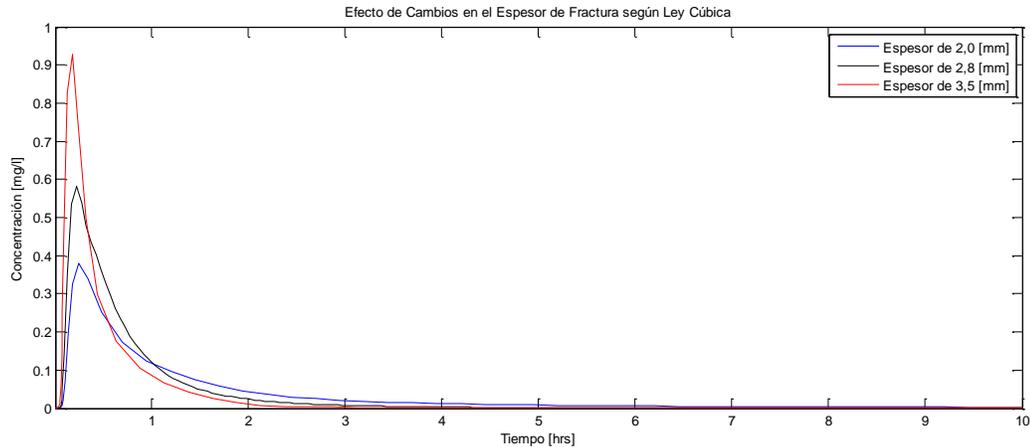


Figura 4.6: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de masa según ley cúbica.

En este caso la tendencia es, ante un aumento de la propiedad, un alza de las concentraciones peak alcanzadas acompañados de menores tiempos tanto de la primera llegada como de la concentración máxima. Las respuestas son similares a las esperadas por un cambio del gradiente hidráulico.

Los cambios en las curvas numéricas que se observan en la Figura 4.7, son resultados de variaciones en la conductividad hidráulica no asociados a cambios de espesor de fractura.

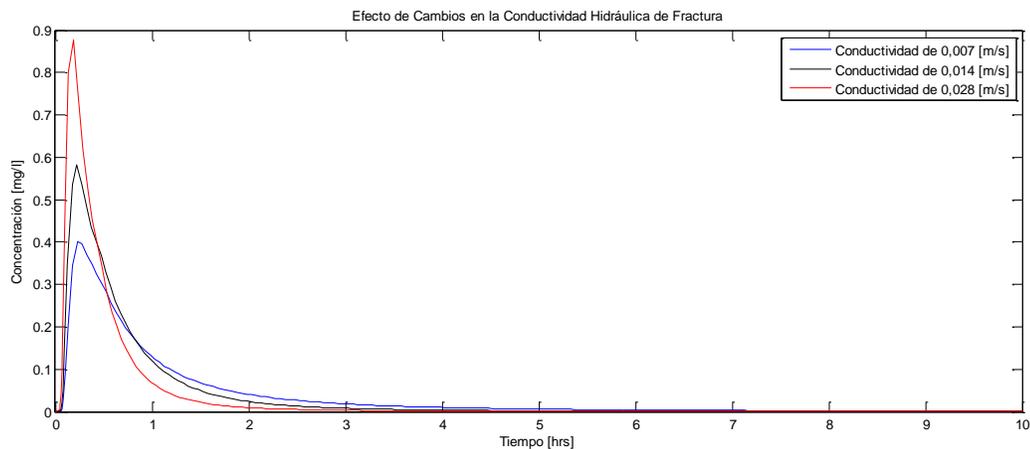


Figura 4.7: Efectos de cambios de conductividad hidráulica en el transporte de masa.

En este caso los tiempos de primera llegada son levemente menores en las mayores conductividades, viniendo acompañadas concentraciones máximas alcanzadas más altas y pulsos de menor duración. En este caso, diferencias de 50% en el valor de conductividad usado pueden significar un cambio mayor al 30% en las concentraciones máximas alcanzadas (considerando, por supuesto, valores de conductividad hidráulica consistentes con espesores de fractura del orden de los pocos milímetros, espesor probable

de encontrar en fracturas someras).

La Figura 4.8 muestra los cambios en las curvas de concentración debido a variaciones en el espaciamiento de la fractura no acompañado por cambios en la conductividad hidráulica.

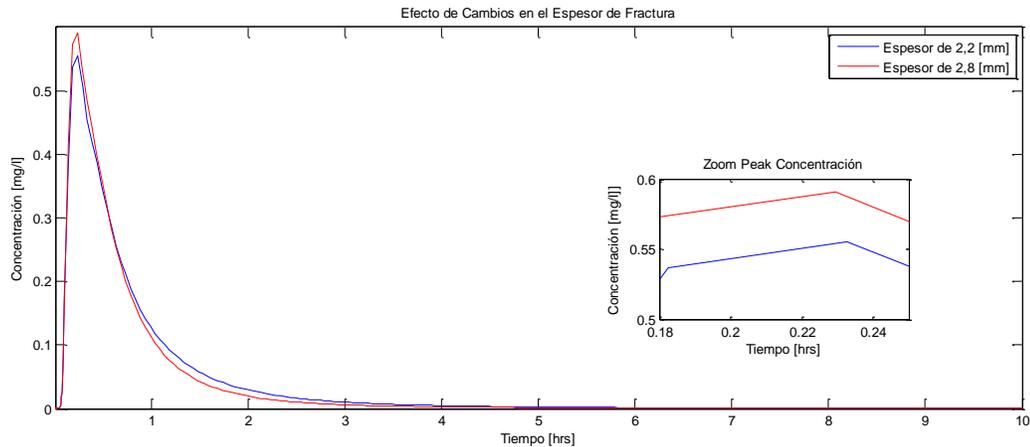


Figura 4.8: Efectos de cambios de espesor de fractura en el transporte de masa.

Los cambios no son tan pronunciados como en el caso equivalente de transporte de calor, mostrando una tasa de cambio menor ante las mismas variaciones de los parámetros. Se observa que, ante mayores espesores de fractura, las concentraciones máximas son mayores y los tiempos de llegada de este peak levemente menores que los casos con menor espesor. La duración del pulso es levemente menor en los mayores espaciamientos y no existe mayor cambio en relación a los tiempos de primera llegada del trazador.

Al analizar los efectos en cambios de dispersión longitudinal de los elementos de fractura, en los distintos transportes se obtienen respuestas disímiles. En la Figura 4.9 se puede observar el caso del transporte de calor. A diferencia de los casos anteriores el comportamiento de los peaks no sigue una tendencia única y proporcional al valor de la dispersividad, en este caso la temperatura máxima tiende a bajar hasta que el valor de dispersividad 2 [m] se alcanza y luego comienza a incrementarse hasta alcanzar valores cercanos a 22°C cuando la dispersividad es cercana a 0[m] (no ilustrado en la figura por problemas de escala).

Con respecto al tiempo en que se alcanza el peak la tendencia es, ante aumentos de dispersividad longitudinal, aumentar los tiempos de primera llegada del peak de Temperatura. Por su parte la temperatura asintótica tiende a ser más alta cuando el valor de la dispersividad es menor.

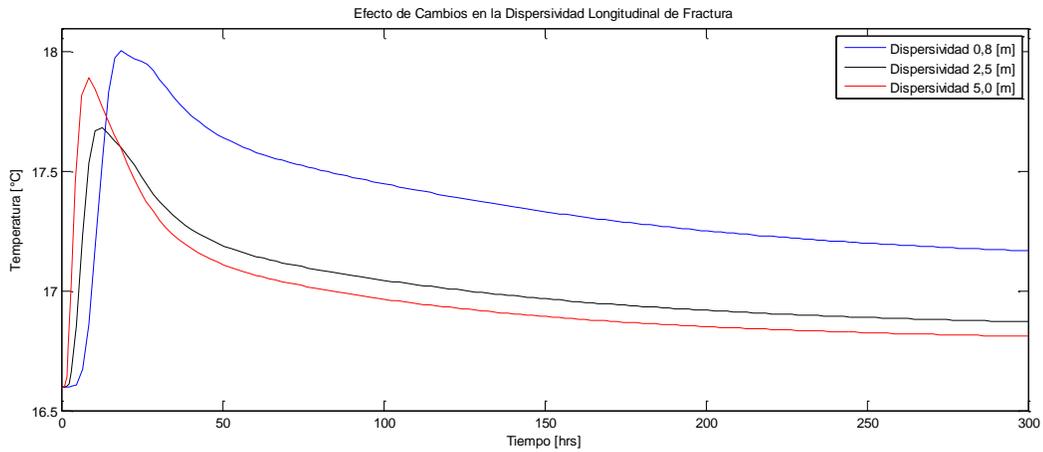


Figura 4.9: Efectos de cambios de dispersión longitudinal de fractura en el transporte de calor.

Para el caso del transporte másico, ejemplificado en la Figura 4.10, se observa que los tiempos tanto de los peaks como de las primeras llegadas suben al disminuir este parámetro, acompañándose de un aumento en el tiempo de duración del pulso. A modo de ejemplo una dispersividad de 1 metro conlleva una duración del pulso de más de una hora, mientras que una dispersividad de 5 m conlleva un pulso del orden de 30 minutos. Dispersividades menores también generan una distribución multimodal, en donde existe más de un peak de concentración atrasando la respuesta asintótica, a diferencia de las dispersividades mayores.

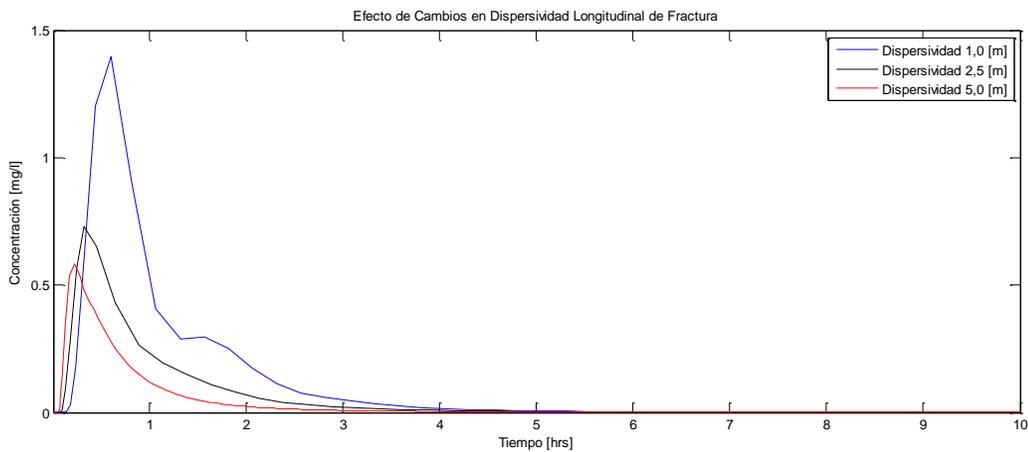


Figura 4.10: Efectos de cambios de dispersividad longitudinal de fractura en el transporte de masa.

A la hora de considerar la dispersividad transversal de la fractura, evidenciado en la Figura 4.11, se observa que no existen variaciones en las respuestas de llegada del trazador.

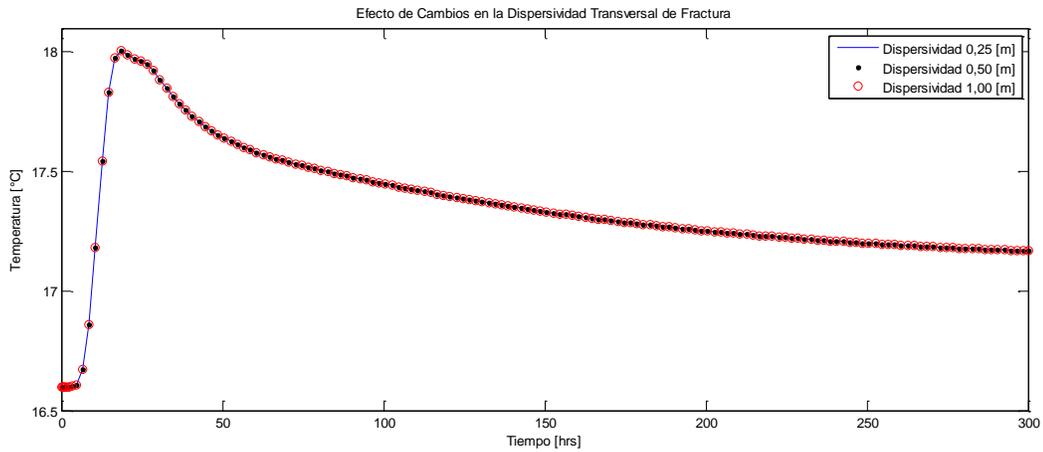


Figura 4.11: Efectos de cambios de dispersión transversal de fractura en el transporte de calor.

la Figura 4.12 muestra el caso del modelo másico. En ella se observa que las mayores dispersividades transversales impulsan concentraciones peak más bajas en conjunto con los menores tiempos para llegar a la respuesta asintótica de concentración.

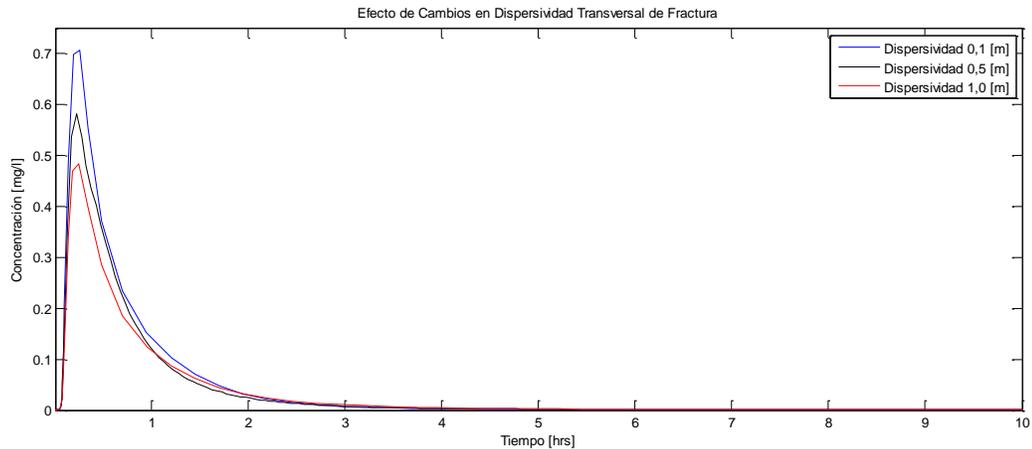


Figura 4.12: Efectos de cambios de dispersividad transversal en el transporte de masa.

Por su parte, los tiempos de llegada del trazador no se ven mayormente alterados, al igual que en el caso de la primera llegada. Cabe mencionar que ésta última presenta la tendencia de aumentar levemente a medida que se aumenta el valor de dispersividad.

La Figura 4.13 muestra como la capacidad volumétrica del fluido al interior de la fractura (distinta a la del sólido dentro de la misma, en caso de que la porosidad sea diferente a 1) influye en el transporte de calor. En este caso los cambios son similares a los ocurridos producto de un cambio de gradiente, donde se ve que las menores capacidades volumétricas conllevan menores tiempos de llegada, menores peaks y valores de temperatura asintóticos menores a los generados por una alta capacidad volumétrica.

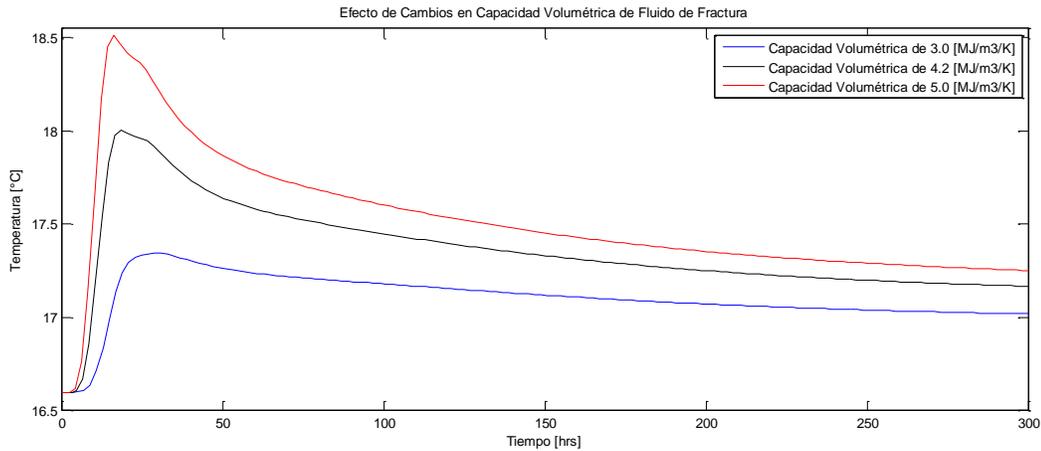


Figura 4.13: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica del fluido al interior de la fractura en el transporte de calor.

Variaciones en otros parámetros asociados a los elementos de la fractura como el almacenamiento específico, la conductividad termal del fluido/matriz, capacidad volumétrica de la matriz y porosidad de la fractura no generan cambios apreciables en las respuestas del pozo de observación.

Cuando se observan los cambios en la porosidad de fractura, evidenciados en la Figura 4.14, es claro que las menores porosidades conllevan a peaks más altos de concentración y duración de pulsos de llegada más cortos que los casos con mayor porosidad. Los cambios en las llegadas, tanto de la concentración máxima como de la primera respuesta al trazador son bajas, pero siguen una tendencia al alza cuando se tienen valores altos de porosidad. Asimismo, los tiempos de estabilización a la concentración asintótica son levemente menores en los casos de mayor porosidad de fractura.

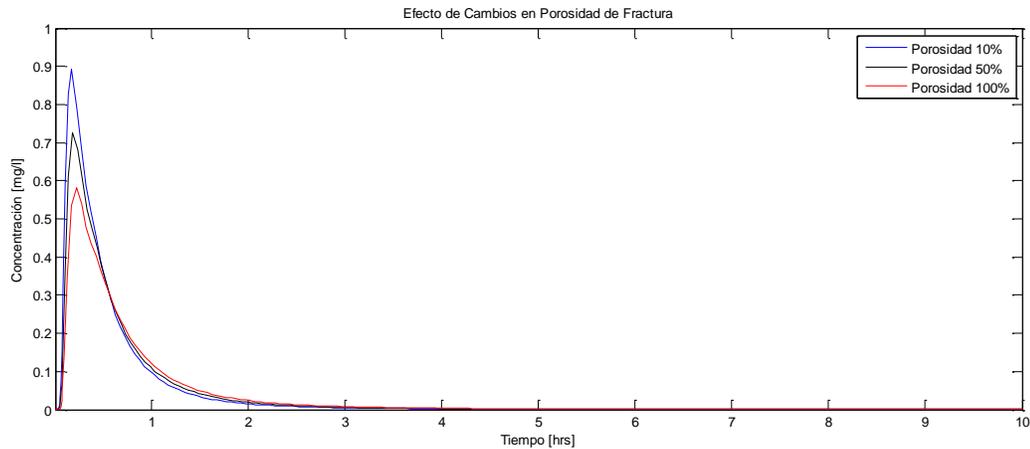


Figura 4.14: Efectos de cambios de porosidad de fractura en el transporte de masa.

Variaciones en otros parámetros asociados a los elementos circundantes como el almacenamiento específico o la difusión molecular de fractura no generan mayores respuestas en el pozo de observación.

#### 4.1.3 Cambios en Parámetros de Elementos Circundantes

Al observar las variaciones de los parámetros en los elementos circundantes, el primero que llama la atención es el efecto ante cambios de porosidad, presentado en la Figura 4.15.

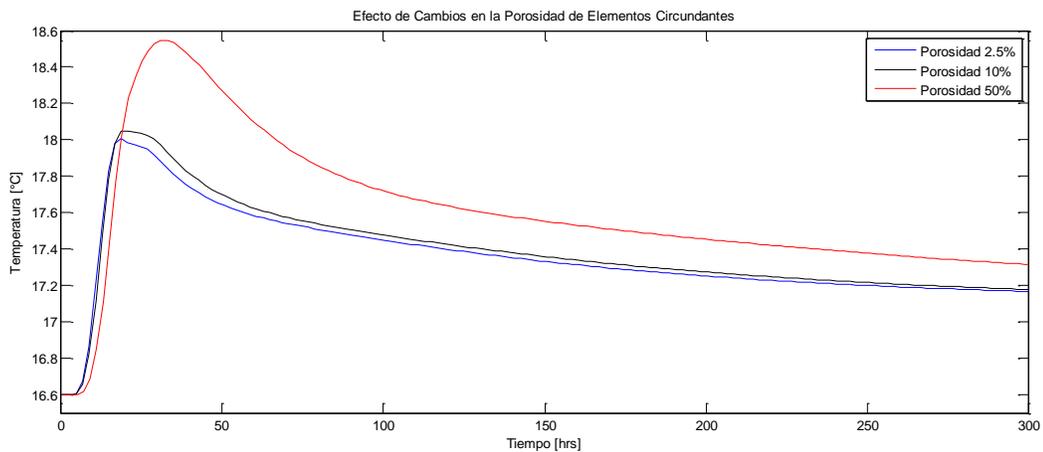


Figura 4.15: Efectos de cambios de la porosidad de los elementos circundantes en el transporte de calor.

El cambio de este parámetro genera una variación no observada hasta el momento: a mayor porosidad se obtienen temperaturas más altas acompañadas de tiempos de llegada más altos, tanto en los peaks como en las primeras llegadas. La temperatura evidenciada en el comportamiento asintótico también sube, sólo que en menor proporción a lo subido en el peak.

Cuando se considera una porosidad de 2,5% en los elementos circundantes, muy diferente a la de 100% de la fractura, tiene sentido esperar que cambios en sus propiedades termal de la parte sólida tengan repercusión en el transporte calórico.

El caso del transporte másico es ilustrado en la figura la Figura 4.16. Se observa que la porosidad de los elementos circundantes tiene un efecto importante sobre el transporte de masa y que las mayores porosidades conllevan a obtener menores concentraciones. El tiempo de llegada del peak y las primeras llegadas también son sensibles ante este parámetro, es más, los mayores cambios en ambos se pueden lograr sólo con variar este parámetro (especialmente cuando el cambio es en porosidades mayores al 5%). Finalmente, menores porosidades conllevarán a pulsos de llegada más cortos, esto se evidencia en que mayores porosidades demoran más tiempo en alcanzar el equilibrio asintótico que las bajas porosidades.

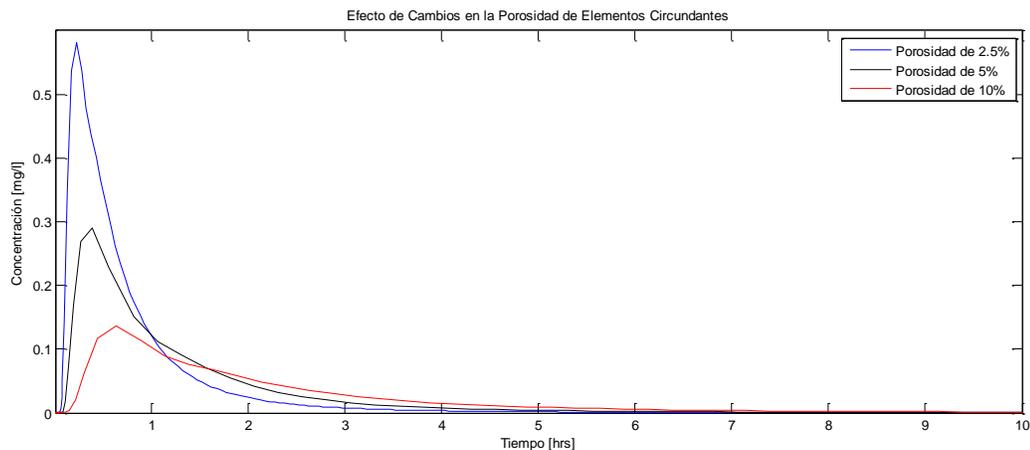


Figura 4.16: Efectos de cambios de porosidad de elementos circundantes en el transporte de masa.

La Figura 4.17 se observan los efectos del cambio en la conductividad termal de matriz.

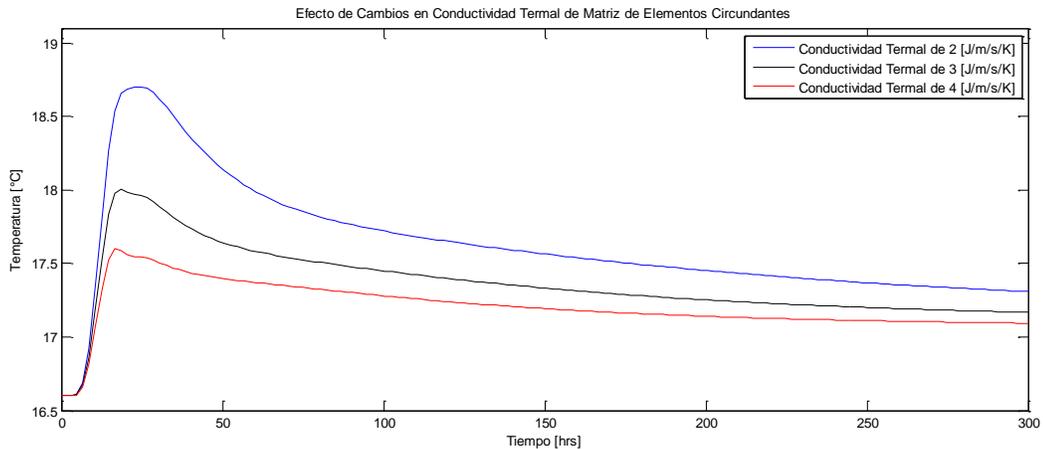


Figura 4.17: Efectos de cambios de la conductividad termal de matriz de los elementos circundantes en el transporte de calor.

En este caso los efectos son similares al cambio de porosidad recién exhibido, sin embargo existen tres diferencias más bien marcadas. En primer lugar, los peaks alcanzados no vienen acompañados de cambios en la primera llegada muy evidentes. En segundo lugar, el retraso en la llegada de la Temperatura máxima no es tan marcado como en el caso de la porosidad. Finalmente, acá la demora en los tiempos de llegada se produce al bajar el valor de la conductividad termal, a diferencia de la porosidad en la que viene acompañado de aumentos en el parámetro.

Al considerar los cambios en la capacidad volumétrica de la matriz en los elementos circundantes, presentado en la Figura 4.18, se alcanza a evidenciar un cambio similar al de los analizados en los elementos de fractura.

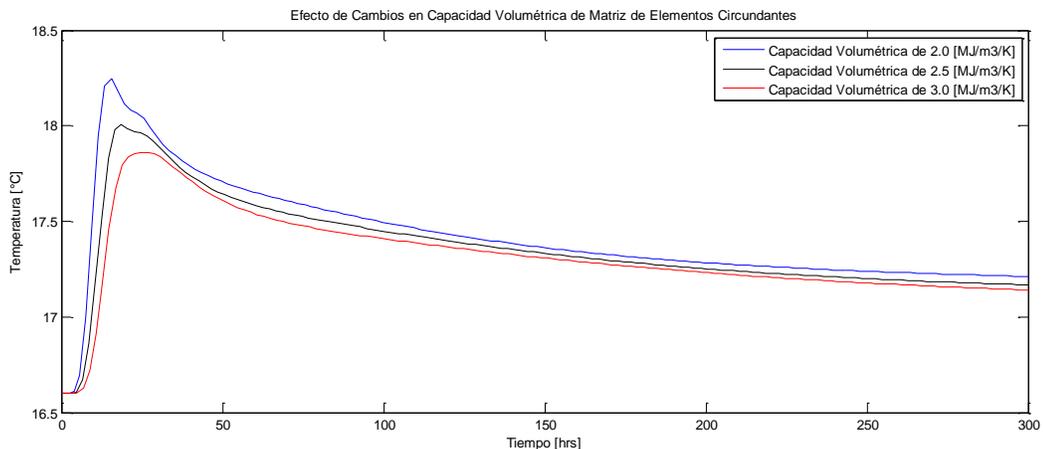


Figura 4.18: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica de matriz de los elementos circundantes en el transporte de calor.

En este caso la tendencia es, al subir los valores de capacidad volumétrica, aumentar los tiempos de la primera llegada y la temperatura peak, acompañándose de disminuciones en los máximos alcanzados. Así, en

este caso, las menores capacidades volumétricas tendrán asociadas menores temperaturas asintóticas.

Nuevamente, como en esta oportunidad se considera una porosidad del 2,5%, al existir cambios en las propiedades termales de la parte sólida (matriz) también existe una contraparte líquida y la variación de sus parámetros calóricos conllevará a cambios en los resultados de la simulación. Ese es el caso de los cambios en la capacidad volumétrica de fluido presentado en la Figura 4.19.

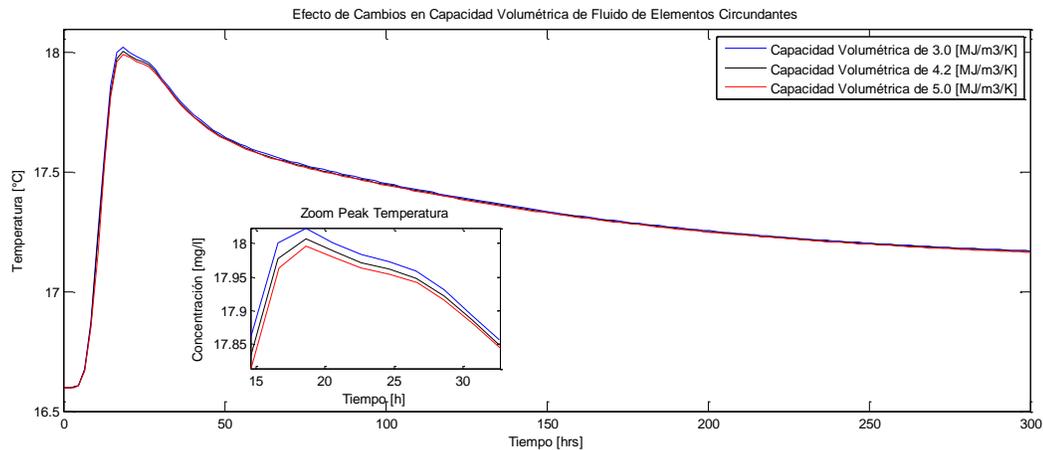


Figura 4.19: Efectos de cambios de la capacidad volumétrica de fluido de los elementos circundantes en el transporte de calor.

Como se observa, los cambios son menores y requieren de un aumento en la zona de interés. En este caso se obtienen mayores temperaturas máximas no acompañadas por visibles cambios en el tiempo de llegada, además se ve que las mayores adiciones en temperatura se dan en la zona del peak. Al igual que la contraparte de matriz de los elementos, las menores temperaturas se obtienen en las máximas capacidades volumétricas.

A diferencia de los elementos de fractura, cuando se consideran los elementos de la matriz, si existe una influencia en el transporte de las variaciones en el parámetro de dispersividad transversal y es la longitudinal quien no tiene mayor repercusión. Esto se puede observar en las Figura 4.20 y Figura 4.21 presentadas a continuación.

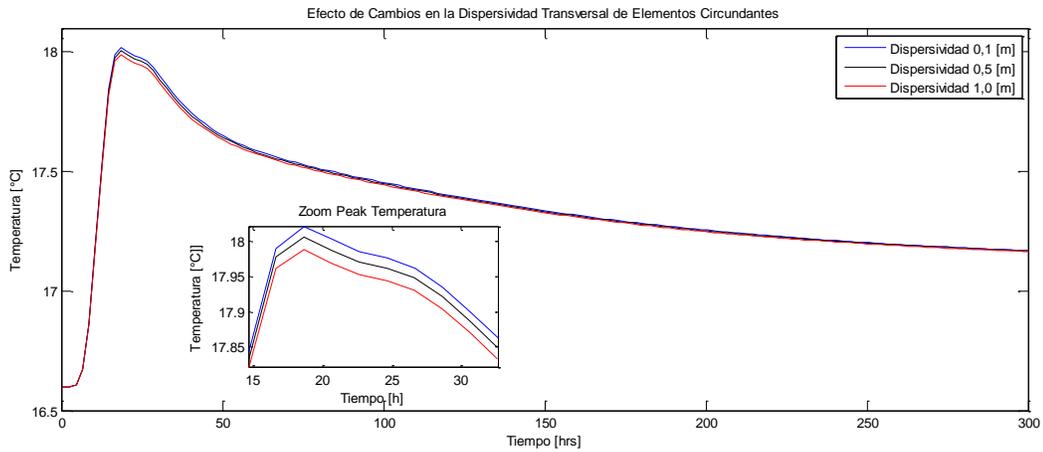


Figura 4.20: Efectos de cambios de dispersión transversal de elementos circundantes en el transporte de calor.

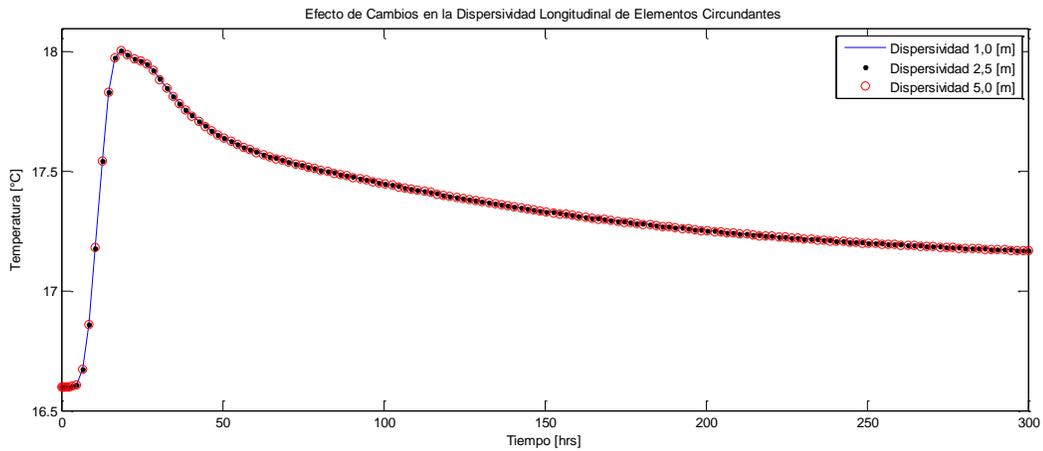


Figura 4.21: Efectos de cambios de dispersión longitudinal de elementos circundantes en el transporte de calor.

Para el caso de la dispersividad transversal los efectos son más discretos que en el caso de la dispersividad longitudinal de fractura. Entre ellos se observa que menores valores de dispersividad implican mayores temperaturas alcanzadas y que no existen mayores efectos de los cambios en los tiempos de llegada, tanto para las temperaturas peak como para las primeras llegadas.

Al observar el cambio en la conductividad hidráulica de los elementos circundantes, ilustrado en la Figura 4.22, si bien los tiempos de primera llegada no se ven mayormente afectados, el de la temperatura peak si conllevará un pequeño retraso. A su vez, la temperatura máxima y la temperatura asintótica alcanzadas muestran un alza menor pero aún considerable.

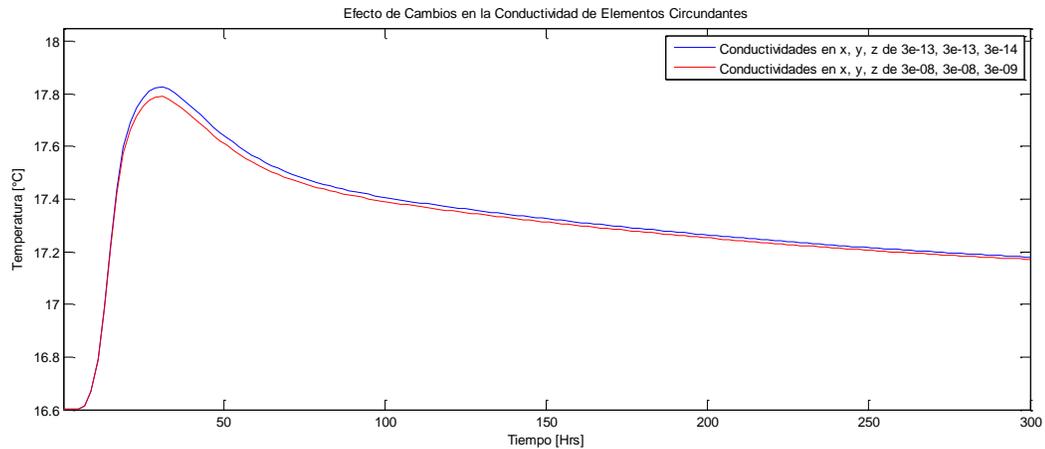


Figura 4.22: Efectos de cambios de conductividad de elementos circundantes en el transporte de calor.

Los cambios en valores de conductividad para el transporte másico son ilustrados en la Figura 4.23, no revisten mayores cambios al tiempo y cantidad de transporte. Sin embargo, al observar un detalle de la zona del peak, se observa que en conductividades menores se obtienen mayores concentraciones.

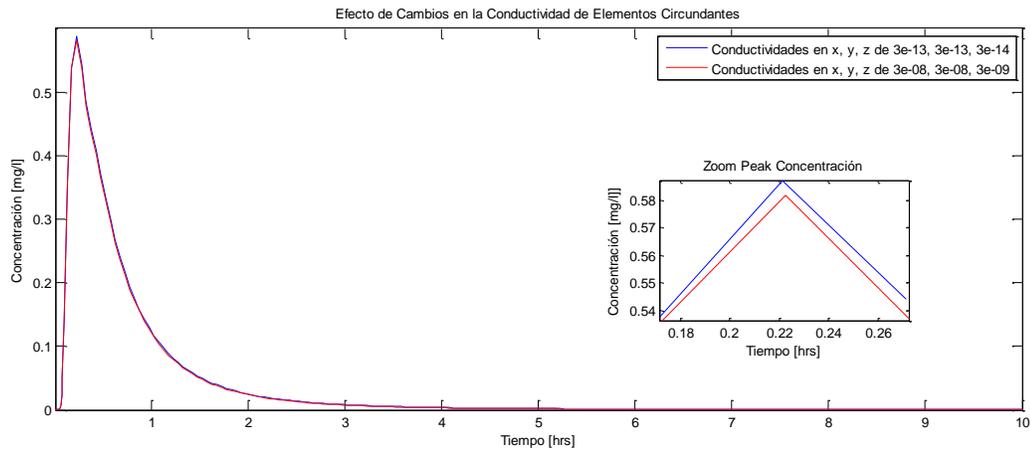


Figura 4.23: Efectos de cambios de conductividad hidráulica de elementos circundantes en el transporte de masa.

Variaciones en otros parámetros asociados a los elementos circundantes como el almacenamiento específico o la difusión molecular de elementos circundantes no generan mayores respuestas en el pozo de observación.

## 4.2 Ajuste Propuesto

En base a los resultados anteriores, se pueden proponer primeras aproximaciones a parámetros únicos que ajusten las respuestas experimentales consideradas para el acuífero de Ploemeur. Estos parámetros posteriormente se someten a un proceso de recalibración, en base a iteraciones, a fin de mejorar progresivamente la eficiencia alcanzada.

El set de parámetros obtenidos se presenta en la Tabla 4-1.

Tabla 4-1: Parámetros Obtenidos de la Implementación de Modelos.

<i>Parámetro</i>	<i>Elementos de Matriz</i>	<i>Elementos de Fractura</i>
Módulo de Gradiente Hidráulico [-]	0,3	0,3
Espesor [m]	-	0,0022
Conductividad en x-y-z [m/s]	3e-13/3e-13/3e-14	0,00704
Almacenamiento Específico [1/m]	0,0001	0,0001
Porosidad [-]	2,5%	50%
Constante de Decaimiento [1/s]	0	0
Difusión Molecular [ $10^{-9}$ m <sup>2</sup> /s]	1	1
Coefficiente de Expansión de Calor [1/K]	-	0
Capacidad Volumétrica, Fluido y Sólido [MJ/m <sup>3</sup> /K]	4,2 / 2,52	4,2 / 2,52
Conductividad Térmica, Fluido y Sólido [J/m/s/K]	0,65 / 2	0,65 / 3
Parámetro de Sorción [ ]	-	0
Dispersividad Longitudinal para Calor [m]	5	0,7
Dispersividad Longitudinal para Masa [m]	5	2,5
Dispersividad Transversal para calor y masa [m]	0,5	0,5
Número de Fracturas por Unidad de Ancho (factor N en Ecuación 5)	1	1

Tanto los parámetros de transporte como los parámetros hidráulicos son consistentes con los descritos en la literatura, siendo entonces, condiciones probables de encontrar en granitos fracturados. Con este set de parámetros se observan ajustes para ambos experimentos, los cuales se observan en la Figura 4.24 y Figura 4.25, presentadas a continuación.

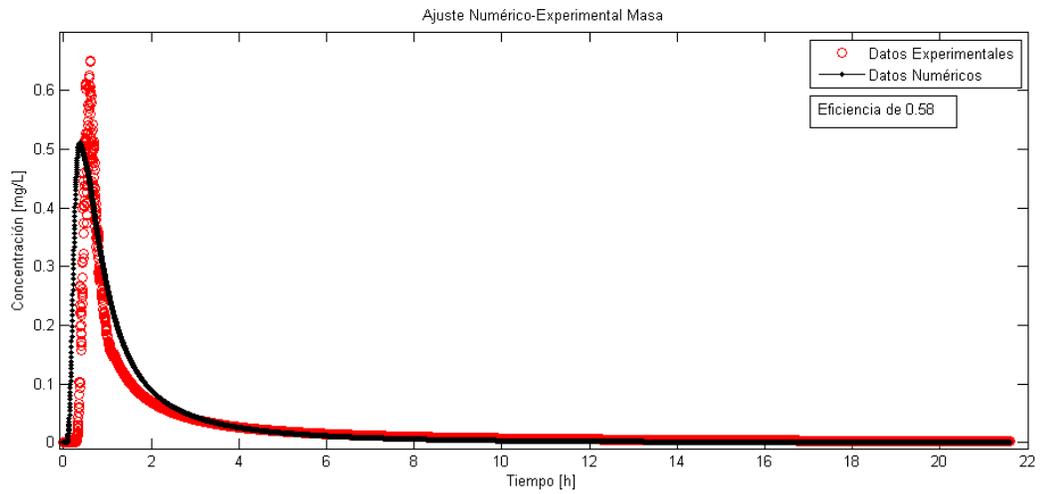


Figura 4.24: Ajuste propuesto transporte másico.

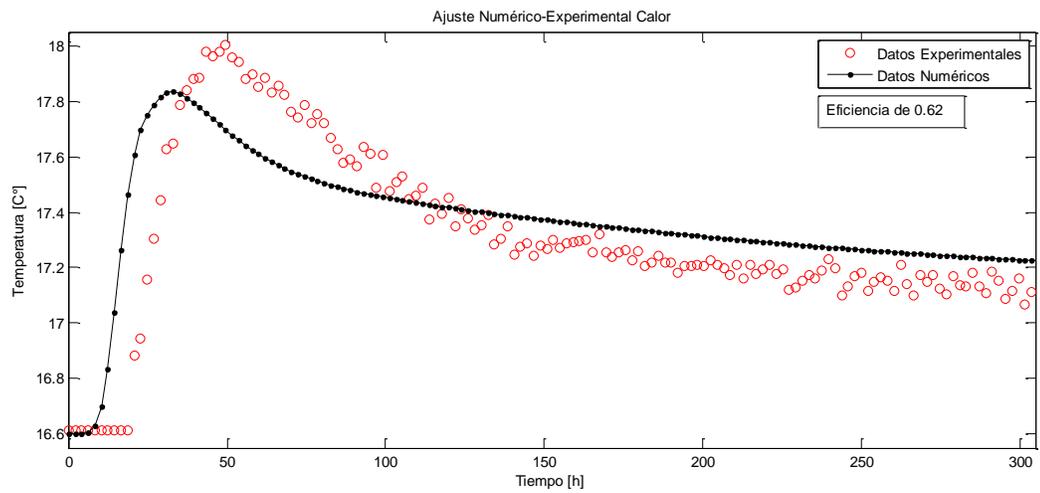


Figura 4.25: Ajuste propuesto transporte calórico.

Para estas simulaciones, la eficiencia del modelo de trazador corresponde a 0,58 mientras que para el modelo de temperatura alcanza un valor de 0,62.

### 4.3 Análisis de Sensibilidad

Dentro de la calibración del modelo, la porosidad de los elementos circundantes parece ser un parámetro crítico que cambia tanto los valores de eficiencia como la similitud visual de las curvas.

Para el caso de la porosidad la alta sensibilidad está en el transporte másico, como muestran las Figura 4.26 y Figura 4.27. Los parámetros de porosidad comprenden el rango de porosidad que se puede encontrar en granitos desde cristalinos a fracturados.

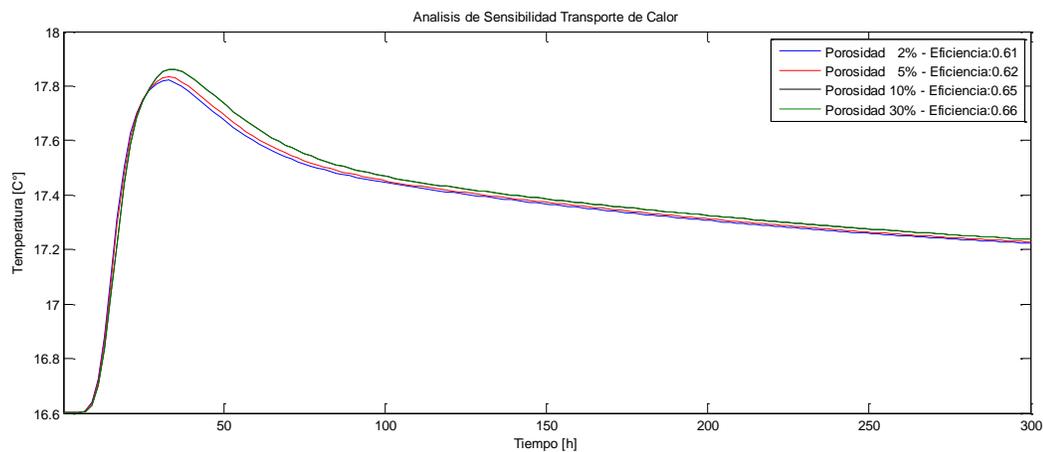


Figura 4.26: Análisis de sensibilidad para la porosidad en el transporte calórico

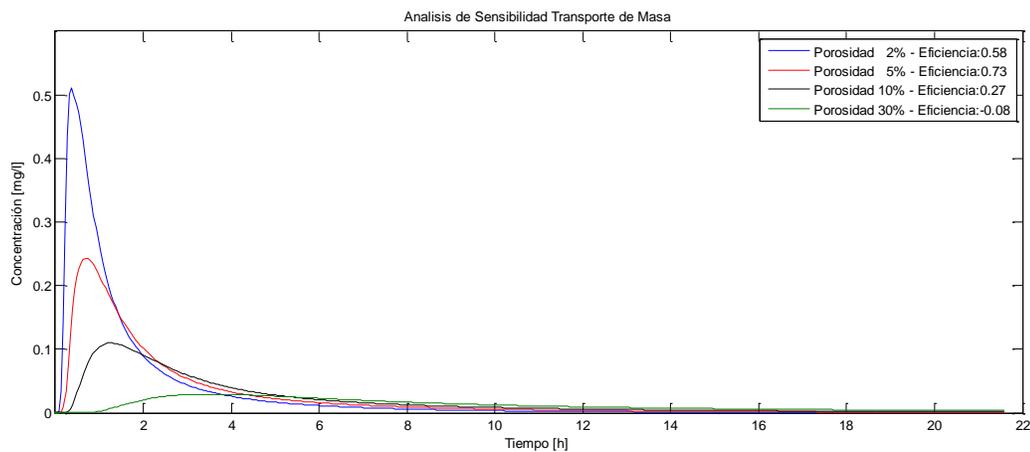


Figura 4.27: Análisis de sensibilidad para la porosidad en el transporte másico

Las eficiencias en el transporte de calor varían porcentualmente hasta en un 7%, mientras que en el caso de la masa superan el 110% alcanzando eficiencias negativas.

## 5. DISCUSIONES

### 5.1 Respecto de Cambios en Curvas de Temperatura y Concentración

Aumentos en el gradiente hidráulico conllevarán mayores velocidades de Darcy para el flujo dentro de la fractura, es en base a esto que un mayor gradiente impulsará que ambos, tiempo de primera llegada y del peak de temperatura sean menores, situación que se aprecia en la Figura 4.1. Al avanzar el flujo de manera más rápida hay menor tiempo para intercambiar calor con las rocas circundantes y es por eso por lo que las temperaturas máximas alcanzadas son mayores en el caso de un mayor gradiente. Este mismo fenómeno explica la diferencia entre las respuestas asintóticas, en donde al alcanzar temperaturas más altas demorarán más tiempo en alcanzar dicho estado.

A su vez, el efecto que el módulo del gradiente hidráulico ejerce sobre el transporte másico es importante, evidenciado en la Figura 4.2, donde un mayor gradiente resultará en mayores velocidades de Darcy y posteriormente en una mayor contribución de la advección, que al ser el mecanismo más importante de transporte de masa en la fractura (Fitts, 2013), generará grandes cambios en las curvas de concentración involucradas. Principalmente los cambios se encuentran en la concentración máxima alcanzada y en la duración del pulso: a mayores módulos se alcanzan mayores concentraciones y los pulsos tienen menor duración. Esto ocurre porque al existir una mayor diferencia de potencial el fluido avanza más rápido y no hay tanto tiempo para dispersar el trazador, avanzando en conjunto, rápido y obteniendo un pulso de duración más corta.

Otro de los parámetros que controlan mayormente el comportamiento del transporte de calor en la fractura es su espaciamiento y su valor de conductividad hidráulica. Inicialmente se utilizan pares relacionados por la ley cúbica, lo que si bien es una primera aproximación, no siempre logra modelar de la mejor forma los valores de conductividad en medios fracturados. Las propiedades hidráulicas de un relleno o el efecto de la geometría de fractura tendrán participación directa a la hora de resolver el flujo en la discontinuidad. A modo de ejemplo Brown (1987) resuelve que para pequeñas aperturas la tortuosidad en la fractura tiene un efecto no despreciable en la implementación de la ley cúbica, al determinar el flujo en un sistema de placas paralelas. Así, es válido analizar variaciones por separado en conductividades hidráulica o espesores de fractura.

La Figura 4.4 y Figura 4.5 muestran, respectivamente, cambios en la conductividad hidráulica y apertura independientes entre sí (no relacionados por la ley cúbica) para el transporte calórico. Se eligen 3 valores de conductividad hidráulica, donde el valor central se aleja de los extremos por

un factor de  $\pm 50\%$ : es normal que ante mayores conductividades hidráulicas las temperaturas máximas sean mayores, ya que al atravesar el fluido con mayor facilidad existe menor interacción agua-roca y con ello menor intercambio de calor entre la matriz y el fluido de fractura. Esto mismo explica los tiempos de primera llegada y del peak de temperatura, donde menores conductividades hidráulicas conllevarán mayores retardos en la llegada, debido principalmente al flujo advectivo de calor.

Al analizar el comportamiento ante cambios de apertura se ve que estos siguen la misma tendencia, dónde mayores valores de espesor vienen acompañados de mayores temperaturas alcanzadas. Estas variaciones pueden explicarse por la baja posibilidad de interactuar con la roca circundante a medida que el espaciamiento aumenta, cobrando mayor importancia el transporte calórico por difusión/conducción que solamente el advectivo. Desde el punto de vista de las ecuaciones utilizadas se puede entender que al tener fracturas más espaciosas la diferencia de temperatura paralela al espesor no será menor (manteniendo el supuesto que la temperatura de ingreso de agua es homogénea, lo cual se cumple en el modelo). En este caso el término relacionado a la conducción de la Ecuación 33 tendrá menor importancia en el transporte vertical y tenderá a mantenerse concentrado en la pared superior de fractura hasta llegar al pozo de recuperación.

Los valores de conductividad elegidos debieran generar iguales cambios en las curvas de temperatura que los producidos por los cambios en el espaciamiento, puesto que los pares graficados y presentados en la Tabla 5-1, se encuentran relacionados por la ley cúbica, donde se utiliza la deducción desde la ley cúbica para obtener la conductividad hidráulica (Snow, 1969) con un número  $N = 1$  (Ecuación 5).

Tabla 5-1: Valores Conductividad Hidráulica y Apertura Utilizados en Simulaciones, calculados en base a Snow (1969) con  $N=1$ .

<b>Conductividad Hidráulica [m/s]</b>	<b>Apertura de Fractura [mm]</b>
0,007	2,2
0,014	2,8
0,028	3,5

Sin embargo su respuesta numérica es diferente y tiene una mayor magnitud en el caso de los cambios por conductividad que en el caso por espaciamiento. Lo anterior se explica debido a que el modelo, pese a trabajar los *discrete features elements* con flujos tipo Darcy, no integra la ley cúbica a sus cálculos y los cambios en espesor no necesariamente vienen asociados a cambios en la conductividad. Así, se tendrán dos efectos diferentes no necesariamente con igual impacto en la magnitud del transporte: cambios asociados a variaciones de apertura y cambios asociados a variaciones de conductividad hidráulica, los que después de ser sumados generan el cambio

total propuesto en la Figura 4.3.

Para el caso del transporte másico la Figura 4.6 muestra la dependencia de espesor y conductividad de acuerdo a la ley ya mencionada, mientras que la Figura 4.7 y Figura 4.8 muestran sólo variaciones en conductividad hidráulica y espesor de fractura respectivamente.

Nuevamente la respuesta numérica ante variaciones de espesor de fractura es menor que ante variaciones de conductividad hidráulica, a su vez, en ambos casos las respuestas tienden a ser similares: mayores valores en los parámetros conllevan a aumentos en las concentraciones máximas alcanzadas y disminución en los tiempos de llegada del peak de concentración.

Al comparar los efectos de las variaciones producto de cambios en el espesor para el transporte másico y calórico de la Figura 4.3 y Figura 4.7, se observa que es más notorio en el caso del transporte calórico. Lo anterior ocurre debido a que el flujo advectivo no cambia en este modelo producto de variaciones en la apertura y los efectos de difusión, dispersividad y otros mecanismos de transporte de masa son considerablemente menores que los productos de un flujo advectivo, no así en el caso del transporte de calor, lo que se traduce para este último en una menor diferencia en las respuestas de los distintos mecanismos de transporte y donde las contribuciones de cada uno son más equiparadas entre sí.

Al hacer un análisis de las ecuaciones involucradas, variaciones en la conductividad hidráulica propiciará cambios en la Ecuación 5, donde se mayores conductividades hidráulicas que propiciarán mayores aportes de flujos advectivos (Ecuación 15).

Al considerar variaciones en la dispersión longitudinal, como las mostradas en la Figura 4.9, no se obtiene un comportamiento lineal de las temperaturas máximas alcanzadas sino uno parabólico (los peaks primero bajan y luego suben ante un aumento sostenido de la dispersividad). Esto encuentra su explicación al entender lo que sucede con la pluma de calor al ser dispersada: con menores dispersividades la pluma tenderá a avanzar en conjunto, perdiendo calor con menor velocidad que en el caso de mayores dispersiones y obteniendo más altas temperaturas en el pozo de extracción, en conjunto con mayores tiempos de primera llegada (el calor de la pluma viaja en conjunto, se dispersa poco y demora más en llegar, alcanzando mayores temperaturas en el pozo de extracción). Esta conducta tiene un punto de inflexión en dispersividades de 2 metros, donde la temperatura comienza a subir después de alcanzar un mínimo en el pozo de producción. El comportamiento descrito puede entenderse producto de una alta dispersión, que lleva a separar rápidamente la pluma transportada, donde el tiempo para perder calor es menor y que lleva a alcanzar progresivamente mayores

temperaturas máximas en el pozo de extracción.

Una respuesta diferente se obtiene producto de variaciones en la dispersividad transversal, ilustrado en la Figura 4.11, donde no hay cambios evidentes al usar distintos parámetros de entrada. Esto se debe a la alta conductividad térmica del fluido, bajo espesor de fractura y preferencia de flujos horizontales mas no verticales, donde rápidamente se alcanza homogeneidad en la temperatura del fluido de fractura.

Los efectos producto de variaciones en la dispersividad longitudinal, presentes en la Figura 4.10, son marcados y relacionables a lo ocurrido en el transporte de calor (con la diferencia que acá el comportamiento si es lineal): a mayor valor de dispersividad menor es la concentración máxima recibida, menor es la duración del pulso y más rápido los tiempos de primera llegada y concentración máxima. Lo anterior ocurre porque en el fenómeno de transporte de masa la advección (Ecuación 15) es más pronunciada que en el transporte de calor generando que, ante sólo cambios de dispersividad, se conserve parte importante del trazador. Este no es el caso de lo que ocurre con el transporte de calor, donde otros mecanismos (como la conducción) hacen que el calor escape mayoritariamente.

Al observar la Figura 4.12 se observan los cambios en la dispersividad transversal, en general menores dispersiones en el eje vertical significan peaks de concentración más altos, lo cual resulta bastante intuitivo: al ingresar el contaminante en el borde superior de la fractura, si no existe un gran valor de dispersión transversal, la pluma viajará como conjunto cercana a la cara superior de fractura llegando concentrada hasta el pozo de extracción en donde se encuentra el control de trazador saliente.

Otro de los parámetros que genera cambios significativos en la respuesta de la temperatura son los cambios en la capacidad volumétrica de fluido de fractura, ilustrado en la Figura 4.13. En este caso, altas capacidades volumétricas implican altas capacidades del volumen de agua para almacenar calor y con ello mayor resistencia a la bajada de temperatura. Esta mayor capacidad generará mayores temperaturas máximas alcanzadas producto de la baja pérdida de calor, lo que vendrá acompañado de menores tiempos de primera llegada y de los peaks alcanzados ya que, al perder menor calor, los primeros flujos en llegar lo harán con mayor temperatura.

Al observar aumentos en la porosidad de los elementos de fractura para el transporte másico, como muestra la Figura 4.14, los efectos principalmente consisten en una disminución de las concentraciones máximas alcanzadas y leves disminuciones de los tiempos de llegada. Lo anterior encuentra su razón en que el parámetro que controla la velocidad de Darcy (y con ello la advección y así el transporte del trazador) es la permeabilidad y no la porosidad. Cambios

en la porosidad sólo lograrán restringir el área de transporte si es que los valores de permeabilidad de fractura son mantenidos. Esto conllevará a concentraciones mayores (el trazador recorre menos área y se dispersa menos) y tiempos de llegada más rápidos (el trazador tiene menos área por recorrer y se encauza, llegando más rápido), precisamente lo observado en el pozo de producción.

Al considerar propiedades de los elementos circundantes, la porosidad tiene efectos importantes en el transporte calórico, tal y como se ve en el análisis de sensibilidad y en la Figura 4.15. Ante aumentos en este parámetro los tiempos en las primeras llegadas y las temperaturas máximas alcanzadas tienden a subir, esto es esperable puesto que puede existir transporte de calor al relleno de los poros y con ello cierta demora en alcanzar el pozo de producción. Esto se ve evidenciado en cambios en la cantidad de transporte producto del término conductivo, el cual se ve favorecido ante variaciones en la porosidad (Ecuación 35, respecto de la definición de conductividad termal). Un efecto interesante es que la temperatura tiende a subir ante mayores tiempos de traslado cuando en otros casos la tendencia es a la baja, esto se puede explicar por el relleno de dichos poros que puedan funcionar como un aislante o intensificar condiciones de equilibrio térmico entre la fractura y matriz, por lo que la transmisión de calor de uno a otro medio es menor que en el caso de menores porosidades, funcionando como barrera a la pérdida de calor.

Ahora al ver en la Figura 4.16 la respuesta de la porosidad, pero esta vez de los elementos circundantes a la fractura en el transporte másico, los resultados son bastante disímiles al caso recién estudiado: ante aumentos de porosidad los valores máximos de concentración alcanzados disminuyen y los tiempos de llegada aumentan considerablemente, al igual que la duración del peak. Esto puede encontrar su explicación en que, al tener un medio con baja conductividad la porosidad funciona como un almacenamiento y obstáculo para el trazador, terminando en las respuestas observadas para las variaciones de este parámetro. Desde el punto de vista matemático, la porosidad cumple un rol clave en el transporte, puesto que en las ecuaciones gobernantes para el transporte másico (Ecuación 25) el término advectivo incluye la velocidad real y al aumentar el valor de porosidad se permite al reactivo seguir su avance por la roca circundante y no necesariamente por la fractura planar, disminuyendo la magnitud y atrasando las llegadas.

Un efecto parecido para la temperatura al observar la porosidad de los elementos se consigue al cambiar la conductividad termal de los mismos, ilustrado en la Figura 4.17, lo que ocurre producto de un mecanismo similar a lo observado en la porosidad. Ante aumentos de la conductividad termal las temperaturas alcanzadas en el pozo de producción son menores, debido a que el calor se transfiere de mejor forma entre la matriz y la fractura que en el

caso de una conductividad termal mayor. Esto también logra explicar los tiempos de la primera llegada y los tiempos en alcanzar la temperatura máxima pues el calor se transmite preferencialmente por el fluido de la fractura y no por la matriz, un medio que conduce más lento el calor. Estos cambios son posibles de observar en el término conductivo de la ecuación general de transporte de calor (Ecuación 33), donde al ser un término predominante tendrá gran impacto en la magnitud del transporte.

Otros parámetros termales de la roca, como la capacidad volumétrica de la matriz y del fluido de los elementos circundante (ilustrados en la Figura 4.18 y Figura 4.19, respectivamente), tienen efectos similares: menores capacidades volumétricas tienden a tener peaks más altos, primeras llegadas más rápidas y tiempos menores antes de la ocurrencia del peak de temperatura. Lo anterior ocurre debido a que a menores capacidades requieren menos energía para transferir calor desde la fractura a la roca, promovándose un transporte calórico en la matriz sólida que llevará a obtener mayores temperaturas y llegadas más rápidas en el pozo de extracción (la conducción de calor es más rápida en un medio sólido que uno fluido). Nótese que el efecto es menor en el caso de la capacidad del fluido que en el caso de la capacidad termal y esto es básicamente por la baja permeabilidad del medio, donde predomina la transferencia de calor por conducción.

Al analizar las variaciones de dispersividades, evidenciadas en las Figura 4.20 y Figura 4.21 respectivamente, se observa un comportamiento contrario al observado para los elementos de la fractura, pues en este caso los cambios ocurren ante variaciones de la dispersividad transversal y no así por los cambios de dispersividad longitudinal. Las variaciones inducidas por una bajada en la dispersión transversal son un incremento en la temperatura máxima alcanzada, lo cual es lógico al pensar nuevamente en el concepto de dispersión: si la pluma logra dispersarse por la matriz rocosa las bajadas de temperatura serán mayores mientras más disperse la pluma, y la temperatura disminuirá porque el calor escapa a lo largo de la vertical por la matriz rocosa.

Al observar los cambios en la Figura 4.22 inducidos por usar distintas conductividades hidráulicas en los elementos circundantes, no se ven grandes diferencias y sólo logran inducir un leve retardo en las llegadas y un aumento de temperaturas máximas alcanzadas. Esto ocurre debido a la ya baja conductividad hidráulica asignada a las rocas adyacentes, valores aún menores de conductividad cada vez tendrán menor efecto en el transporte calórico.

Finalmente, al considerar los efectos de cambios en la conductividad hidráulica de los elementos circundantes, ilustrado en la Figura 4.23, se observa que los cambios son menores (al igual que el caso del transporte calórico). Nuevamente, esto encuentra su explicación debido a que la variación entre estos órdenes de magnitud de conductividad no genera cambios

significativos en el proceso de advección, ya que la conductividad de la fractura es significativamente mayor que la de la matriz rocosa adyacente. Sin embargo, el resultado es congruente con lo esperado: mayores conductividades de elementos de matriz rocosa permiten la circulación de soluto por ellas disminuyendo la concentración máxima en el pozo de recuperación y aumentando levemente los tiempos de llegada del trazador.

Uno de los resultados esperados era que mecanismos como la difusión molecular y la aplicación de un factor retardante (consistente con reacciones de sorción) jugaran un rol importante en el transporte de masa, sin embargo los modelos numéricos no mostraron eso. Principalmente esto se debe a los cortos tiempos de transporte, en donde 30 minutos de reacción no son suficientes para lograr cambios notorios. Sin embargo, ante distancias, tiempos de viaje y tiempos de residencia mayores o cambios de temperatura más violentos es necesario revisitar su efecto en el transporte de masa. A modo de ejemplo, granitos fracturados en Francia fueron sujetos de experimentos y, con tiempos de residencia para los trazadores de 300 horas el efecto de la difusión molecular ya era considerable (Cacas et al., 1990a). En lo que a difusión respecta, se pueden establecer modelos difusivos para magnificar la pérdida de soluto por este mecanismo. Un ejemplo se puede observar en la Figura 5.1, donde Fitts (2013) con ayuda del software SOLUTRANS modela la dispersión de una pluma sólo por efectos difusivos. Se ve que un tiempo de residencia mayor a 25 años ya tendrá pérdidas considerables producto de estos efectos.

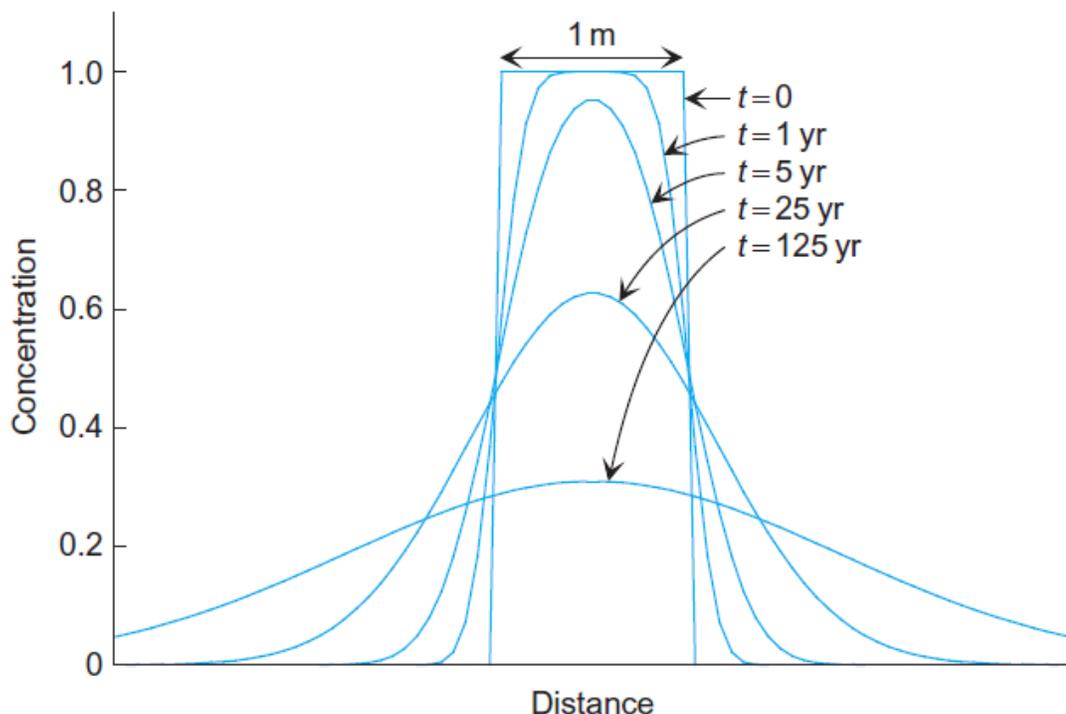


Figura 5.1: Efectos de la dispersión de pluma sólo debido a efectos difusivos, extraída de Fitts (2013).

A su vez, para arenas en Canadá se han reportado casos en que el equilibrio de sorción se ha alcanzado desde las decenas a centenas de días (Ball & Roberts, 1991). Estos tiempos pueden ser considerados de larga duración para configuraciones experimentales a escala local, pero deben ser considerados para la modelación de flujos a escala regional.

## 5.2 Respecto de la Representación de Rocas Fracturadas

Faybishenko & Benson (2000) establecieron que en el área de la modelación hidrogeológica no existe desafío más complejo que simular flujos en roca fracturada. Esta afirmación no sólo encuentra sustento en la sobre simplificación que sufren tanto las condiciones de flujo como los parámetros del acuífero en general, sino también en la forma de simplificar información estructural como es el fracturamiento de las rocas.

Existen dos grandes problemas al trabajar con roca fracturada: en primer lugar encontrar la escala de trabajo óptima para representar las discontinuidades y en segundo entender qué enfoque representa de mejor forma la matriz fracturada. Los modelos de enrejados discretos de fracturamiento (DFN) ganan en nivel de detalle a la hora de representar discontinuidades, pero requieren alto nivel de información para ser implementados. Para lograr tal nivel de detalle se requiere de complejos estudios de terreno que pueden nunca ser suficientes, ya que la exactitud entregada a una escala de trabajo no es siempre la óptima a otras escalas mayores o menores y puede inducir a errores. Por su parte, los modelos estadísticos, pese a perder la componente discreta del fracturamiento tienden a modelar zonas de alta densidad de discontinuidades de mejor manera al incluir conceptos probabilísticos intentando, con menos información, poder extrapolar de forma representativa (por lo menos matemáticamente) a un macizo fracturado. Lo anterior no significa que el nivel de información requerido sea bajo, pero si es considerablemente menor que el demandado por un enrejado de fracturas discretas.

Se debe considerar, entonces, los distintos grados de información disponibles a la hora de establecer un modelo de fracturamiento: generalmente a mayores niveles de información, mejores son las posibilidades de establecer modelos más robustos. Si bien un modelo estocástico logra traducir la discontinuidad de las fracturas en un modelo continuo más fácil de ser trabajado, también necesita de mayor información estadística para que la distribución de probabilidades tenga sustento matemático. Generalmente requerirán de múltiples observaciones de fracturamiento y toma de datos en sondajes, pozos o trabajo de campo (Blessent, 2011; Cacas et al., 1990; Moreno et al.; 1988).

Es en este caso que un modelo de fractura única y discreta parece ser una aproximación adecuada. Para lograrlo poca información de campo es necesaria, permitiendo obtener parámetros hidráulicos base (a ser utilizados como primera respuesta o bien como input para otros geomodelos de fracturamiento más complejo), ya bien mayor conocimiento del área no sea necesario o se esté a la espera de estudios hidráulicos de terreno adicionales.

### 5.3 Respecto del Modelo Conceptual Utilizado

Al comparar el modelo experimental de la Figura 3.1 con el modelo conceptual ilustrado en la Figura 3.3 saltan a la vista diferencias sustanciales. Por un lado, el modelo de fractura simple no considera los múltiples caminos que puedan tomar los trazadores dentro de cada discontinuidad. Por ejemplo, dentro de las múltiples fracturas adjuntas al pozo de inyección puede darse el caso que las que se alejan del pozo de recuperación presenten canales, volviéndose caminos preferenciales que llevarán el trazador fuera del radio de bombeo para la extracción. También existe la posibilidad de presentar diferentes gradientes hidráulicos (tanto verticales como horizontales) lo cual, según se comentará en posteriores párrafos, tiene un efecto no menor en el transporte tanto de masa como calor.

Sin embargo, la dificultad para incluir aislantes (*packers*) en procesos de inyección/extracción en el mismo pozo de los softwares de modelación numérica o el representar distintas discontinuidades intersectantes en una grilla estructurada (incluso aún en una no estructurada), hacen que sea más sencillo modelar estos fenómenos con algunas aproximaciones a la realidad y no implementar directamente un modelo del montaje experimental.

Es en este punto donde más que las diferencias en el modelo, son las similitudes que validan la posible representación de este problema de inyección-extracción vertical como uno de fracturamiento horizontal simple. Por ejemplo, se aprovecha el sentido de transporte (a favor de gradiente) o bien se puede simplificar la zona de fracturamiento como un medio poroso equivalente (Long, 1982; Moreno et al., 1988) teniendo resultados comparables y extrapolables a situaciones más complejas.

De la Bernardie (2017) se basa en formulismos matemáticos para proponer un modelo de fracturamiento simple con presencia de múltiples canales tubulares (dando la apariencia de fracturas cilíndricas y no planares), proponiendo este modelo como otra posible solución a la calibración tanto de calor y masa con un set de parámetros hidráulicos. Si bien esta propuesta logra explicar efectos como la diferencia de magnitudes entre temperatura máxima alcanzada y concentración peak percibida (De la Bernardie 2017), asume nuevamente el efecto de canales solidarios al gradiente y al flujo, caso ideal pero no necesariamente real. En este apartado el transporte por fractura

simple horizontal obtiene puntos a favor, pues representa el transporte de manera sencilla, obteniendo altas confiabilidades y no asumiendo necesariamente el efecto de dichos canales.

Las evidencias recién mostradas sugieren la posibilidad de representar de forma aceptable el flujo y transporte vertical en un modelo de fractura única horizontal, tanto por facilitar la compleja tarea de simular condiciones de impermeabilidad en una inyección/extracción sobre el mismo pozo y transporte por fracturas entre la inyección/extracción como por los bajos supuestos a cumplir para que el modelo siga siendo válido.

#### 5.4 Respecto del Ajuste Obtenido

Antes de discutir acerca del ajuste realizado, en primer lugar debe entenderse qué significa el valor de eficiencia alcanzado. Hecht-Mendez et al. (2010) propone el uso del método de eficiencias para evaluar la calidad de un ajuste para transporte calórico en sistemas geotermales cerrados y también clasifica rangos de confiabilidad de acuerdo a la eficiencia obtenida: muy bueno de 0.98 a 1, bueno de 0.8 a 0.97, moderado de 0.5 a 0.79 y bajo 0.5 los valores se consideran insatisfactorios. Cabe mencionar que esta clasificación se realizó para un montaje experimental de laboratorio donde las variables hidráulicas están bien acotadas. Para el montaje realizado en este trabajo, donde se ajusta una respuesta propuesta y no probada experimentalmente, al existir mayores incertidumbres en los parámetros hidráulicos que los encontrados en un montaje experimental de laboratorio los rangos para la clasificación que se proponen son: muy bueno de 0.9 a 1, bueno de 0.6 a 0.89, moderado de 0.45 a 0.59 y bajo 0.45 los valores se consideran insatisfactorios.

Especial cuidado debe tenerse al usar el método de eficiencias, ya que su uso automatizado puede llevar a inconsistencias o peores resultados aun así el coeficiente de correlación obtenido sea alto. Al observar la Figura 5.2 se muestran dos ajustes con parámetros hidráulicos similares.

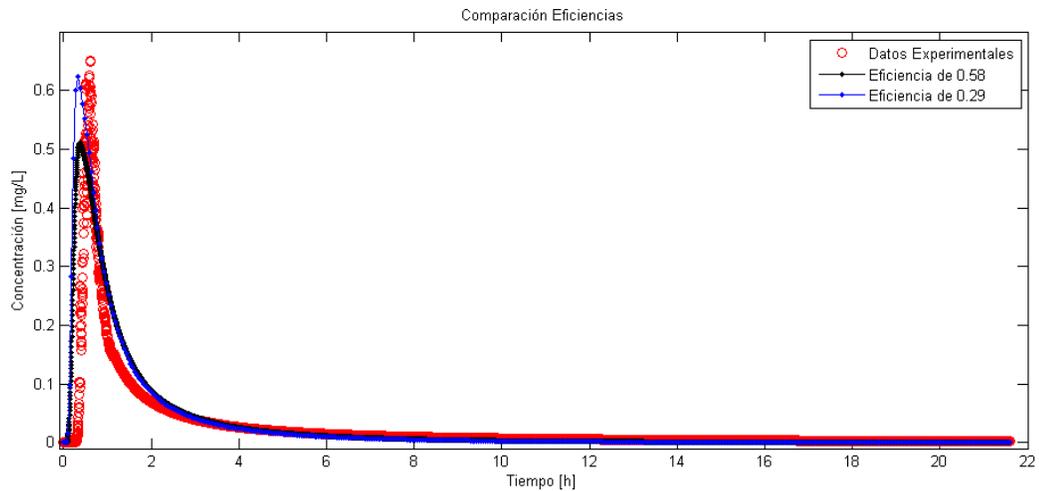


Figura 5.2: Comparación valores de eficiencia alcanzada con match visual.

En este caso la mayor eficiencia se alcanza cuando los peaks de concentración numéricos son más bajos que las respuestas experimentales, aun cuando el match visual de la tendencia azul (con menor eficiencia) sea mayor. Esto ocurre debido a que el cálculo propuesto por el método de eficiencias (Ecuación 52) es un método que compara uno a uno cada par numérico-experimental en el modelo, así los peaks numéricos más altos, conllevarán mayores diferencias con sus pares experimentales, generando una disminución en la eficiencia de la curva total.

Teniendo en cuenta la necesidad de no sólo obtener un alto valor de correlación, sino también buenas correlaciones visuales, al considerar las eficiencias alcanzadas y la similitud visual entre ambas curvas numérico-experimentales, se obtienen ajustes buenos para ambos modelos, transporte de soluto y calor.

Los análisis de sensibilidad realizados muestran la existencia de un parámetro crítico, la porosidad de los elementos circundantes, que controla de buena forma el transporte másico disminuyendo de manera importante las concentraciones máximas alcanzadas. La determinación en terreno de este parámetro resulta fundamental para obtener una primera aproximación fidedigna, por medio de un modelo de fractura única, de los parámetros del acuífero. Otros parámetros, si bien no son críticos, merecen la pena de ser estudiados y contar con ellos como base. Un ejemplo es contar con valores de gradiente hidráulico para determinar el sentido de flujo, las Figura 5.3 y Figura 5.4 muestran cómo afecta un gradiente hidráulico W-E solidario a la posición de los pozos en comparación con uno N-S perpendicular a estos. Si bien el gráfico muestra un modelo de transporte calor, es válido también para uno de masa.

Aunque el modelo experimental consista en pozos separados en la vertical las cargas hidráulicas serán diferentes en las cercanías de ambas cribas, justificando la existencia de un gradiente, por lo que contar con esta información puede acelerar los tiempos de implementación de los distintos modelos ya que, como muestran las figuras, su efecto puede resultar considerable.

Dentro del análisis de sensibilidad se ha incluido el efecto que los canales tienen en el transporte. Estos, como conductos con mayor conductividad hidráulica que la roca circundante, si son solidarios al flujo logran llevar mayores temperaturas hasta el pozo de producción. Este fenómeno ha sido descrito por de la Bernardie (2017) y permite explicar las diferencias en las magnitudes de los transportes de calor y masa expuesto en apartados anteriores.

Producto de lo ya expuesto, puede establecerse que el ajuste propuesto es bueno y que, pese a las incertidumbres dadas por la falta de información, encontrar parámetros hidráulicos que ajusten a la vez curvas de transporte de masa y calor es posible. Este método resulta una buena primera aproximación a los parámetros hidráulicos de un sistema ante la espera de nuevos estudios de campos o donde la escala de trabajo no requiera la definición de varias unidades hidrogeológicas más acotadas. Para el escenario de calor propuesto, como en toda simulación resulta de primera necesidad la corroboración de los datos experimentales en terreno. En caso de que la configuración experimental no entregue los resultados propuestos para la calibración, deben revisarse los supuestos y acotar mejor el problema, puesto que se estaría llegando a configuraciones hidráulicas que no representen de la mejor forma la situación real del acuífero.

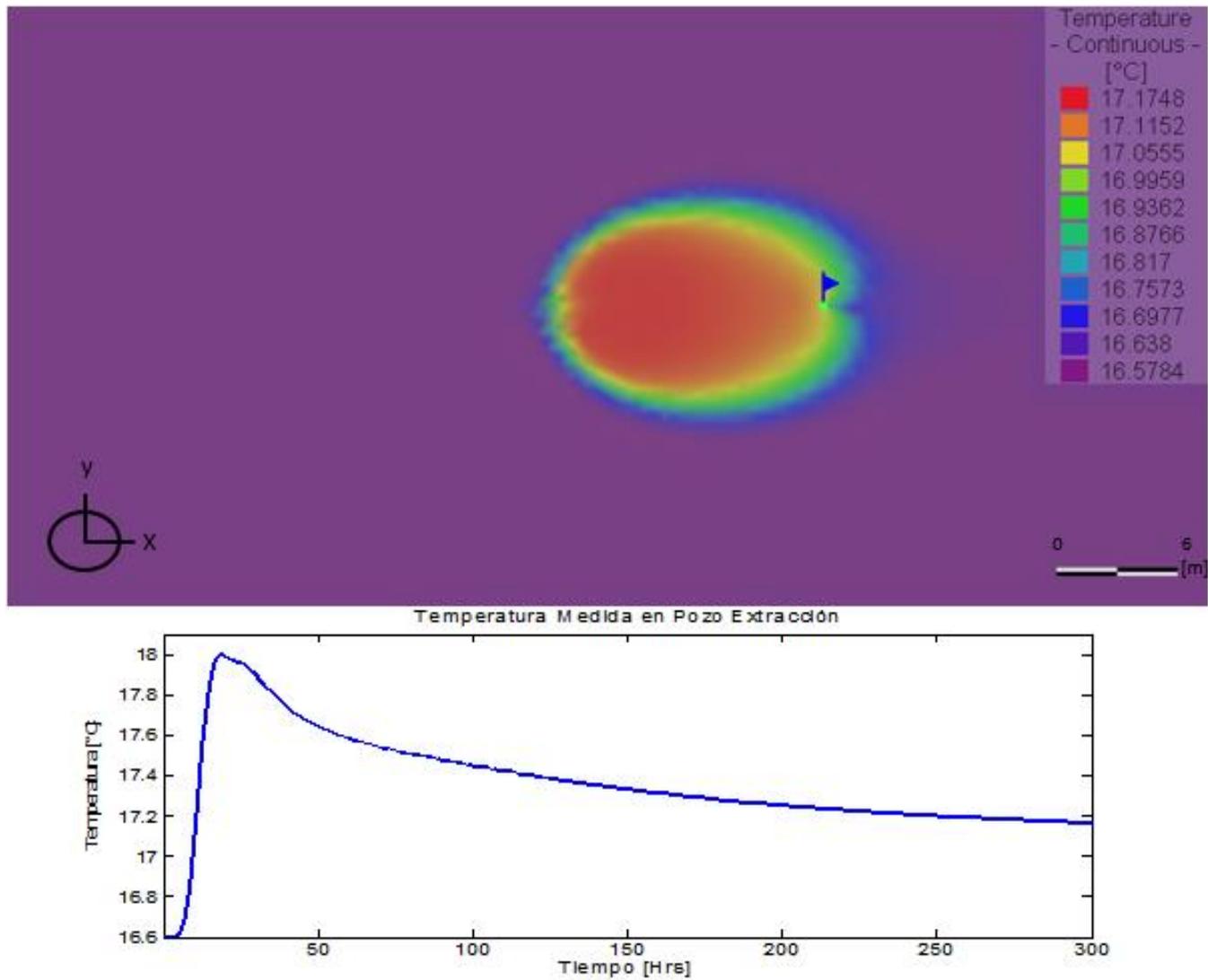


Figura 5.3: Simulación con gradiente hidráulico W-E, solidario a los pozos (indicados con banderines).

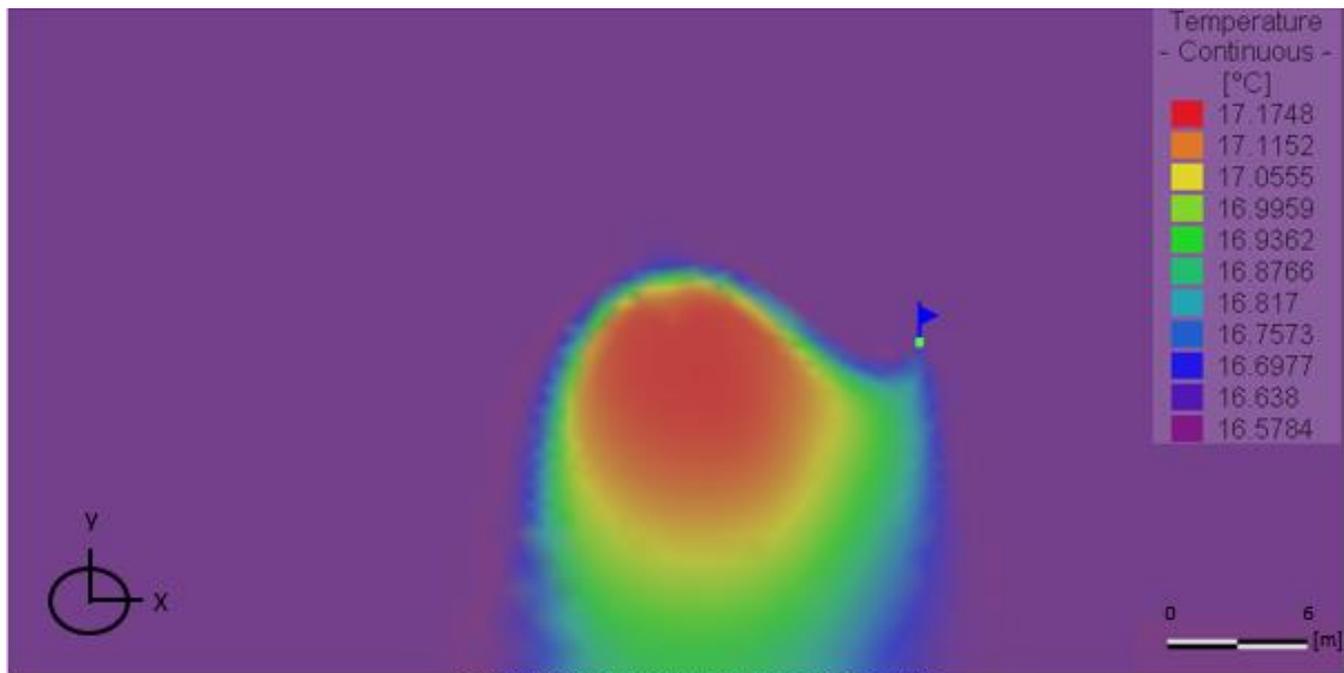


Figura 5.4: Simulación con gradiente hidráulico N-S, perpendicular a los pozos (indicados con banderines).

## 5.5 Respecto de la Extrapolación de Resultados

Una de las posibilidades corresponde, como ya se ha mencionado, a extrapolar estos resultados a zonas de interés chilenas como por ejemplo a la zona de falla Pocuro, sistema cuyo comportamiento hoy se sigue dirimiendo (Carter & Aguirre, 1965; Heuser, 2016).

Una de las primeras consideraciones que se debe tener al extrapolar a una zona regional un experimento local es el tamaño de los elementos involucrados y cuanta información representan. La calibración en base a fractura única realizada en este trabajo corresponde a una única unidad hidrogeológica con parámetros únicos correspondientes a dicha unidad, a nivel regional pueden coexistir varias unidades y si el tamaño de bloque es muy grande puede perderse detalle en la información. Así, este tipo de modelos deben complementarse con un mapeo regional que permitan establecer diferentes unidades y distintos lugares experimentales representativos para implementar esta metodología. Sólo así puede tenerse una primera aproximación válida a una zona de carácter regional.

Otro reparo que debe considerarse son los tiempos de cómputo involucrados y las capacidades computacionales mínimas para llevar una simulación con un modelo más complejo. A modo de ejemplo la simulación realizada en este trabajo, contando con 24744 elementos, toma un estimado de 15 minutos para el transporte de calor y 40 minutos para el transporte de masa, simulando un modelo de 60x30x4 [m]. A la hora de ampliar el geomodelo, dependiendo de la resolución deseada, los tiempos de cómputo pueden verse altamente incrementados, siendo algo que debe tenerse en cuenta a la hora de analizar utilizar esta u otra aproximación a este problema.

Finalmente debe considerarse la posibilidad de realizar esta configuración experimental en la falla y también entender el significado de lo que esto representa: Estos experimentos se realizan sobre zonas de falla o zonas menos fracturadas, es por eso que deben realizarse en sitios representativos de las distintas unidades hidrogeológicas definidas desde un mapeo, para luego utilizar resultados y eventualmente simular procesos de transporte geotermales más complejos.

Ahora bien, en el caso de efectivamente simular fenómenos de transporte a escala regional, (utilizando los parámetros hidráulicos obtenidos después de aplicar esta metodología) debe considerarse que las entradas serán distintas y los procesos involucrados son diferentes, esto se verá reflejado en diferentes condiciones de borde e iniciales. A modo de ejemplo, fenómenos de transporte de masas en los que los tiempos de transporte/residencia y las temperaturas involucradas son mayores, conllevarán la acción de procesos que no se retratan de la mejor forma en

estos modelos cortos de fractura simple como la absorción y difusión que en flujos regionales si tienen efectos considerables.

Nuevamente, esta extrapolación queda condicionada al correcto desempeño de la respuesta experimental calórica ante el escenario propuesta para el sitio de Ploemeur. En caso de que los resultados de la calibración difieran se debe considerar aplicar otro modelo para el transporte, como uno de fracturas cilíndricas (de la Bernardie, 2017), el cual pueda ser extrapolado a un caso regional.

Suponiendo el buen desempeño de la respuesta experimental y en base a lo anteriormente expuesto, se propone el modelo de fractura simple como una buena primera aproximación al desafío del flujo y transporte en rocas fracturadas. Éste tiene la ventaja de necesitar pocos parámetros de entrada y pruebas de campo, por lo que puede considerarse como una opción viable antes de realizar modelos más complejos y robustos como puede ser, por ejemplo, uno estocástico.

## 6. CONCLUSIONES

Ante la tarea de proponer nuevas metodologías para la caracterización y modelación de reservorios geotérmicos se propone la implementación de un modelo de fractura simple en el cual se realizan experimentos de inyección de trazador y agua caliente.

Se propone implementar el experimento y adquirir la información de terreno desde el sitio de investigación alojado en granitos fracturados de Ploemeur, noreste de Francia. En él se realizarán consecutivamente las inyecciones correspondientes obteniendo en el pozo de recuperación las respuestas en el tiempo de la concentración del trazador y de la temperatura.

El modelo conceptual corresponde a uno de fractura simple con una discontinuidad horizontal que separa 2 grupos de capas (*layers*) sobre el cual se simularon dos pozos (inyección y recuperación) separados por 10.8m. Este modelo representa las condiciones experimentales, donde los pozos están alineados en profundidad y separados por *packers*, de manera que la única posibilidad de transporte es por las fracturas circundantes a la roca y los canales que estos formen.

La calibración del modelo se realizó por medio de iteraciones desde un resultado inicial, obtenido desde los parámetros default del programa y de acuerdo a la ley cúbica. Luego, después de estudiar el comportamiento de los parámetros, nuevas simulaciones entregaron una primera aproximación a los parámetros del acuífero.

Dentro de los grandes controladores de la llegada de masa y calor al pozo de recuperación se encontraron la conductividad hidráulica y no así el espesor de fractura además de ser más notorios en el transporte calórico y no másico. La explicación de esto se encuentra en que los procesos son dominados por la advección como mecanismo de transporte y no por efectos de otros participantes: en el modelo numérico no existe variación de la conductividad hidráulica asociado a cambios en apertura. Así, el flujo advectivo no es modificando, sin embargo en mecanismos menores (como la dispersión) si existe influencia por cambios en apertura, lo que se ve plasmado en que la diferencia en los resultados de transporte másico son mucho más notorios que los resultados del transporte calórico, ya que la advección domina en mucho mayor grado el transporte másico que el calórico (donde otros mecanismos de transporte tienen mayor protagonismo). Factores como reacciones de sorción o efectos difusivos a esta escala de tamaño no tienen efectos notorios, sin embargo a la hora de estudiar circulación a escala regional deben ser cuantificados y revisitados.

En cuanto a la representación mediante un modelo de fractura única la situación de terreno, deben tenerse en consideración los distintos grados de información disponibles a la hora de establecer un modelo de fracturamiento: generalmente a mayores niveles de información, mejores son las posibilidades de establecer modelos más robustos. La ventaja de utilizar la metodología presentada en esta memoria es la de ser un método que requiere de poca información de campo, ya bien mayor conocimiento del área no sea necesario o se esté a la espera de estudios hidráulicos de terreno adicionales. Asimismo, el modelo conceptual utilizado permite la abstracción y simplificación de la configuración experimental de manera eficiente.

Con respecto al ajuste propuesto, a pesar del poco amarre del problema en cuanto a condiciones iniciales y los múltiples grados de libertad para los parámetros y configuraciones, los resultados obtenidos son buenos tanto estadística como visualmente. Los análisis de sensibilidad efectuados sobre el ajuste muestran la existencia de propiedades críticas como la porosidad de los elementos circundantes y la dirección de gradiente hidráulico utilizado. La determinación en terreno de estos parámetros resulta fundamental para obtener una primera aproximación fidedigna, por medio de un modelo de fractura única, de los parámetros del acuífero y su determinación no debiera revestir mayor dificultad, ya que puede aprovecharse la implementación de los pozos para obtener dichos valores. Como suele suceder en toda simulación, resulta de primera necesidad la corroboración de los datos experimentales en terreno. En caso de que la configuración experimental para el escenario calórico no entregue los resultados propuestos para la calibración, deben revisitarse los supuestos y acotar mejor el problema, ya que se estaría llegando a configuraciones hidrogeológicas que no representen de la mejor forma la situación real del acuífero.

Finalmente, al considerar la extrapolación de los resultados a zonas de interés tanto chilenas como extranjeras debe tenerse en consideración el cambio de escalas y lo que esto conlleva: distintos tamaños de bloque y mayores tiempos de cómputo con requerimientos computacionales superiores. A modo de evitar la pérdida de información importante con el incremento de tamaño de bloques, el estudio se debe complementar con un mapeo regional que permita establecer diferentes unidades y distintos lugares experimentales representativos para implementar esta metodología.

Así, un modelo de fractura simple resulta ser una buena primera aproximación al desafío del flujo y transporte en rocas fracturadas. Dentro de sus ventajas está la de necesitar pocos parámetros de entrada y pruebas de campo, por lo que puede considerarse como una opción viable antes de realizar modelos más complejos y robustos como puede ser, por ejemplo, uno estocástico.

## 7. BIBLIOGRAFÍA

- Abelin, H., Birgersson, L., Widén, H., Agren, T., Moreno, L., & Neretnieks, I. (1994). Channeling experiments in crystalline fractured rocks. *Journal of Contaminant Hydrology*, 15(3), 129–158. [https://doi.org/10.1016/0169-7722\(94\)90022-1](https://doi.org/10.1016/0169-7722(94)90022-1)
- Andersson, J., & Dverstorp, B. (1987). Conditional simulations of fluid flow in three-dimensional networks of discrete fractures. *Water Resources Research*. <https://doi.org/10.1029/WR023i010p01876>
- Aris, R. (1956). A. On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Process Systems Engineering*, 1(C), 109–120. [https://doi.org/10.1016/S1874-5970\(99\)80009-5](https://doi.org/10.1016/S1874-5970(99)80009-5)
- Barenblatt, G. ., Zheltov, I. ., & Kochina, I. . (1960). Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. [https://doi.org/10.1016/0021-8928\(60\)90107-6](https://doi.org/10.1016/0021-8928(60)90107-6)
- Bear, J. (1972). Dynamics of Fluids in Porous Media. *Soil Science*, 120(2), 162–163. <https://doi.org/10.1097/00010694-197508000-00022>
- Bear, J., Tsang, C. F., & Marsily, G. D. (1993). Flow and contaminant transport in fractured rocks.
- Berkowitz, B., & Zhou, J. (1996). Reactive solute transport in a single fracture. *Water Resources Research*, 32(4), 901–913. <https://doi.org/10.1029/95WR03615>
- Blessent, D., Therrien, R., & MacQuarrie, K. (2009). Coupling geological and numerical models to simulate groundwater flow and contaminant transport in fractured media. *Computers & Geosciences*. [https://doi.org/DOI 10.1016/j.cageo.2008.12.008](https://doi.org/DOI%2010.1016/j.cageo.2008.12.008)
- Blessent, D., Therrien, R., & Gable, C. W. (2011). Large-scale numerical simulation of groundwater flow and solute transport in discretely-fractured crystalline bedrock. *Advances in Water Resources*, 34(12), 1539–1552. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.09.008>
- Blessent, D., Therrien, R., & Gable, C. W. (2011). Large-scale numerical simulation of groundwater flow and solute transport in discretely-fractured crystalline bedrock. *Advances in Water Resources*. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.09.008>

- Blessent, D., Therrien, R., & Lemieux, J.-M. (2011). Inverse modeling of hydraulic tests in fractured crystalline rock based on a transition probability geostatistical approach. *Water Resources Research*. <https://doi.org/10.1029/2011WR011037>
- Bodin, J., Delay, F., & de Marsily, G. (2003). Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 2. Mathematical formalism. *Hydrogeology Journal*, 11(4), 434–454. <https://doi.org/10.1007/s10040-003-0269-1>
- Bodin, J., Delay, F., & de Marsily, G. (2003). Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 1. Fundamental mechanisms. *Hydrogeology Journal*, 11(4), 418–433. <https://doi.org/10.1007/s10040-003-0268-2>
- Bradbury, M. H., & Green, A. (1986). Investigations into the factors influencing long range matrix diffusion rates and pore space accessibility at depth in granite. *Journal of Hydrology*, 89(1–2), 123–139. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(86\)90147-2](https://doi.org/10.1016/0022-1694(86)90147-2)
- Brown, S. R. (1987). Fluid Flow Through Rock Joints: The Effect of Surface Roughness. *Journal of Geophysical Research*, 92(B2), 1337–1347. <https://doi.org/10.1029/JB092iB02p01337>
- Cacas, M. C., Ledoux, E., de Marsily, G., Tillie, B., Barbreau, A., Durand, E., ... Peaudecerf, P. (1990). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation: 1. The flow model. *Water Resources Research*, 26(3), 479–489. <https://doi.org/10.1029/WR026i003p00479>
- Cacas, M.-C., Ledoux, E., de Marsily, G., Barbreau, A., Calmels, P., Gaillard, B., & Margritta, R. (1990). Modeling Fracture Flow With a Stochastic Discrete Fracture Network: Calibration and Validation - 2. The Transport Model. *Water Resources Research*.
- Carter, W. y Aguirre, L. 1965. Structural Geology of Aconcagua Province and its relationship to the Central Valley Graben, Chile. *Geological Society of America Bulletin*, v. 76, p. 651-664
- De la Bernardie, J. (2017). Thermal retardation in fractured media: theory and field evidence through heat and solute tracer test experiments.
- Diersch, H. J. G. (1998). About the difference between the convective and the divergence form of the transport equation. *FEFLOW Software White Papers*, 1.

- Diersch, H.-J. G. (2014). *FEFLOW: Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media*. *FEFLOW: Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media* (Vol. 9783642387). <https://doi.org/10.1007/978-3-642-38739-5>
- Domenico, P., & Schwartz, F. W. (1998). Physical and Chemical Hydrogeology. *Ground Water*, 506. <https://doi.org/GB1003.2.D66>
- Eppelbaum, L., Kutasov, I., & Pilchin, A. (2014). Thermal properties of rocks and density of fluids. In *Lecture Notes in Earth System Sciences* (pp. 99–149). [https://doi.org/10.1007/978-3-642-34023-9\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-34023-9_2)
- Faybishenko, B., & Witherspoon, P. a. (2004). Dynamics of Fluids in Fractured Rock. *Proceedings of the Second International Symposium on Dynamics of Fluids in Fractured Rock*, 438. <https://doi.org/LBNL-54275>
- Fitts, C. R. (2013). *Groundwater Science*. *Groundwater Science*. <https://doi.org/10.1016/C2009-0-62950-0>
- Freeze, R. A., & Cherry, J. A. (1979). *Groundwater*. Prentice-Hall.
- Gambolati, G. (1973). Equation for one-dimensional vertical flow of groundwater: 1. The Rigorous Theory. *Water Resources Research*, 9(4), 1022–1028. <https://doi.org/10.1029/WR009i004p01022>
- Gambolati, G. (1974). Second-order theory of flow in three-dimensional deforming media. *Water Resources Research*, 10(6), 1217–1228. <https://doi.org/10.1029/WR010i006p01217>
- Gebhart, B., Jaluria, Y., Mahajan, R. L., & Sammakia, B. (1988). *Buoyancy-induced flows and transport*. New York, NY (USA); Hemisphere Publishing.
- Goranson, R. W. (1942). Heat Capacity; Heat of Fusion. *Handbook of Physical Constants*. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1130/SPE36-p223>
- Grathwohl, P. (2012). *Diffusion in natural porous media: contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics (Vol. 1)*. Springer Science & Business Media.
- Harbaugh, Arlen, W. (2005). MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model — the Ground-Water Flow Process. *U.S. Geological Survey Techniques and Methods*, 253. <https://doi.org/U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16>

- Hecht-Méndez, J., Molina-Giraldo, N., Blum, P., & Bayer, P. (2010). Evaluating MT3DMS for heat transport simulation of closed geothermal systems. *Ground Water*, 48(5), 741–756. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2010.00678.x>
- Heuser, G., Permeabilidad Estructural de la Falla Pocuro y su implicancia en el transporte y propagación de fluidos hidrotermales en la Cuenca del Aconcagua.
- Holman, J. (2010). *Heat Transfer. Mc Graw Hill*. Retrieved from <https://books.google.se/books?isbn=0073529362>
- Hutton, D. V. (2004). *Fundamentals of Finite Element Analysis. Textbook (Important)*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- Kell, G. S. (1975). Density, Thermal Expansivity, and Compressibility of Liquid Water from 0° to 150°C: Correlations and Tables for Atmospheric Pressure and Saturation Reviewed and Expressed on 1968 Temperature Scale. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 20(1), 97–105. <https://doi.org/10.1021/je60064a005>
- Loague, K., & Green, R. E. (1991). Statistical and graphical methods for evaluating solute transport models: Overview and application. *Journal of Contaminant Hydrology*, 7(1–2), 51–73. [https://doi.org/10.1016/0169-7722\(91\)90038-3](https://doi.org/10.1016/0169-7722(91)90038-3)
- Long, J. C. S., Remer, J. S., Wilson, C. R., & Witherspoon, P. A. (1982). Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research*, 18(3), 645–658. <https://doi.org/10.1029/WR018i003p00645>
- Maloszewski, P., & Zuber, A. (1990). Mathematical modeling of tracer behavior in short-term experiments in fissured rocks. *Water Resources Research*, 26(7), 1517–1528. <https://doi.org/10.1029/WR026i007p01517>
- Moreno, L., Tsang, Y. W., Tsang, C. F., Hale, F. V., & Neretnieks, I. (1988). Flow and tracer transport in a single fracture: A stochastic model and its relation to some field observations. *Water Resources Research*, 24(12), 2033–2048. <https://doi.org/10.1029/WR024i012p02033>
- Moreno, L., & Neretnieks, I. (1993). Flow and nuclide transport in fractured media: The importance of the flow-wetted surface for radionuclide migration. *Journal of Contaminant Hydrology*, 13(1–4), 49–71. [https://doi.org/10.1016/0169-7722\(93\)90050-3](https://doi.org/10.1016/0169-7722(93)90050-3)

- Neuman, S. P. (2005). Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks. *Hydrogeology Journal*.  
<https://doi.org/10.1007/s10040-004-0397-2>
- Novakowski, K. S., & Bogan, J. D. (1999). A semi-analytical model for the simulation of solute transport in a network of fractures having random orientations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 23(4), 317–333. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-9853\(19990410\)23:4<317::AID-NAG973>3.0.CO;2-H](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-9853(19990410)23:4<317::AID-NAG973>3.0.CO;2-H)
- Robertson, E. C. (1988). Thermal Properties of Rocks. *United States Department of the Interior Geological Survey*.
- Romm, E. S. (1966). Flow Characteristics of Fractured Rocks. *Nedra, Moscow*, 283.
- Roux, S., Plouraboue, F., & Hulin, J. P. (1998). Tracer dispersion in rough open cracks. *Transport in Porous Media*, 32, 97–116.
- Saeid, S., Al-Khoury, R., Nick, H. M., & Barends, F. (2014). Experimental-numerical study of heat flow in deep low-enthalpy geothermal conditions. *Renewable Energy*, 62, 716–730.  
<https://doi.org/10.1016/j.renene.2013.08.037>
- Sass, J. H., Lachenbruch, A. H., & Munroe, R. J. (1971). Thermal conductivity of rocks from measurements on fragments and its application to heat-flow determinations. *Journal of Geophysical Research*, 76(14), 3391–3401. <https://doi.org/10.1029/JB076i014p03391>
- Shewchuk, J. R. (1999). Lecture notes on Delaunay mesh generation.
- Simmons, C. T., Fenstemaker, T. R., & Sharp, J. M. (2001). Variable-density groundwater flow and solute transport in heterogeneous porous media: Approaches, resolutions and future challenges. *Journal of Contaminant Hydrology*. [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(01\)00160-7](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(01)00160-7)
- Snow, D. T. (1969). Anisotropic permeability of fractured media. *Water Resources Research*, 5(6), 1273–1289.
- Sudicky, E. A., & Frind, E. O. (1982). Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solutions for a system of parallel fractures. *Water Resour. Res.*, 18(6), 1634–1642.  
<https://doi.org/10.1029/WR018i006p01634>
- Taylor, G. (1953). Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly through a Tube. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical*,

*Physical and Engineering Sciences*, 219(1137), 186–203.  
<https://doi.org/10.1098/rspa.1953.0139>

Verruijt, A. (1969). *Flow Through Porous Media*. (E. R. J. M. DeWiest, Ed.). Academic Press, New York.

Wang, H. F., & Anderson, M. P. (1984). Introduction groundwater modeling. Transport Theory and Statistical Physics.  
<https://doi.org/10.1080/00411458408214493>

Watanabe, N., Hirano, N., & Tsuchiya, N. (2009). Diversity of channeling flow in heterogeneous aperture distribution inferred from integrated experimental-numerical analysis on flow through shear fracture in granite. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 114(4).  
<https://doi.org/10.1029/2008JB005959>