CI66J

CI66J/CI71T
MODELACION NUMERICA DE AGUAS SUBTERRANEAS

TEMA 6

MODELACION NUMERICA DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN AGUAS SUBTERRANEAS

OTOÑO 2006

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

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- GENERAL
- EULERIANO
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

Inicialmente sólo para problemas de intrusión salina.

Cálculos analíticos sin difusión, dispersión, adsorción ni reacciones cinéticas.

Se inicia en el área de la ingeniería química.

Alcanza su auge con el estudio del movimiento de sustancias radioactivas en el agua subterránea.

1960 -> Inicio de estudios teóricos y numéricos

1970 -> Aumento vertiginoso de estudios numéricos
Estudios de campo
Introducción de Elementos Finitos

ESTRUCTURA TIPICA DE UN PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

RESOLVER PROBLEMA DE FLUJO

$$\nabla \cdot (K \cdot \nabla h) - R = S_S \cdot \frac{\partial h}{\partial t}$$

↓

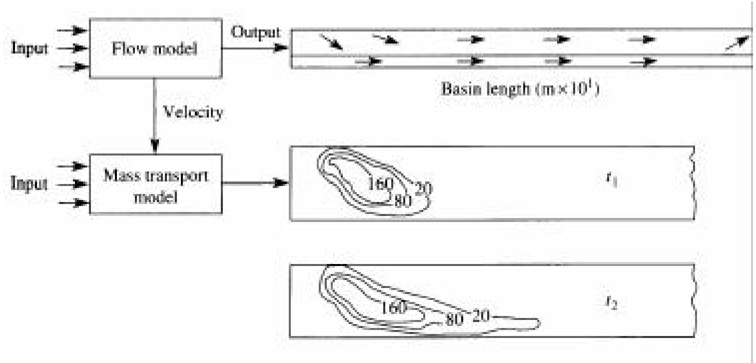
DETERMINAR VELOCIDAD

$$v = -\underline{K} \cdot \nabla h$$

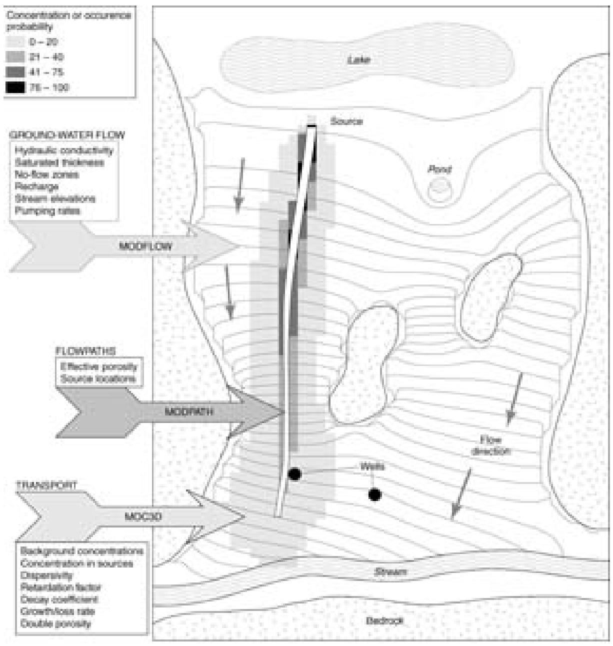
↓

RESOLVER PROBLEMA DE TRANSPORTE

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla C) - \nabla \cdot (vC)$$



Input
Flow model
Output
Basin length ($m \times 10^1$)
Velocity
Input
Mass transport model
160
80
20
t_1
160
80
20
t_2



Concentration or occurence probability
0 – 20
21 – 40
41 – 75
76 – 100
GROUND-WATER FLOW
Hydraulic conductivity
Saturated thickness
No-flow zones
Recharge
Stream elevations
Pumping rates
MODFLOW
FLOWPATHS
Effective porosity
Source locations
MODPATH
TRANSPORT
MOC3D
Background concentrations
Concentration in sources
Dispersivity
Retardation factor
Decay coefficient
Growth/loss rate
Double porosity
Lake
Source
Pond
Flow direction
Wells
Stream
Bedrock

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- **GENERAL**
- **EULERIANO**
- **LAGRANGIANO**
- **EULERIANO - LAGRANGIANO**

Resolución de un problema de transporte de contaminantes requiere de:

Una ecuación de estado.

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

Condiciones de Borde.

$$\boxed{C(0,t) = C_0 \qquad t > 0}$$

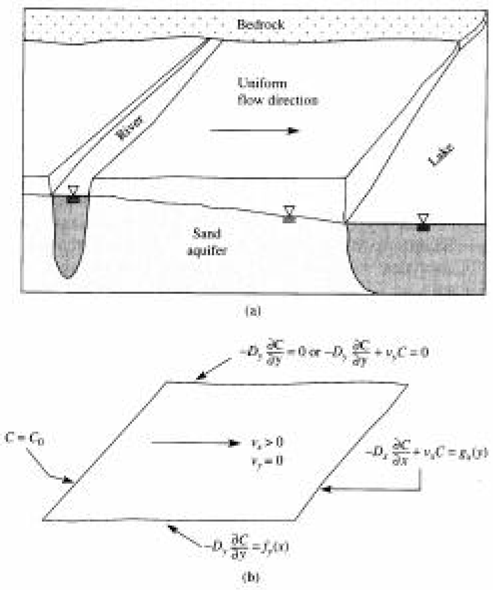
$$\boxed{C(\infty,t) = 0 \qquad t > 0}$$

Condiciones Iniciales.

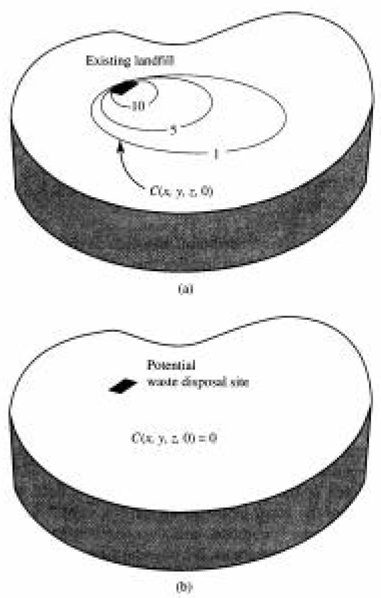
$$\boxed{C(x,0) = 0 \qquad x > 0}$$

$$\boxed{C(x,t)}$$

CONDICIONES DE BORDE



CONDICIONES INICIALES



INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- GENERAL
- EULERIANO
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

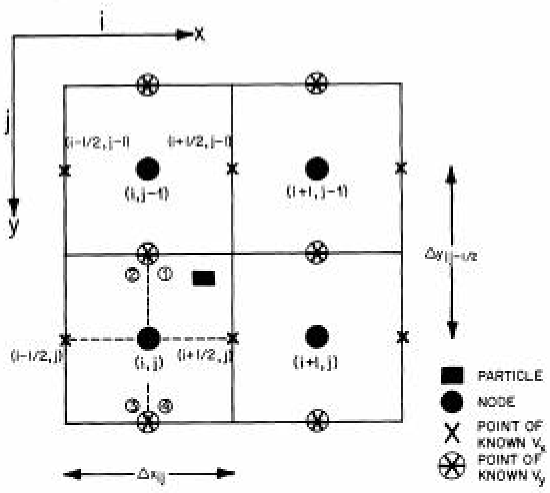
Métodos de Rastreo de Partículas (Particle Tracking) son utilizados para trazar el movimiento de pequeñas partículas imaginarias en un campo de velocidad.

Estos códigos (por ejemplo MODPATH) son postprocesadores que acompañan a un programa como MODFLOW al utilizar las velocidades determinadas por este último para calcular la posición dew estas partículas imaginarias.

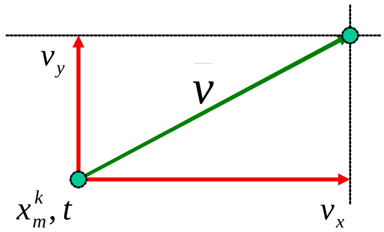
Son muy útiles para detectar errores conceptuales en modelos, ya que permiten chequear las hipótesis de flujo que se han planteado inicialmente.

$$v_x = (1 - f_x) \cdot v_{x(i-\frac{1}{2},j)} + f_x \cdot v_{x(i+\frac{1}{2},j)}$$

$$f_x = \frac{\left(x_P - x_{i-\frac{1}{2},j}\right)}{\Delta x}$$



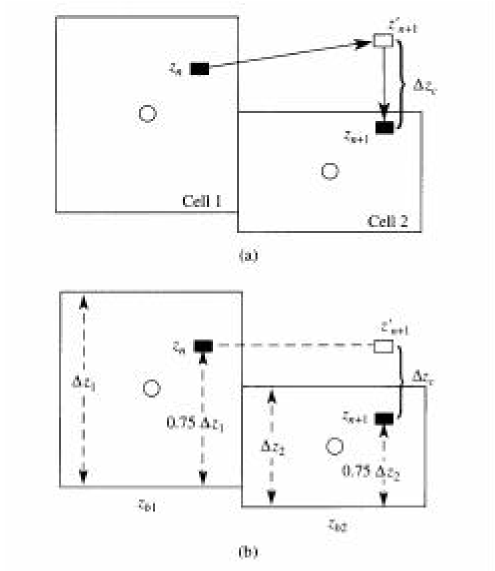
PARTICLE TRACKING:



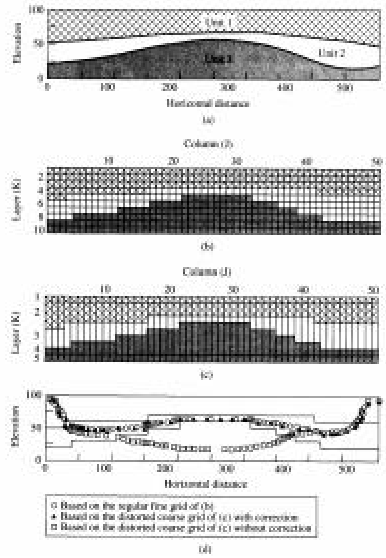
$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t$$

$$y_m^{k+1} = y_m^k + v_y \cdot \Delta t$$

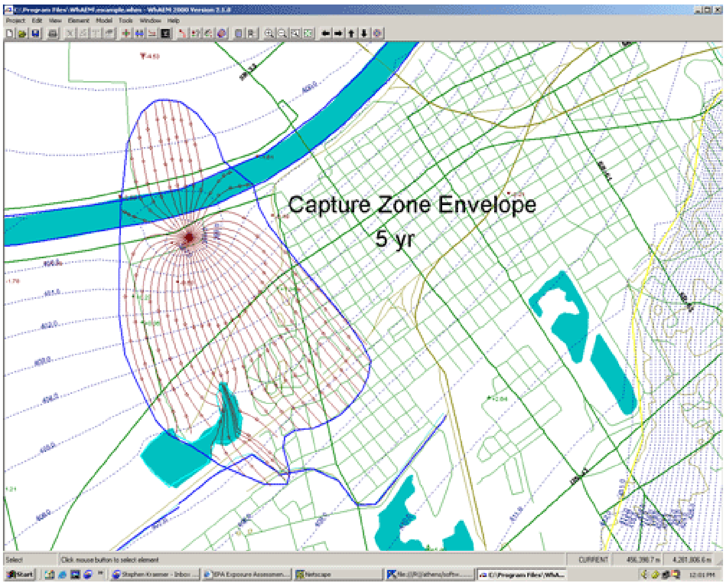
Problemas con mallas distorsionadas:.



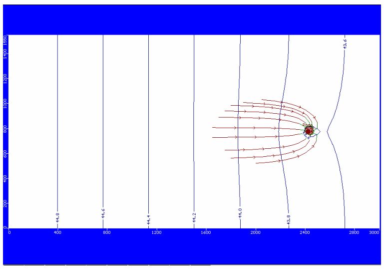
Problemas con mallas distorsionadas:.

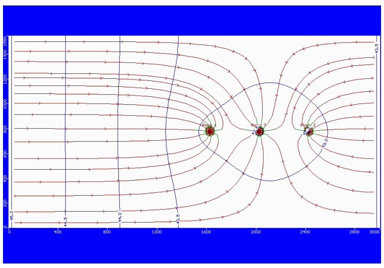


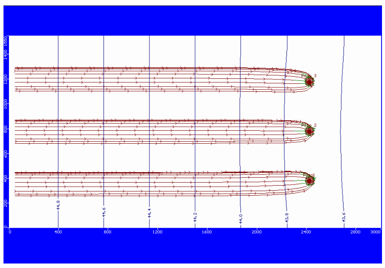
ZONAS DE CAPTURA



PERIMETROS DE PROTECCION







INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

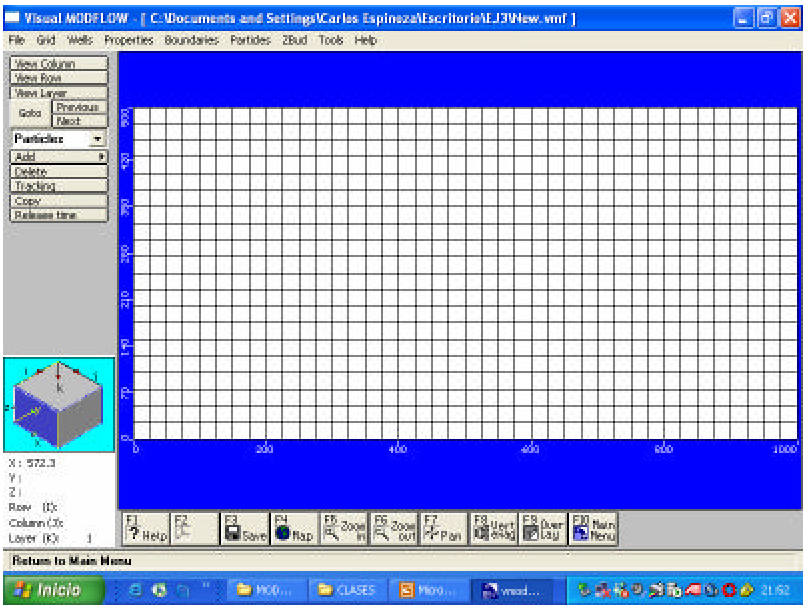
- GENERAL
- EULERIANO
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

El programa MODPATH fue desarrollado por el USGS (Pollock, 1989) para calcular el movimiento de partículas en 3D a partir de simulaciones de flujo permanente, obtenidas MODFLOW.

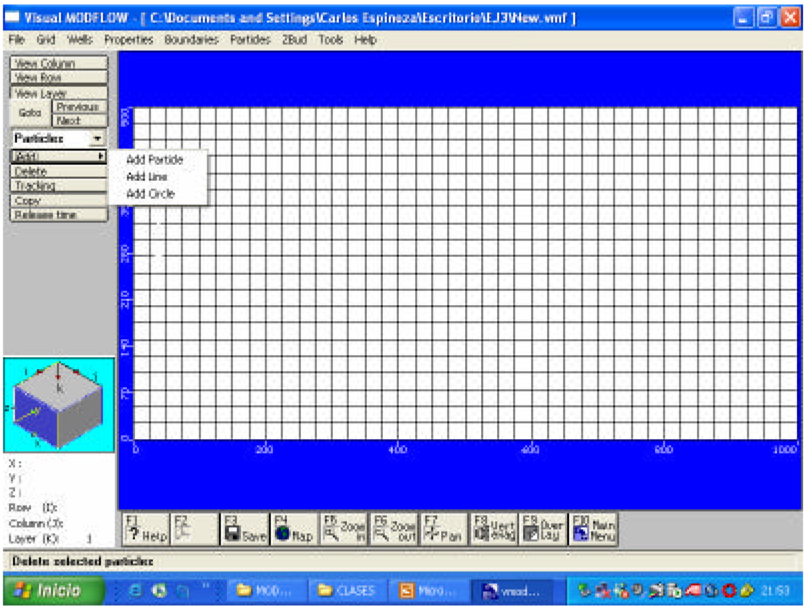
MODPATH puede ser utilizado para calcular líneas de flujo 3D y la posición de partículas en tiempos específicos.

MODPATH usa un esquema semianalítico, que se basa en el supuesto de que cada componente de la velocidad varía linealmente en una grilla. Este supuesto permite obtener una expresión analítica para describir el patrón de flujo en una celda. Si se tiene la posición inicial de una partícula es posible obtener su nueva posición para un tiempo de viaje deseado.

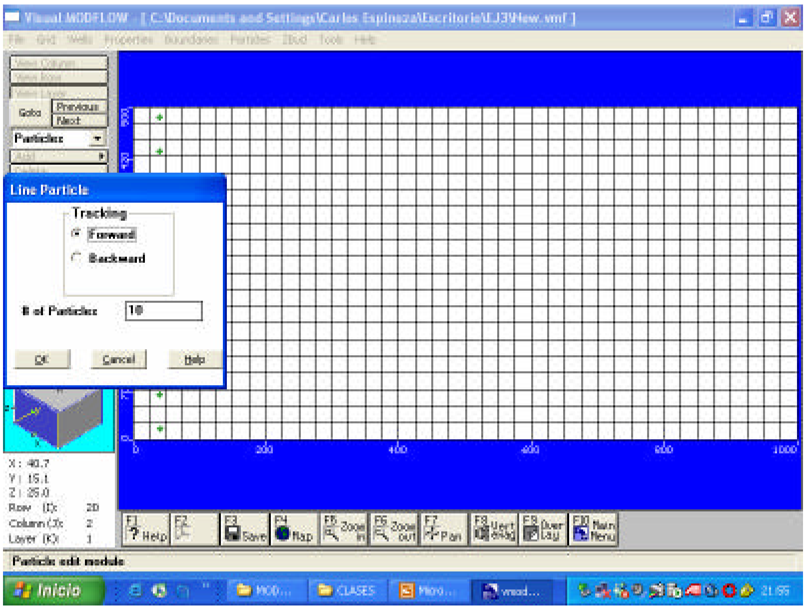
MODPATH



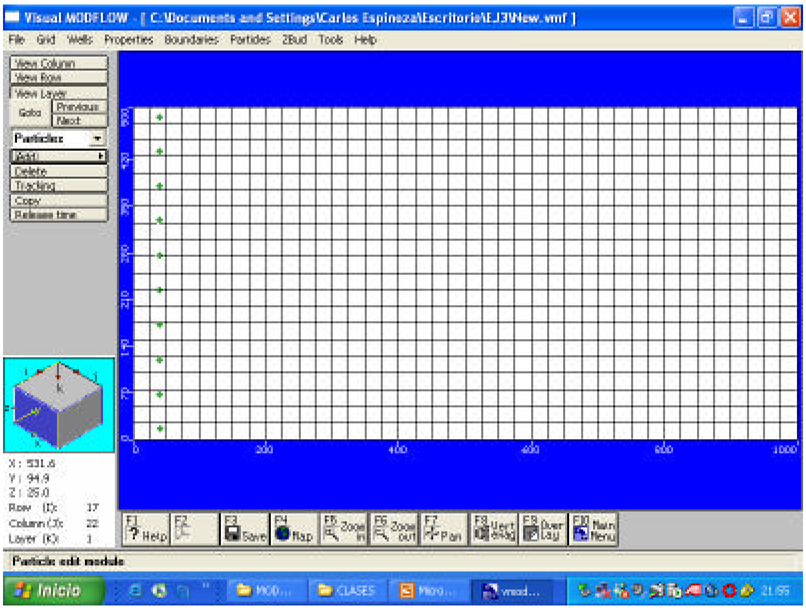
MODPATH



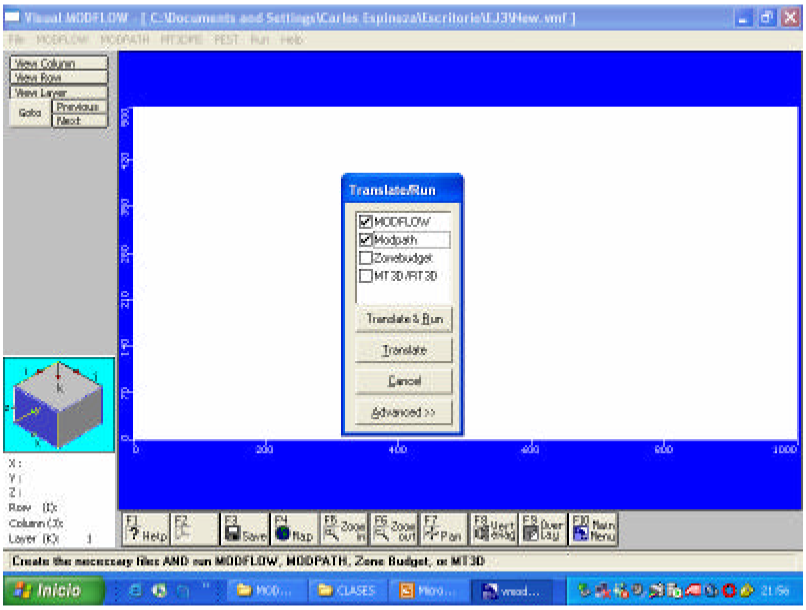
MODPATH



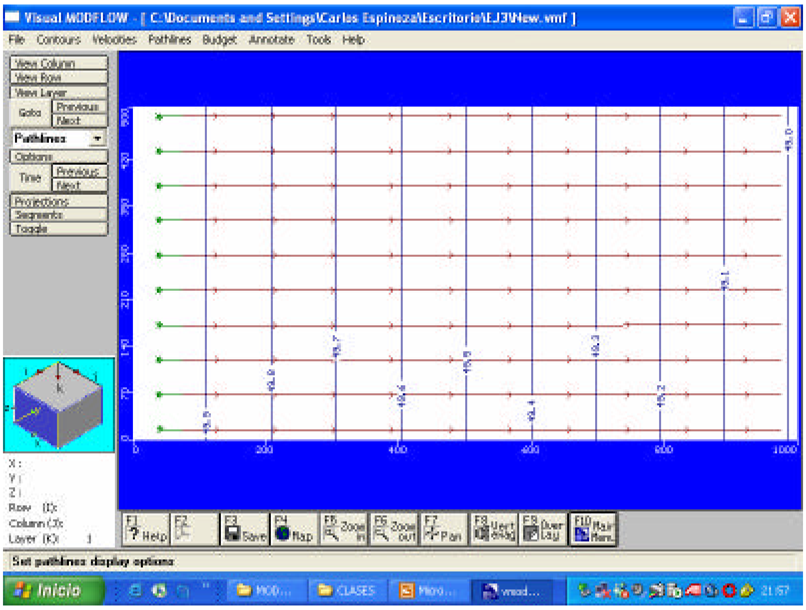
MODPATH



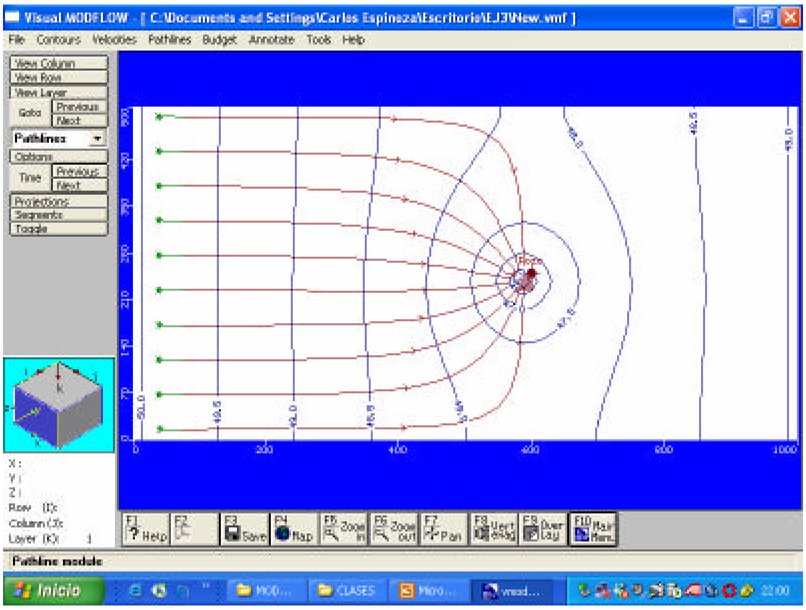
MODPATH



MODPATH



MODPATH



INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- **GENERAL**
- **EULERIANO**
- **LAGRANGIANO**
- **EULERIANO - LAGRANGIANO**

Hay muchos métodos diferentes para resolver la ecuación de Advección-Dispersión:

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

- Diferencias Finitas (DF)
- Elementos Finitos (EF)
- Volúmenes Finitos (VF)

} **EULERIANO**

- Random Walk

} **LAGRANGIANO**

- Método de las Características (MOC)
- Método de las Características Modificado (MMOC)
- Método de las Características Híbrido (HMOC)

} **EULERIANO LAGRANGIANO**

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- **GENERAL**
- **EULERIANO – DIFERENCIAS FINITAS**
- **LAGRANGIANO**
- **EULERIANO - LAGRANGIANO**

DIFERENCIAS FINITAS

Expandir términos de ADE usando diferencias finitas:

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

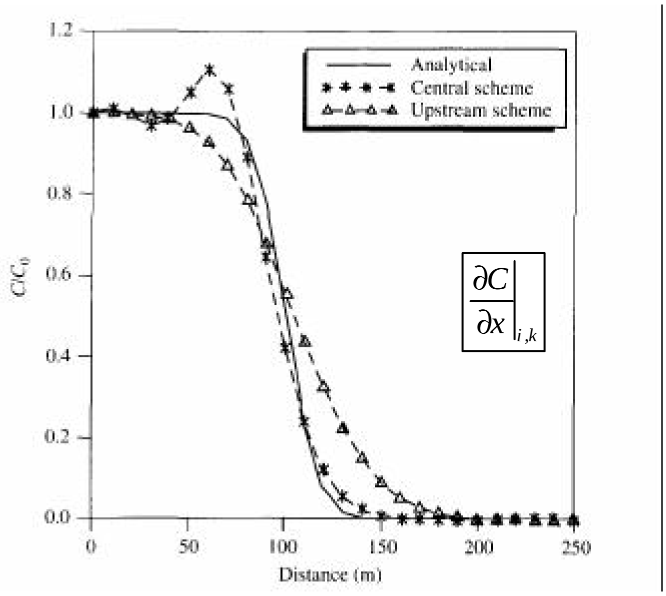
$$\boxed{\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_{i,k} \cong \frac{C_{i-1}^{k+1} - 2 \cdot C_i^{k+1} + C_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2}}$$

$$\boxed{\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{i,k} \cong \frac{C_{i+1}^{k+1} - C_i^{k+1}}{\Delta x}}$$

ESQUEMA EULERIANO

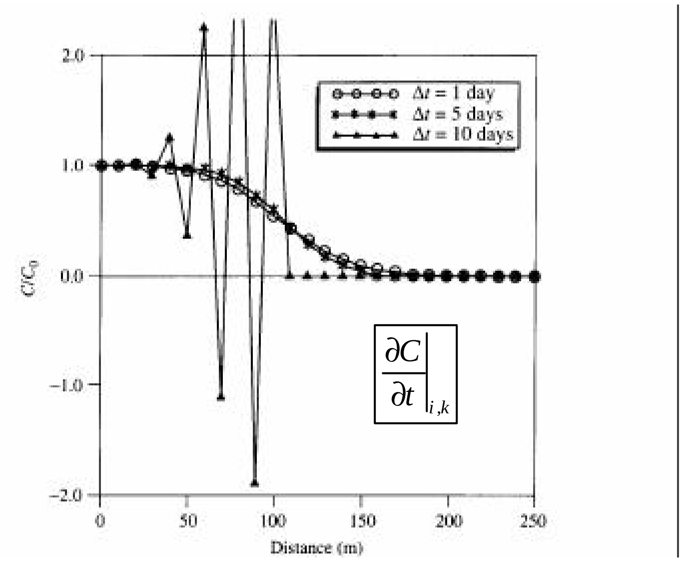
$$\boxed{\left.\frac{\partial C}{\partial t}\right|_{i,k} \cong \frac{C_i^{k+1} - C_i^{k}}{\Delta t}}$$

DIFERENCIAS FINITAS

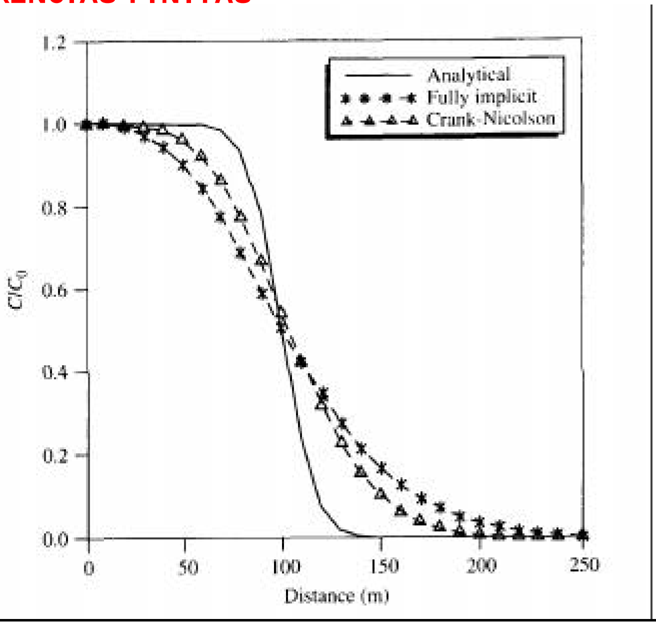


$$\boxed{\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{i,k}}$$

DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS

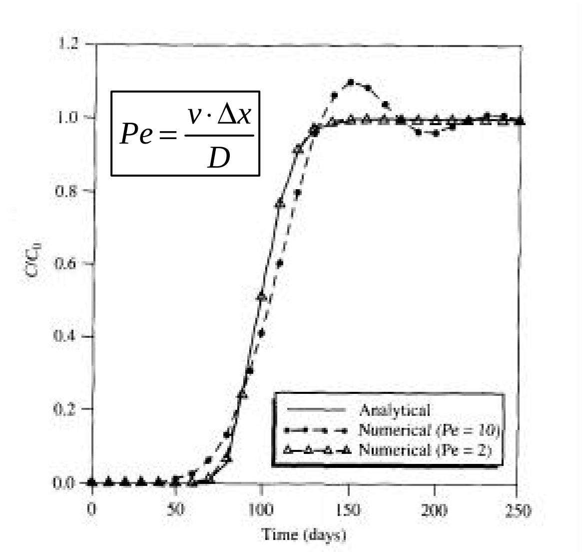
Dispersión numérica es significativa para problemas de advección dominante y/o problemas con frentes de concentración.

$$\boxed{Pe = \frac{v \cdot \Delta x}{D}}$$

Graves problemas de oscilaciones e inestabilidades de la solución numérica si Peclet es superior a 10.

Problema se reduce disminuyendo el tamaño de la grilla o incorporando términos correctivos.

DIFERENCIAS FINITAS



INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

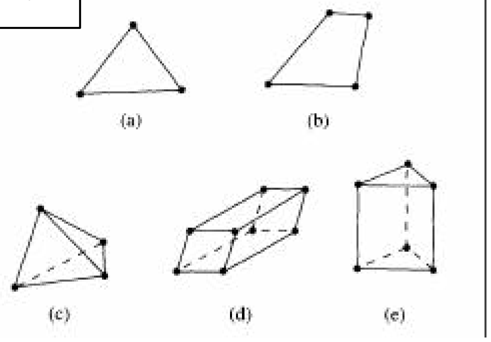
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- GENERAL
- EULERIANO – ELEMENTOS FINITOS
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

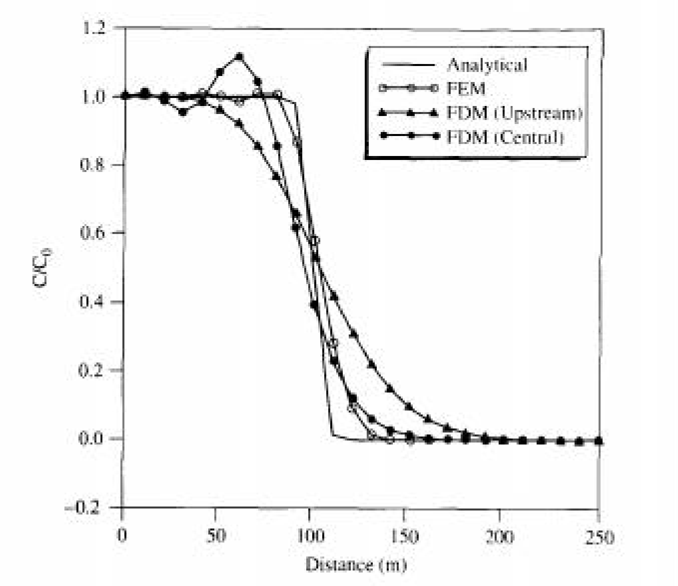
ELEMENTOS FINITOS

Utiliza conceptos variacionales para desarrollar un problema algebraico en el cual la solución numérica que se obtiene es la que minimiza el error asociado a una función de aproximación definida.

$$\boxed{\hat{C}(x,t)=\sum_{j=1}^{NODOS} C_j(t)\cdot N_j(x)}$$



ELEMENTOS FINITOS



INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
- GENERAL
- EULERIANO
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

RANDOM WALK

Utiliza conceptos de estadística para analizar transporte de contaminantes conservativos y no conservativos (lineales).

Partículas representan el contaminante. Cada partícula posee una fracción de la masa total inyectada en el acuífero.

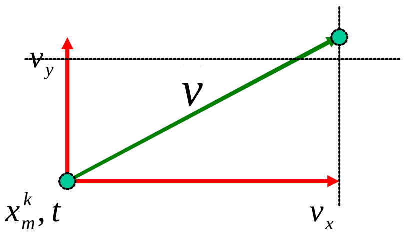
Se separa transporte en una componente advectiva (deterministica) y una componente dispersiva (aleatoria). Método Lagrangiano.

No presenta problemas de estabilidad; si presenta problemas de aproximación de la solución numérica, la que depende del número de partículas utilizadas en la modelación.

RANDOM WALK

Separa las componentes advectiva y dispersiva de la ecuación de transporte.

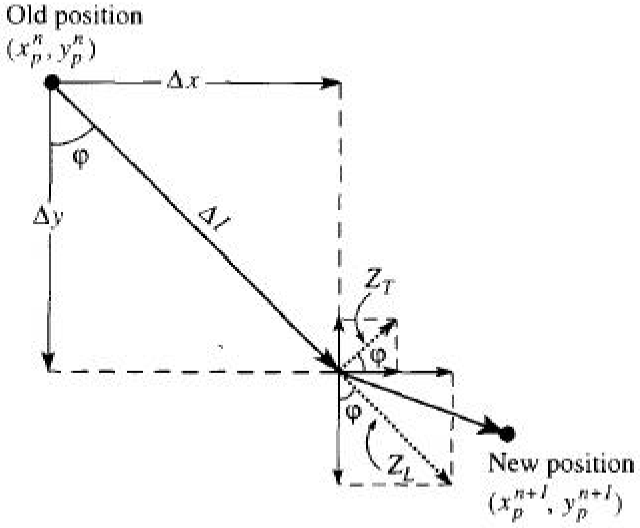
$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$



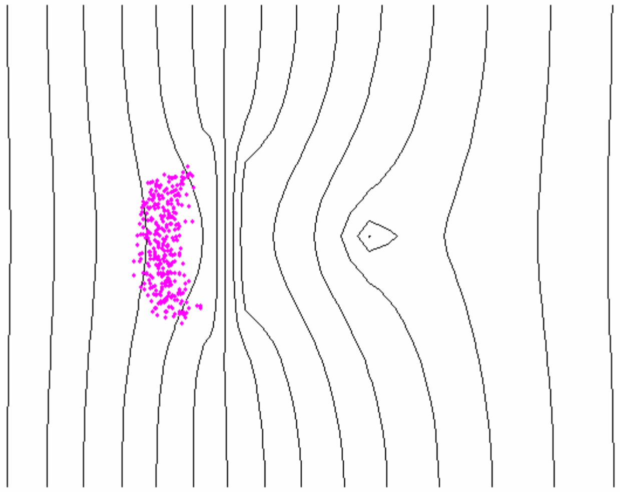
ESQUEMA LAGRANGIANO

$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t + \sqrt{2 \cdot D_x \cdot t} \cdot z$$

RANDOM WALK



RANDOM WALK



INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

- GENERAL
- EULERIANO
- LAGRANGIANO
- EULERIANO - LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

Separa las componentes advectiva y dispersiva de la ecuación de transporte.

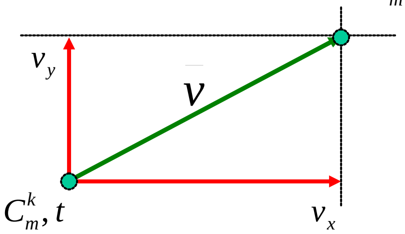
- –METODO DE LAS CARACTERISTICAS (MOC)
- –METODO DE LAS CARACTERISTICAS MODIFICADO (MMOC)
- –METODO HIBRIDO DE LAS CARACTERISTICAS (HMOC)

MOC/MMOC/HMOC

Separa las componentes advectiva y dispersiva de la ecuación de transporte.

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

$$C_m^{k*}, t+\Delta t \rightarrow C_m^{k+1}, t+\Delta t$$



ESQUEMA EULERIANO LAGRANGIANO

MOC/MMOC/HMOC

Separa las componentes advectiva y dispersiva de la ecuación de transporte.

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

$$C_m^{k+1} = C_m^{k*} + \Delta t \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right\}$$

Métodos se diferencian en como evalúan el término:

$$C_m^{k*}, t+\Delta t$$