

TUTORIAL 3
Visual MODFLOW y MT3D
MODELO DE FLUJO Y TRANSPORTE UTILIZANDO EL MÓDULO MT3D

MT3D es un modelo para simular advección, dispersión y reacciones químicas de contaminantes en sistemas de flujo en 3D. Este modelo fue diseñado para usarse en conjunto con un modelo de flujo de diferencias finitas en una malla centrada como MODFLOW. MT3D resuelve la ecuación de advección – dispersión basado sobre una combinación del método de las características (MOC) y el método de las características modificado (MMOC).

En este trabajo se desea resolver un problema de transporte de contaminante, simulando el efecto de una fuente de descarga continua de un compuesto conservativo, como podría ser el caso de un relleno sanitario en malas condiciones de mantención que percola lixiviados hacia el acuífero adyacente”.

En este trabajo se estudia un acuífero de 2050 x 1050 m² de superficie. El acuífero tiene una conductividad (K) de 20 m/día, un espesor saturado inicial (b) de 50 m, velocidad promedio lineal (v_x) de 0,5 m/día, porosidad total (n) de 0,2 y un gradiente hidráulico (i_H) de 0,5%. Este gradiente hidráulico puede ser simulado con dos condiciones de nivel constante (50 m en el lado izquierdo y 40 m en el lado derecho). El almacenamiento específico (S_y) es de 0,15.

El relleno está descargando al acuífero una concentración de 500 mg/L. Otro dato importante es que se supone un acuífero inicialmente sin contaminación y la pluma se desplazará por efectos de advección y difusión. La dispersividad longitudinal se asume conocida ($\alpha_L = 10$ m), mientras que la relación de dispersividades Horiz/Long = 1. Esta última relación da una medida del ancho de la pluma, mientras mayor es esta relación, mayor es el ancho de la pluma. Se ubica un pozo de observación de calidad de agua subterránea 250 m aguas abajo de la descarga.

Por último, el modelo se discretiza en celdas de 50 x 50 m², dando un total de 41 x 21 celdas. El modelo de flujo es ejecutado en régimen permanente, mientras que el modelo de transporte varía temporalmente.

Objetivos:

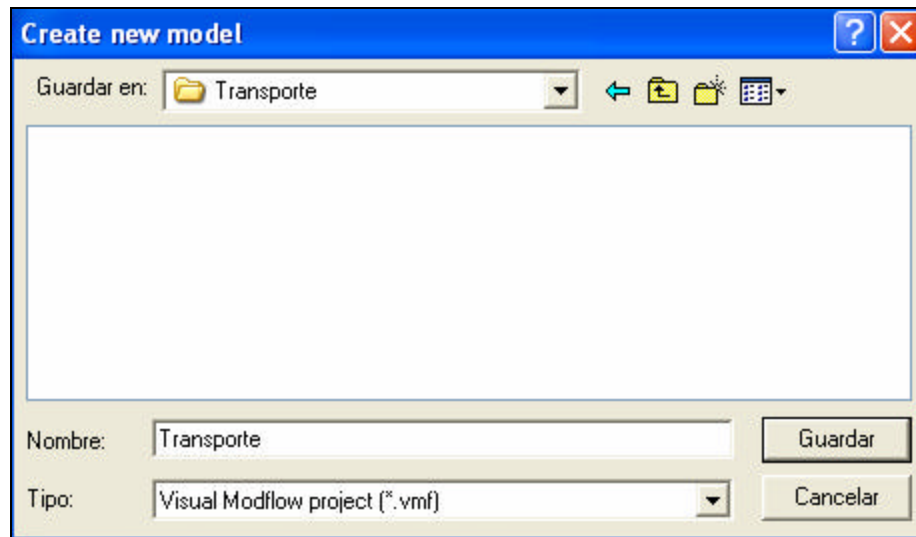
- Resolver un modelo combinado de flujo y transporte.
- Analizar el efecto sobre una pluma de contaminación en el acuífero para una fuente de descarga constante o instantánea, conservativa o no conservativa.
- Analizar el efecto de parámetros como la dispersión, porosidad, etc. Por otro lado analizar el efecto sobre la pluma contaminante, provocado por un pozo de extracción o por una barrera rocosa.

ETAPA 1: Crear el Modelo de Flujo

Paso 1: Ir al menú “File” y hacer click en “New”.

File Input Run Output Setup Help

Se despliega la ventana “Create new model”. En ella se nombra el archivo Transporte, que automáticamente toma la extensión .vmf.



Paso 2: Hacer click en el botón “Guardar”.

Paso 3: Posteriormente aparece una ventana que permite definir el dominio del acuífero, la discretización horizontal y vertical. Además se definen las unidades a usar en el modelo de simulación.

En la sección “Model Domain” se define el dominio del modelo. En este trabajo se define un acuífero cuadrado de 2050 x 1050 m². Ingrese los parámetros que pide este ítem:

- Columns [41], Xmin [0 m], Xmax [2050 m].
- Rows [21], Ymin [0 m], Ymax [1050 m].
- Layers [1], Zmin [0 m], Zmax [50 m].

En la sección "Units" se ingresan las unidades en que se desea trabajar. Para este caso ingrese:

Length → meters

Time → days

Conductivity → m/day

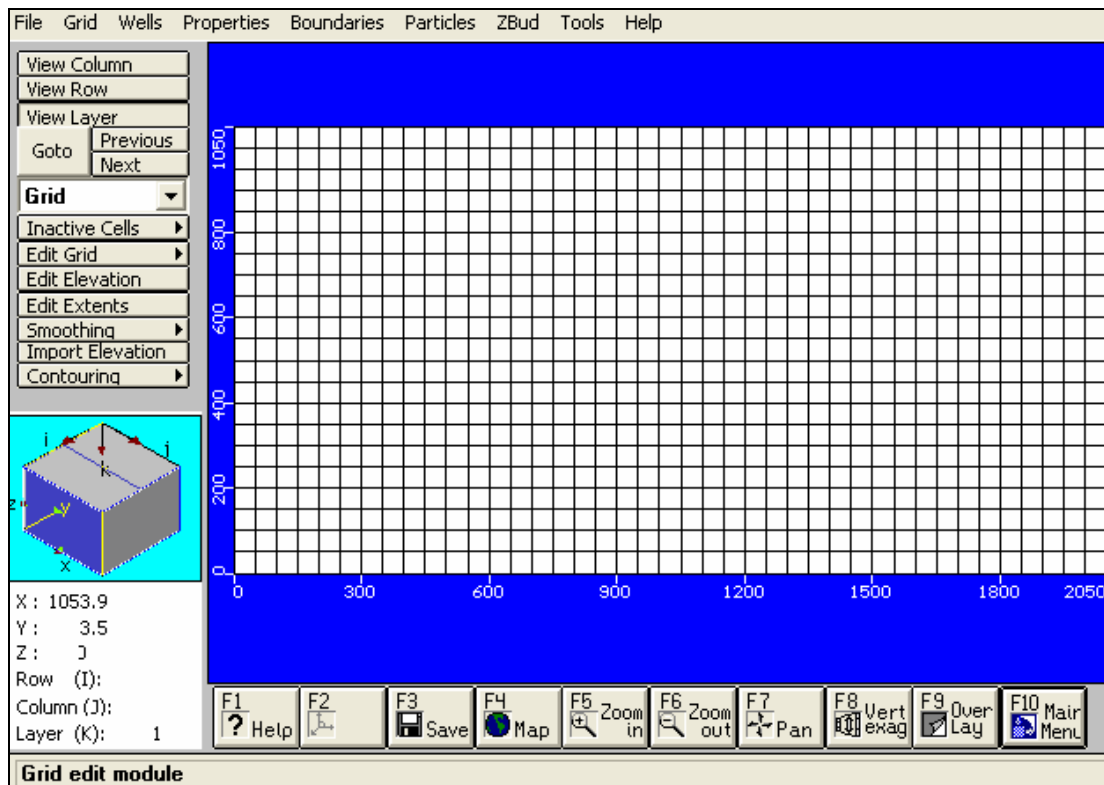
Pumping Rate → m³/day

Recharge → mm/year

Concentration → mg/L

Paso 4: Hacer Click en "Create".

Entonces se despliega en la ventana principal el acuífero a estudiar con la grilla que se definió en el paso 3.



ETAPA 2: Definir Atributos del Acuífero

Paso 5: Ir al menú y hacer Click en “Properties” y seleccionar “Conductivity”

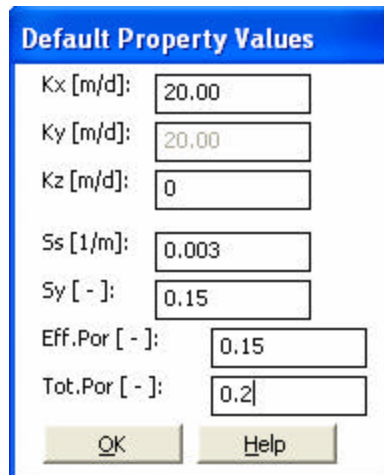
File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Aparece una ventana que pregunta si se desea guardar las propiedades existentes: “Save property data before existing?”

Paso 6: Hacer Click en el botón “Ok”.

Se despliega una nueva ventana con las propiedades hidrogeológicas del acuífero. “Default Property Values”. En esta se deben ingresar los siguientes valores:

Kx [m/d] → 20
Ky [m/d] → 20
Kz [m/d] → 0
Ss [1/m] → 0.003
Sy [-] → 0.15
Eff. Por. [-] → 0.15
Tot. Por. [-] → 0.2



Default Property Values	
Kx [m/d]:	20.00
Ky [m/d]:	20.00
Kz [m/d]:	0
Ss [1/m]:	0.003
Sy [-]:	0.15
Eff.Por [-]:	0.15
Tot.Por [-]:	0.2
OK Help	

Paso 7: Hacer Click en el botón “Ok”.

ETAPA 3: Definir Condiciones de Borde de Nivel Constante

Para definir el flujo natural en el acuífero, se deben imponer dos condiciones de borde de nivel constante con diferencia de niveles. Para ello se realiza el siguiente procedimiento.

Paso 8: Ir al menú y hacer Click en el botón “Boundaries” y seleccionar la condición “Constant Head”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 9: Hacer Click en el botón “Ok” en la ventana “Save property data before existing?”

Paso 10: Ir a “Assign” y seleccionar “Line”. Ahora con el botón izquierdo del mouse se selecciona el punto de inicio de la condición de borde de nivel constante (Start Pt.) y se arrastra hasta el punto donde termina la condición de borde (End Pt.). Una vez encontrado el punto de término se hace click con el botón derecho del mouse y se despliega la ventana “Assign Constant Head”.

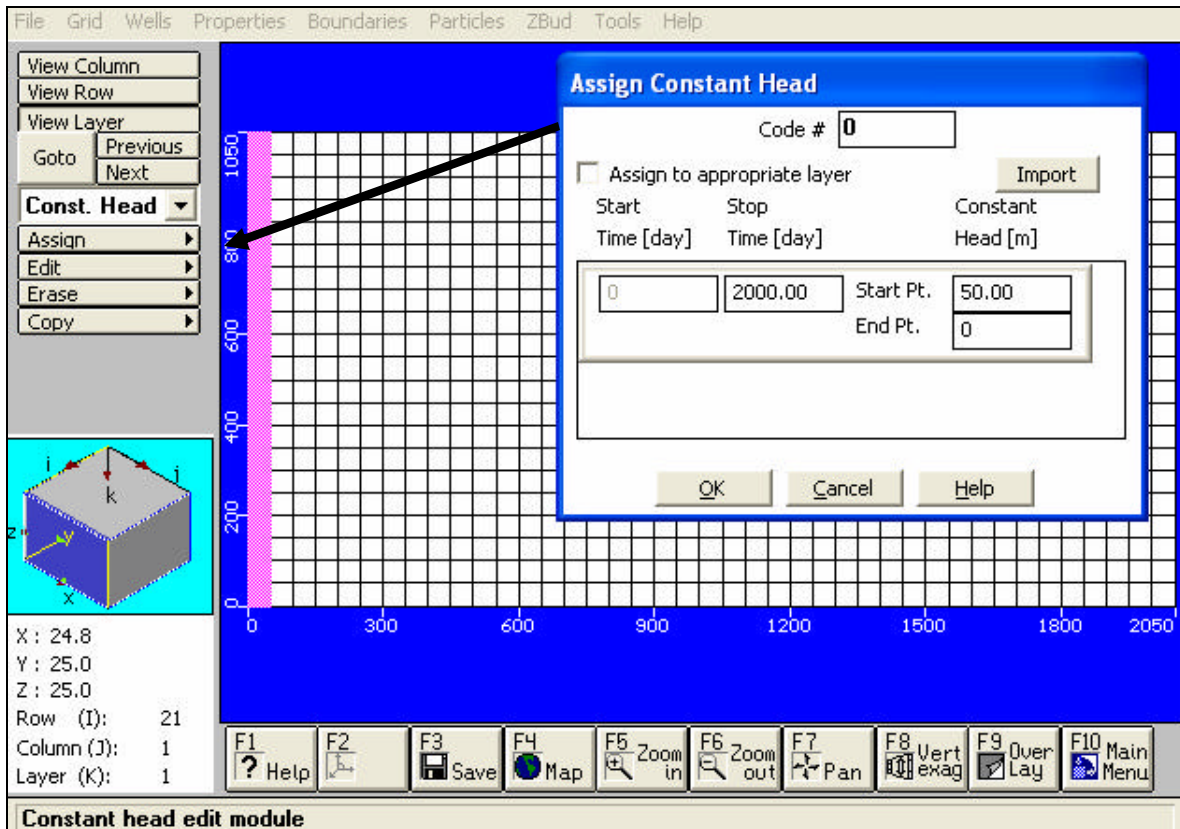
El tiempo de partida (Start Time) el modelo asume arbitrariamente 0 días.

Stop Time [day] → 2000

Start Pt. [m] → 50

End Pt [m] → 50

Paso 11: Hacer Click en el botón “Ok”.



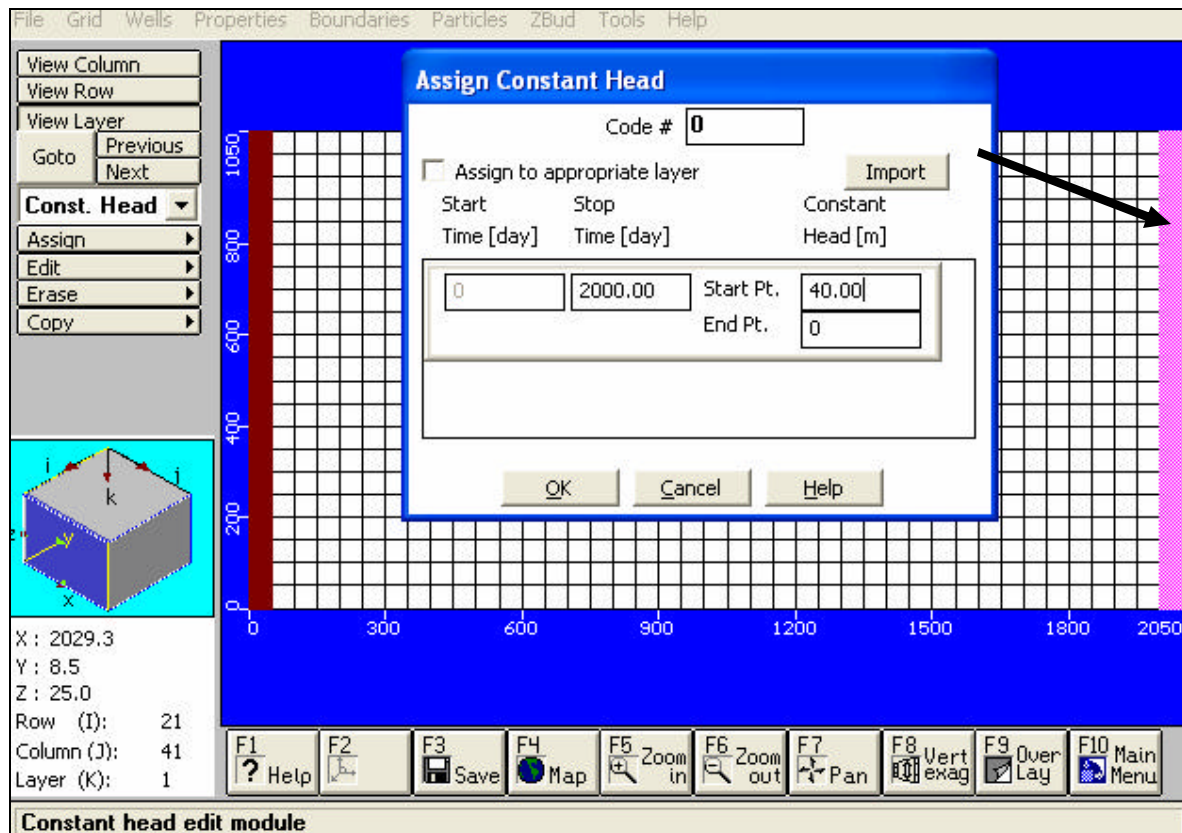
Paso 12: Repetir nuevamente el paso 10 para insertar la otra condición de borde, en el otro extremo del modelo.

Stop Time [day] → 2000

Start Pt. [m] → 40

End Pt [m] → 40

Paso 13: Hacer Click en el botón “Ok”.



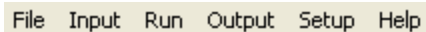
Paso 14: Volver al menú principal para resolver el problema numéricamente.



ETAPA 4: Crear Modelo de Transporte (Descarga Continua de un Contaminante Conservativo)

Para una descarga continua de contaminante en un punto específico dentro del modelo se deben seguir los siguientes pasos.

Paso 15: Ir al menú "File" y hacer click en "Setup" y seleccionar "Numeric Engines".



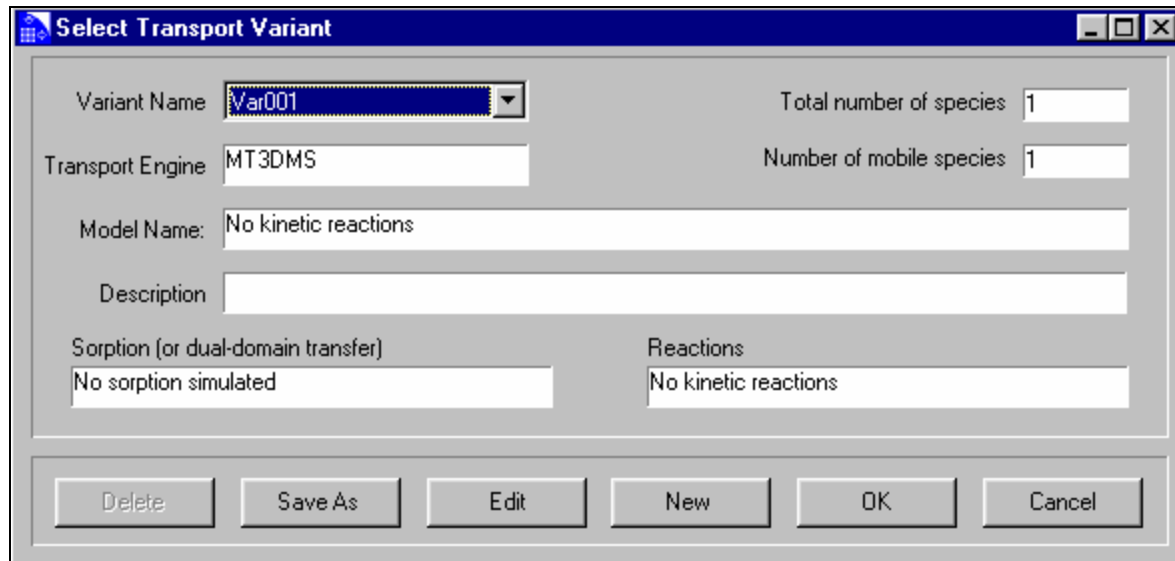
Se despliega la ventana "Select transport Variant". En ella se selecciona el modelo de transporte MT3D para un compuesto conservativo.

Variant Name → Var001

Transport Engine → MT3DMS

Sorption → No sorption simulated

Reactions → No kinetic reactions



Paso 16: Hacer Click en el botón “Ok”.

Paso 17: Ir al menú y seleccionar la opción “Input”.

File Input Run Output Setup Help

Se despliega en la ventana un nuevo menú de trabajo.

Paso 18: Ir al menú y hacer Click en el botón “Boundaries” y seleccionar la condición “Constant Concentration”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 19: Hacer Click en el botón “Ok” en la ventana “Save property data before existing?”

Para ingresar las condiciones iniciales del modelo de transporte, se deben seguir los siguientes pasos.

Paso 20: Ir al menú y hacer Click en el botón “Properties” y seleccionar la condición “Initial Concentration”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 21: Hacer clic en la opción “Database”

Se despliega la ventana “Conc001 Initial Concentration”

Paso 22: Ingresar el valor de 0 [mg/L] en la zona blanca.

Concentration [mg/L]	
1	1

Paso 23: Hacer Click en el botón “Ok”.

Para ingresar los parámetros de dispersión se debe seguir los siguientes pasos:

Paso 24: Ir al menú y hacer Click en el botón “Properties” y seleccionar la condición “Dispersion”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 25: Hacer clic en la opción “Database”

Se despliega la ventana “Longitud. Dispersivity Database”

Paso 26: Ingresar el valor de 10 [m] en la zona blanca.

Paso 27: Hacer Click en el botón “Ok”.

L.Dispersivity [m]	
1	10.00

Paso 28: Hacer click en la opción “Layer Options”

Se despliega la ventana “Dispersion Package” e ingresar los siguientes valores.

Horiz/Long [] → 1

Horiz/Vert [] → 0

Diff Coeff [m²/day] → 0

Layer #	Horiz/Long [-]	Horiz/Vert [-]	Diff Coeff [m ² /day]
1	1	0	0

Paso 29: Hacer Click en el botón “Ok”.

Para agregar la descarga continua en una celda se debe ir a la opción “Assign” y seleccionar la opción “Single”

Se despliega la ventana “Assign Constant Concentration”.

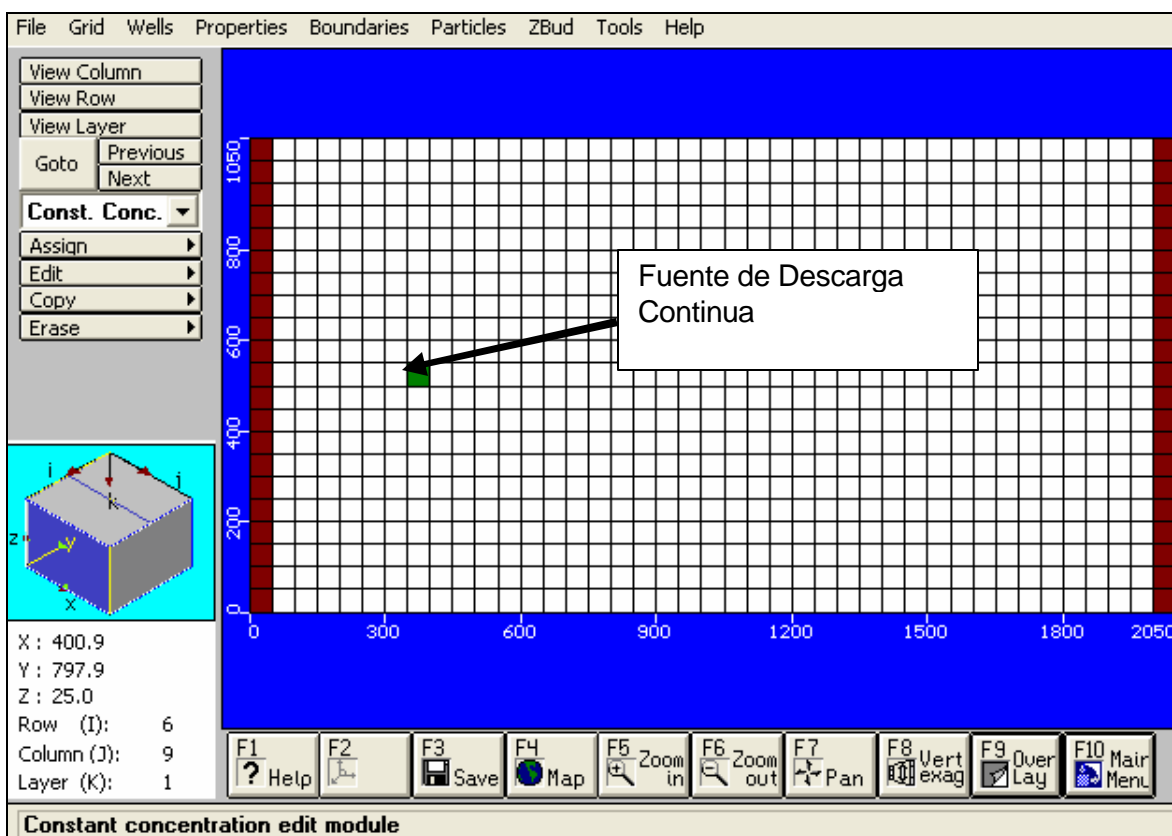
Start Time [day]	Stop Time [day]	Concentration [mg/L]
0	100	500
100	200	500
200	300	500
300	400	500
400	500	500
500	600	500
600	700	500
700	800	500
800	900	500
900	1000	500
1000	1100	500

En ella se deben ingresar los siguientes valores de concentración en mg/L:

Start [days]	End [days]	Conc001 [mg/L]
0	100	500
100	200	500
200	300	500
300	400	500
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
1800	1900	500
1900	2000	500

Paso 30: Hacer Click en el botón “Ok”.

Queda ingresada la fuente de descarga continua para un compuesto conservativo.



ETAPA 5: Insertar un Pozo de Observación de Calidad

Para insertar el pozo de observación que se ubica a 250 m del punto de la descarga se deben seguir los siguientes pasos.

Paso 31: Ir al menú y hacer Click en el botón “Wells” y seleccionar la condición “Conc. Observation Wells”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 32: Hacer Click en el botón “Ok” en la ventana “Save property data before existing?”

Para agregar el pozo se debe ir a la opción “Add Obs.” y luego hacer click en la posición en que se ubica el pozo. En la pantalla se despliega la ventana “New Well”. En ella se agregan las características del pozo, tales como su nombre, las coordenadas, etc.

New Well

Well Name: observacion X= 625 (m) Y= 525 (m) Z= 25.08 (m)
Species Name: Conc001

Observation Points

Observation Point	Elevation (m)
Point #1	25

Observations

Time (days)	Conc001 (mg/L)
1000	100

Display as:
☒ Elevation
☐ Depth To

OK Cancel

Well Name → observacion

X [m] → 625

Y [m] → 525

En la sección “Elevation Points” se debe poner:

Elevation [m] → 25

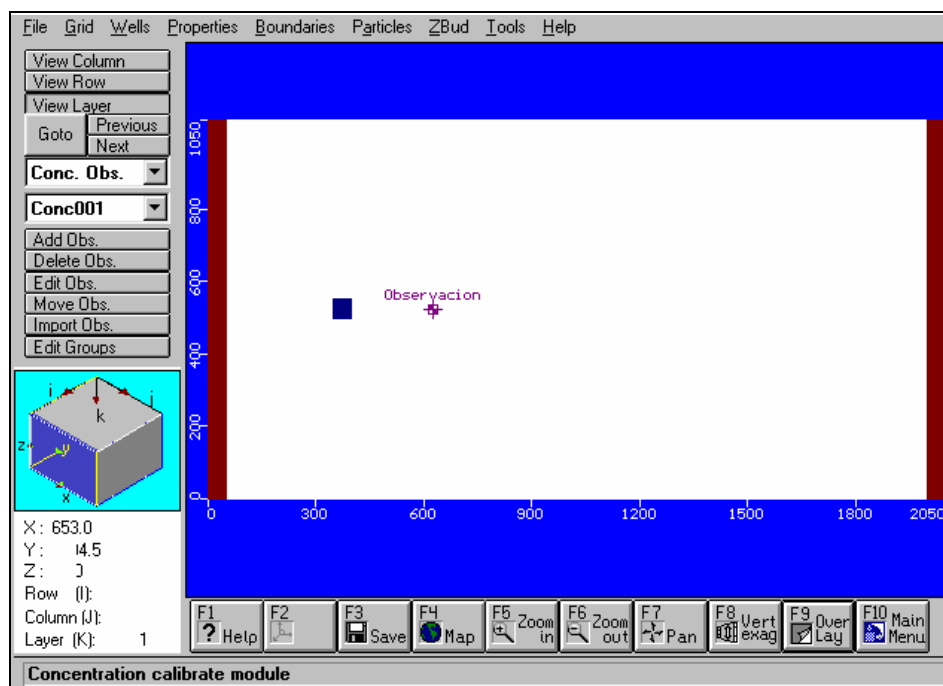
En la sección “Observation” se debe poner:

Time [days] → 1000

Conc001 [mg/L] → 100

Paso 33: Hacer Click en el botón “Ok”.

Queda definido el pozo de observación a una distancia de 250 m de la fuente de descarga constante.



Paso 34: Volver al menú principal para resolver el problema numéricamente.



ETAPA 6: Resolución del Modelo Numérico

Paso 35: Ir al menú principal y seleccionar la opción “Run”.

File Input Run Output Setup Help

Se despliega la ventana “Select Run Type”.

Paso 36: Seleccionar la opción “Steady State”.



Paso 37: Hacer Click en el botón “Ok”.

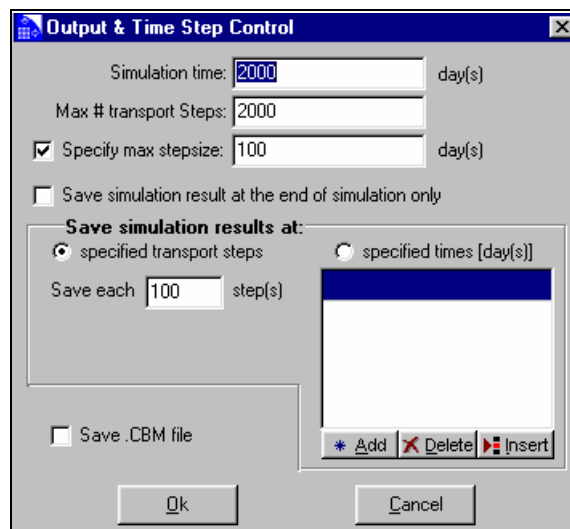
Aparece una nueva pantalla, en que se definen las condiciones de ejecución del programa.

File MODFLOW MODPATH MT3DMS PEST Run Help

Paso 38: Ir al menú “MT3DMS” y seleccionar la opción “Ouput/Time steps”.

Aparece la ventana “Ouput & Time Step Control” e ingresar los siguientes valores:

Simulation time → 2000 - Max # transport Steps → 2000 - Specify max stepsize → 100



Paso 39: Hacer Click en el botón “Ok”.

Paso 40: Ir al menú, seleccionar “Run”. Se despliega la ventana “Translate/Run”.

Paso 41: Seleccionar las opciones “MODFLOW” y “MT3D/RT3D”. La primera opción permite ejecutar el modelo de flujo y la segunda opción ejecuta el modelo de transporte.



Paso 42: Hacer Click en el botón “Translate Run”, para que el programa comience la ejecución.

Una vez que el modelo termina de ejecutar.

Paso 43: Hacer Click en el botón “Exit”.

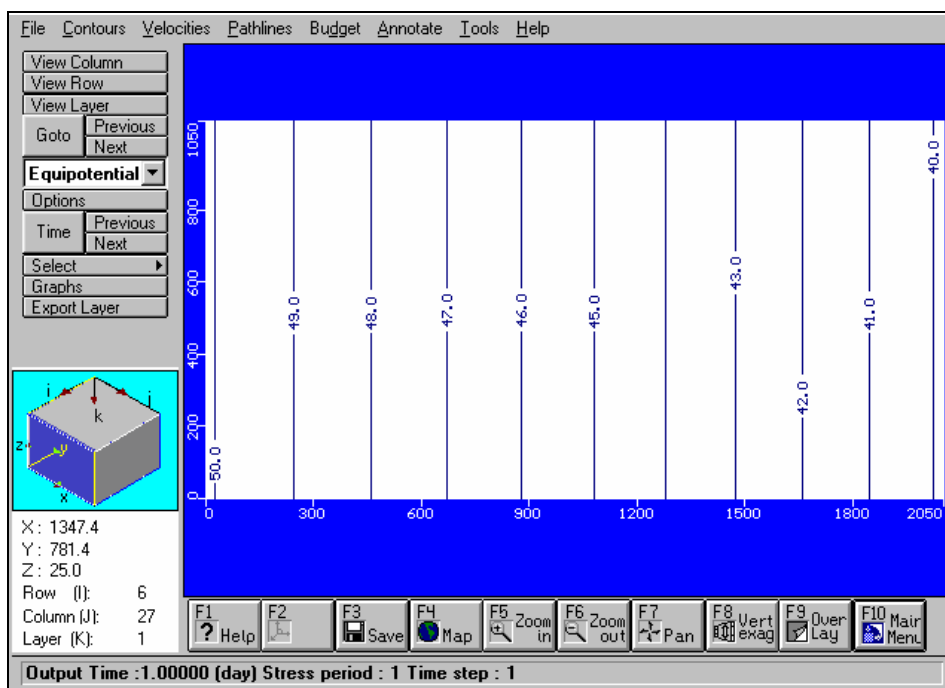
ETAPA 7: Obtener Resultados

En esta etapa se debe encontrar los resultados propuestos tales como los contornos piezométricos, descensos y otros. En este caso los resultados de interés corresponden a la parte de transporte del contaminante y se analizará el estado de avance de la pluma de contaminación.

Paso 44: Ir al menú principal y seleccionar la opción “Ouput”

File Input Run Output Setup Help

Se despliega la pantalla principal con información gráfica de los contornos piezométricos equipotenciales para régimen permanente.



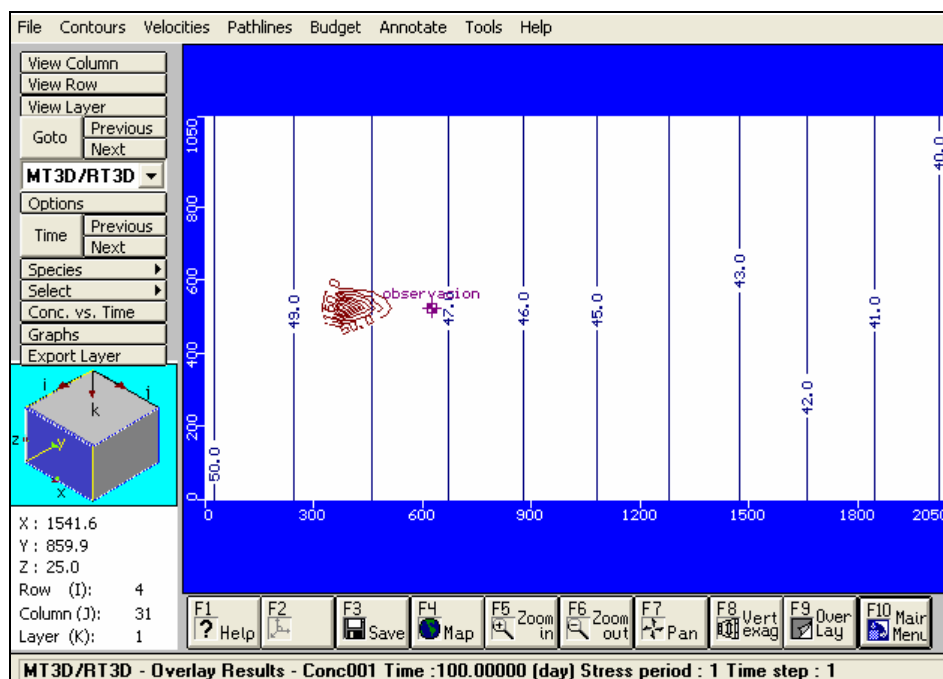
Paso 45: Ir al menú, seleccionar la opción “Contours” y hacer click en “Concentration”

File Contours Velocities Pathlines Budget Annotate Tools Help

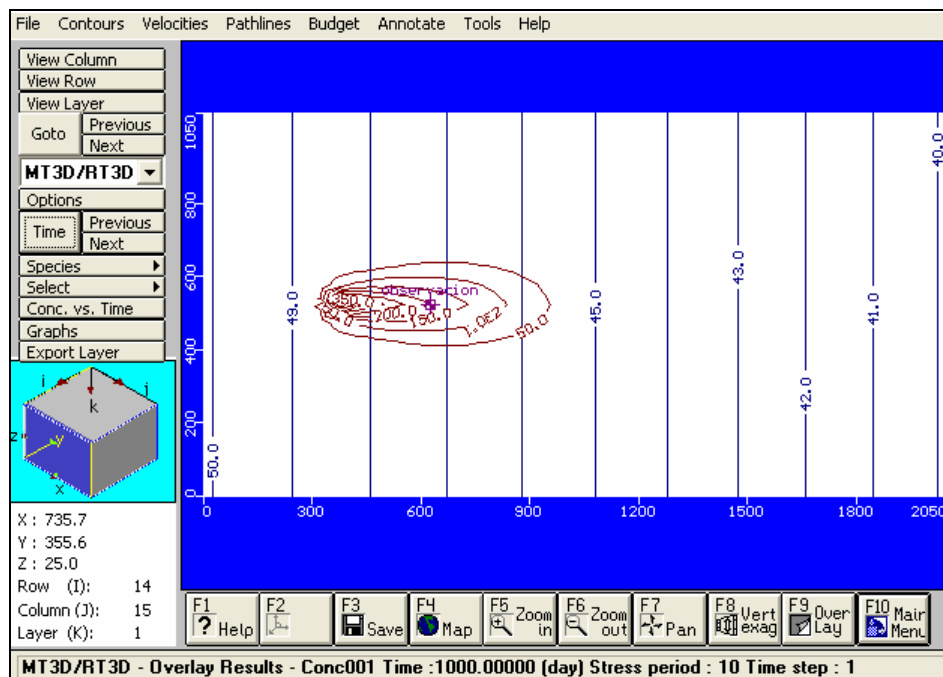
Se despliega en la ventana la pantalla con los contornos concentración de la pluma contaminante para una descarga continua de 500 mg/L.

Paso 46: Para ver los distintos estados de ubicación de la pluma se debe hacer click en el botón next (Time).

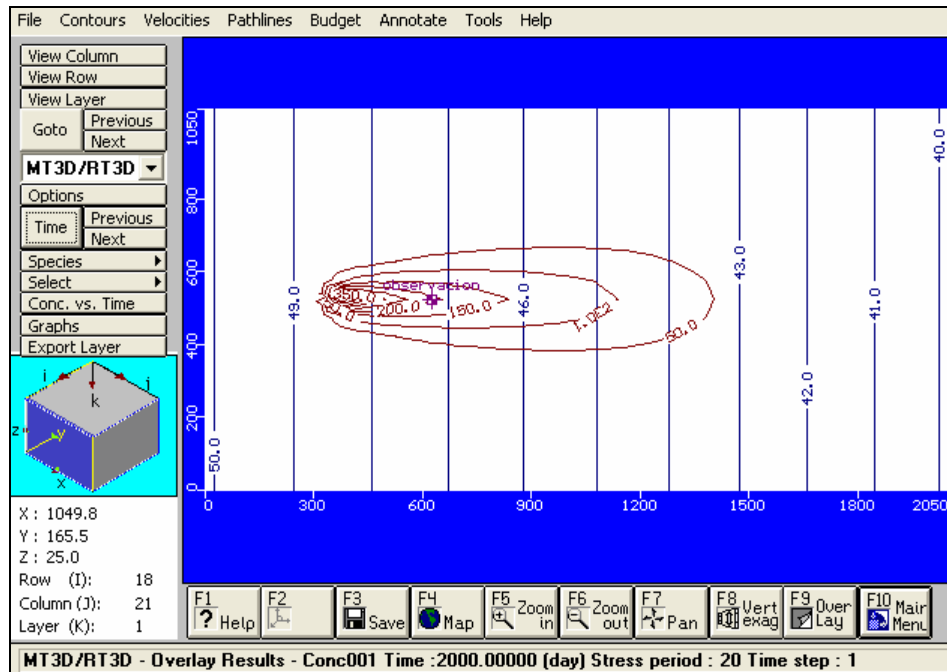
Avance de la pluma para un período de 100 días.



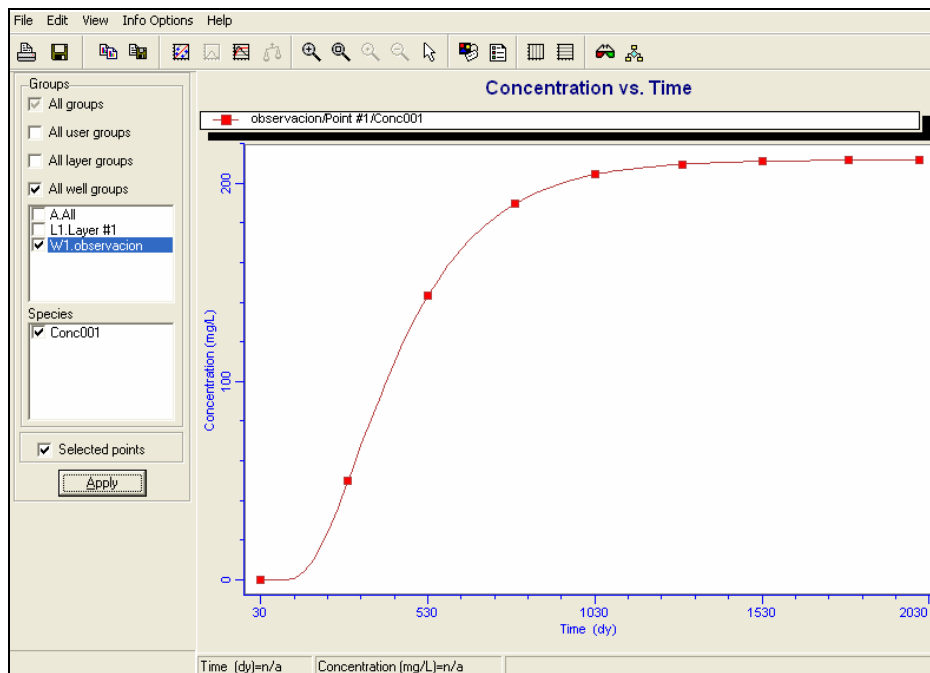
Avance de la pluma para un período de 1000 días.



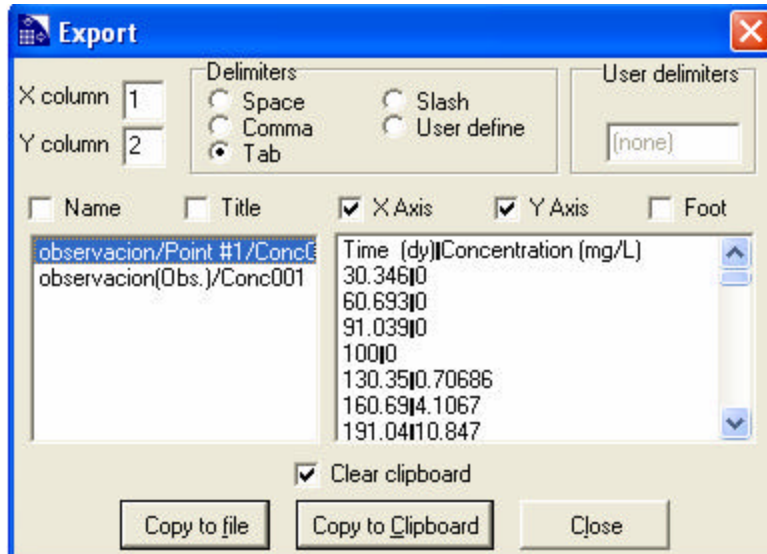
Avance de la pluma para un período de 2000 días.



Paso 47: Hacer click en el botón “Conc. Vs Time” y activar en la parte derecha la opción “W1.observacion” y “Conc001” en Species. Luego seleccionar Apply.



Paso 48: Para exportar los resultados en forma numérica, se debe hacer Click en el botón “Export Data” en la parte superior del gráfico.



Paso 49: Para obtener estos valores en archivo de extensión dat o txt, es necesario hacer click con el botón “Copy to File”. Para copiar información a planilla Excel se selecciona el botón “Copy to Clipboard”.

A continuación se plantean algunas preguntas que se deben resolver utilizando el modelo de flujo y transporte creado.

- ¿Cuál es el efecto de la porosidad total?
- ¿Cuál es el efecto variar la tasa de dispersividad Horiz/Long en el paso 28? Pruebe con valores de:

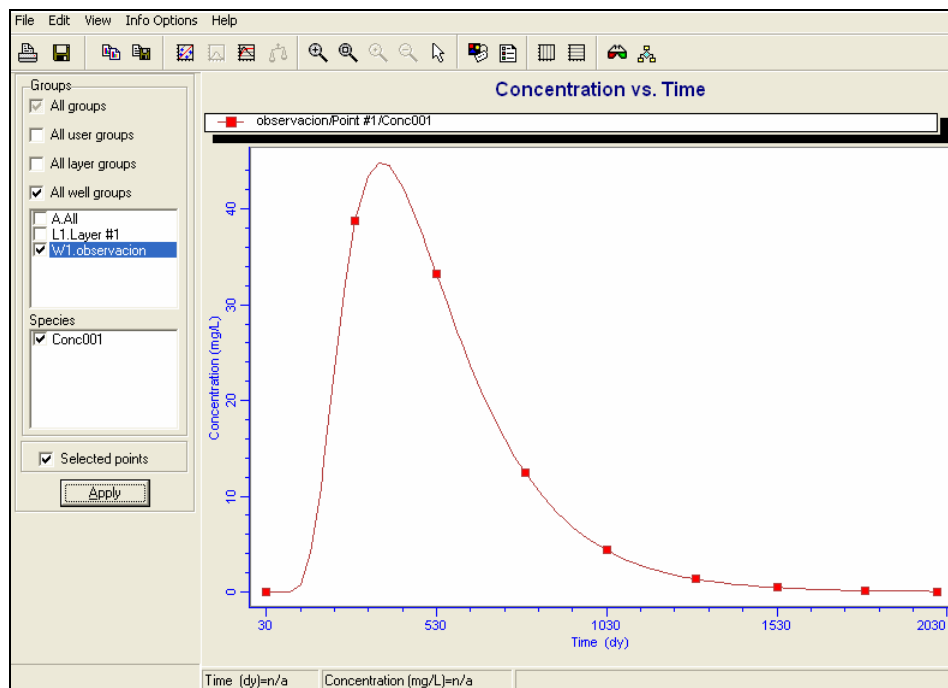
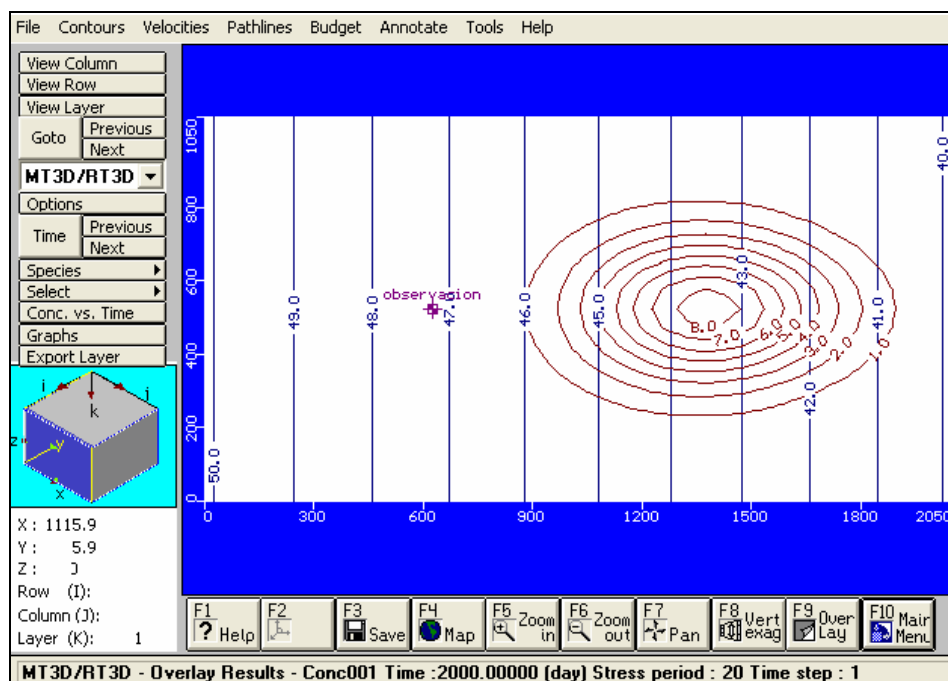
Horiz/Long → 0.01

Horiz/Long → 10

- ¿Cuál es el efecto de una fuente de descarga discontinua o instantánea, en el paso 29?

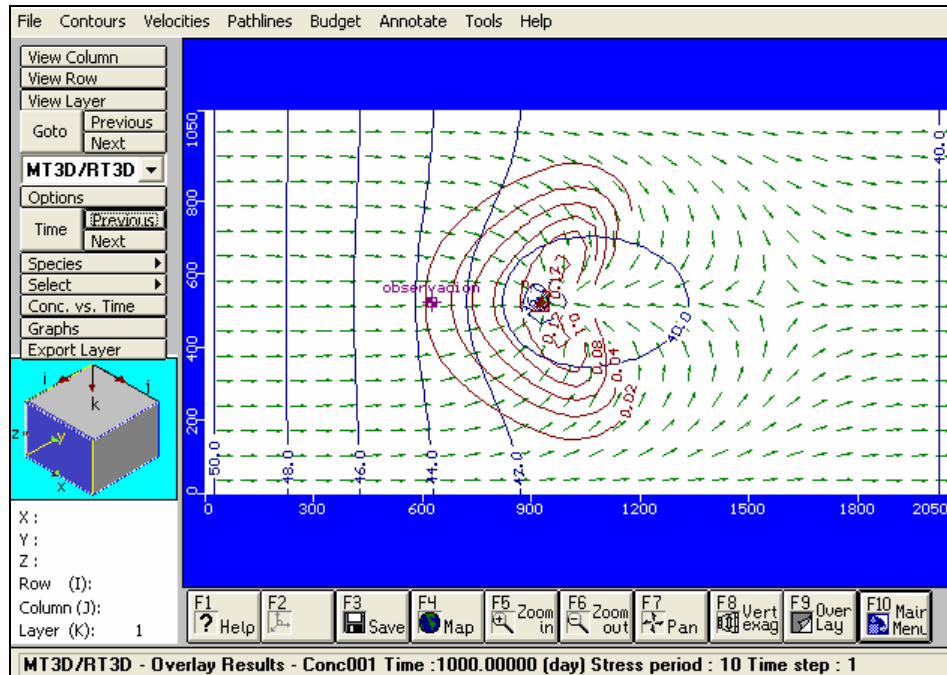
Start [days]	End [days]	Conc001 [mg/L]
0	100	500
100	200	0
200	300	0
300	400	0
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
1800	1900	0
1900	2000	0

Avance de la pluma para un período de 2000 días.

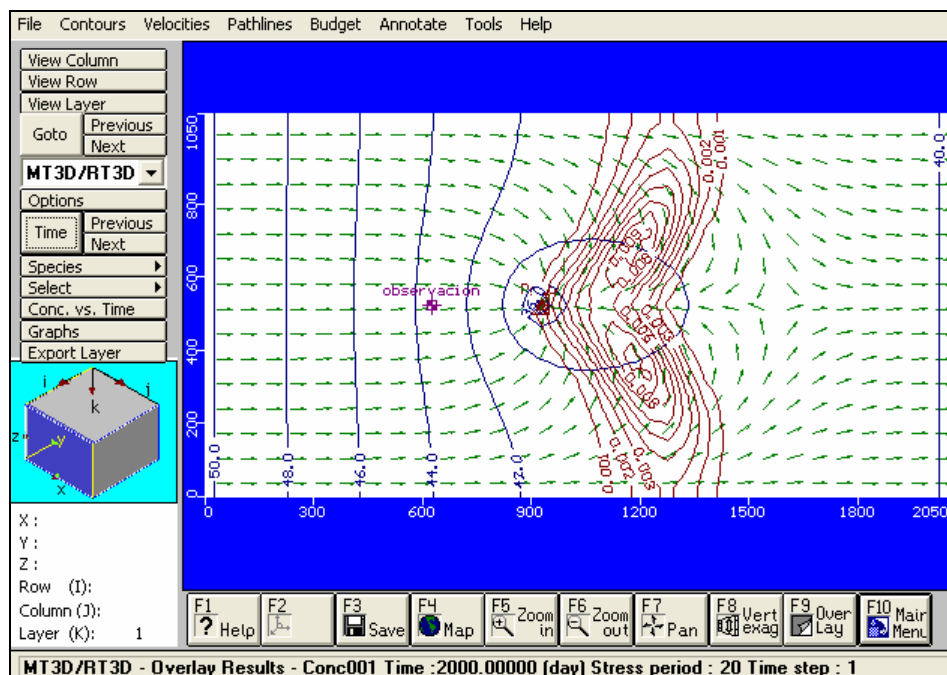


- ¿Qué pasa si se ubica un pozo de bombeo en el camino de la pluma, en la coordenada (925; 525) a una tasa de extracción de 10000 m³/día?

Avance de la pluma para un período de 1000 días.

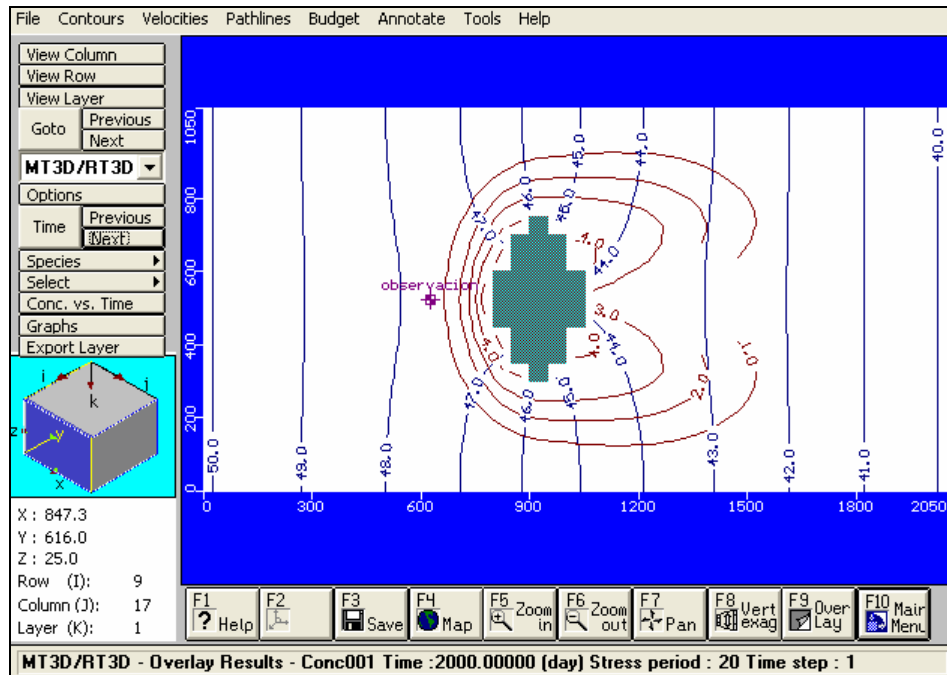


Avance de la pluma para un período de 2000 días.



- ¿Qué pasa si en lugar del pozo se ubica una zona rocosa?

Avance de la pluma para un período de 2000 días.



- Analice el efecto de una descarga continua de 500 mg/L de un compuesto no conservativo que decae a una tasa de primer orden de 0.005 1/día.

Para resolver el problema planteado realice los siguientes pasos

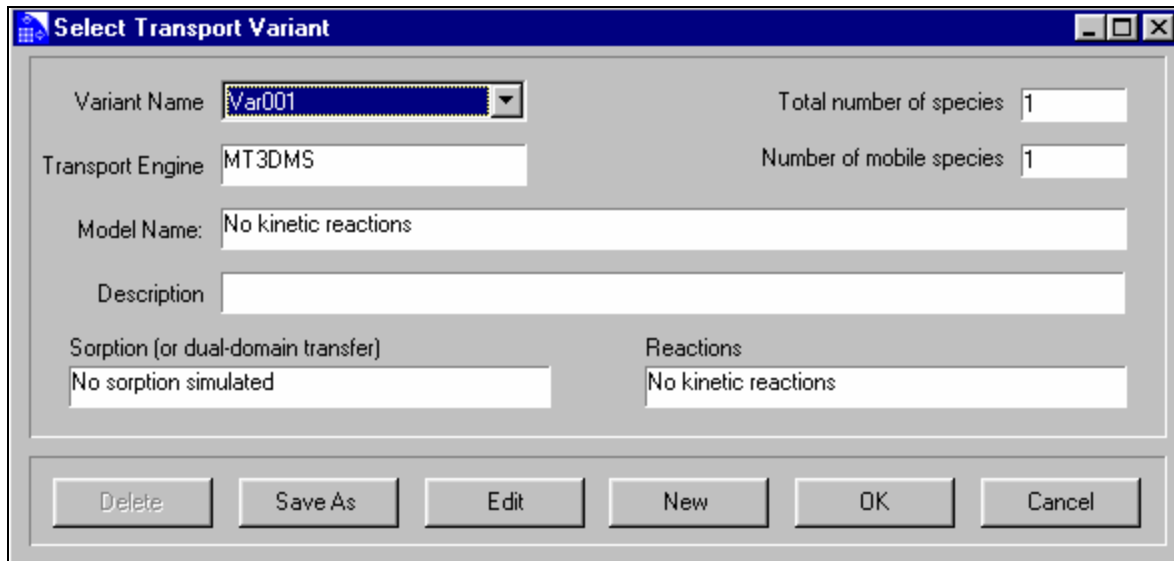
Paso 50: Ir al menú “File” y hacer click en “Setup” y seleccionar “Numeric Engines”.

File Input Run Output Setup Help

Se despliega la ventana “Select transport Variant”. En ella se selecciona el modelo de transporte MT3D.

Variant Name → Var001

Transport Engine → MT3DMS



Paso 51: Hacer Click en el botón “Edit”.

Se despliega una ventana con el nombre de “Warning”.

Paso 52: Hacer Click en el botón “Ok”.

Se despliega la ventana “Transport Engine Options”

Paso 53: Seleccionar las opciones:

Sorption → No sorption simulated

Reactions → First-order irreversible decay

Paso 54: En la sección inferior, seleccionar el menú “Species Params” e ingresar los siguientes valores:

SCONC (Concentración Inicial) [mg/L] → 0

RC1 K_mobile [1/day] → 0.005

RC2 K_sorbed [1/day] → 0

Transport Engine Options

Variant Name: Total number of species:

Transport Engine: Number of mobile species:

Model Name:

Description:

Sorption (or dual-domain transfer): Reactions:

Name	Designation	Parameter Description	Units	Conc001
SCONC	SCONC	Initial concentration	(mg/L)	0
RC1	K_mobile	First-order reaction rate for mobile species	1/day	0.005
RC2	K_sorbed	First-order reaction rate for sorbed species	1/day	0

Help Ok Cancel

Component 001

Paso 55: Hacer Click en el botón “Ok”.

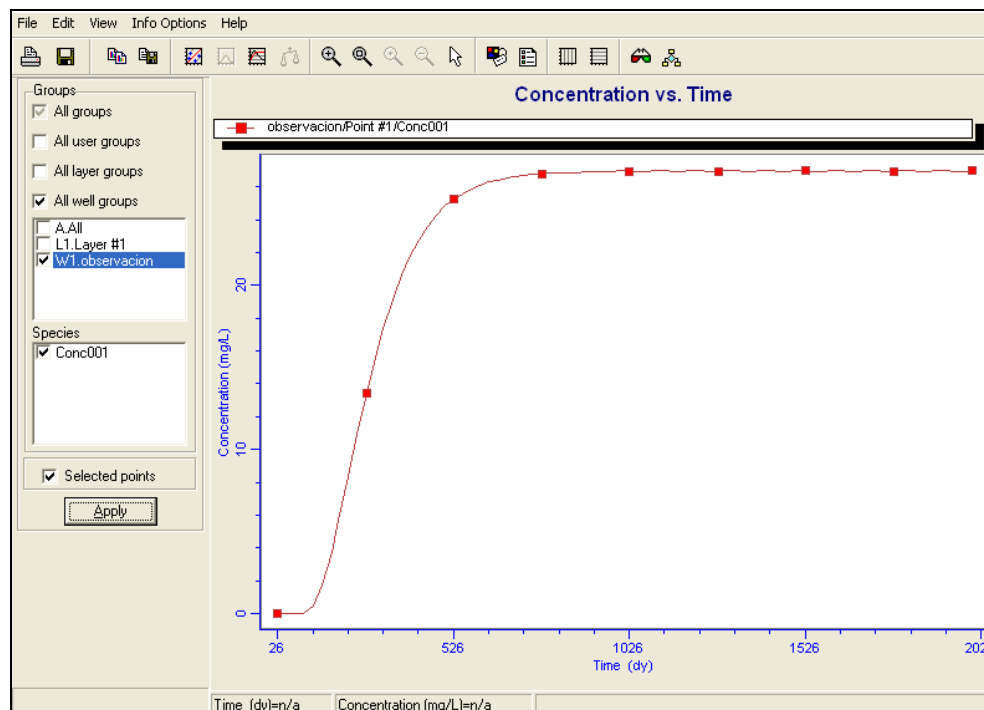
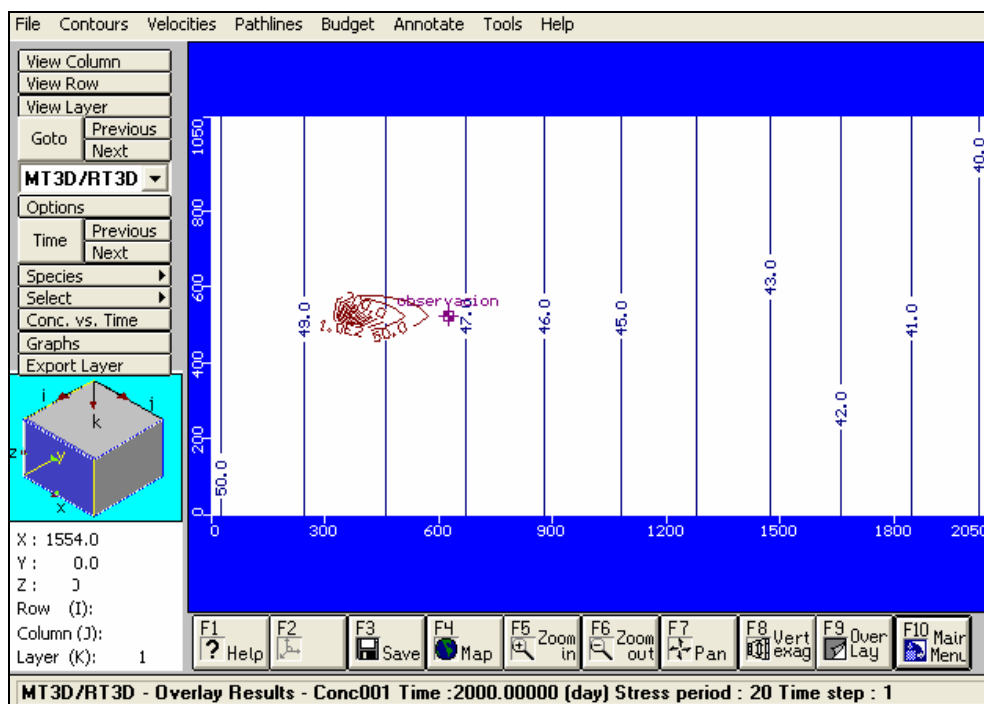
Se despliega la ventana “Replace Variant”

Paso 56: Seleccionar la opción “Re-initialize the transport Variant and save the new settings”.

Paso 57: Hacer Click en el botón “Ok”.

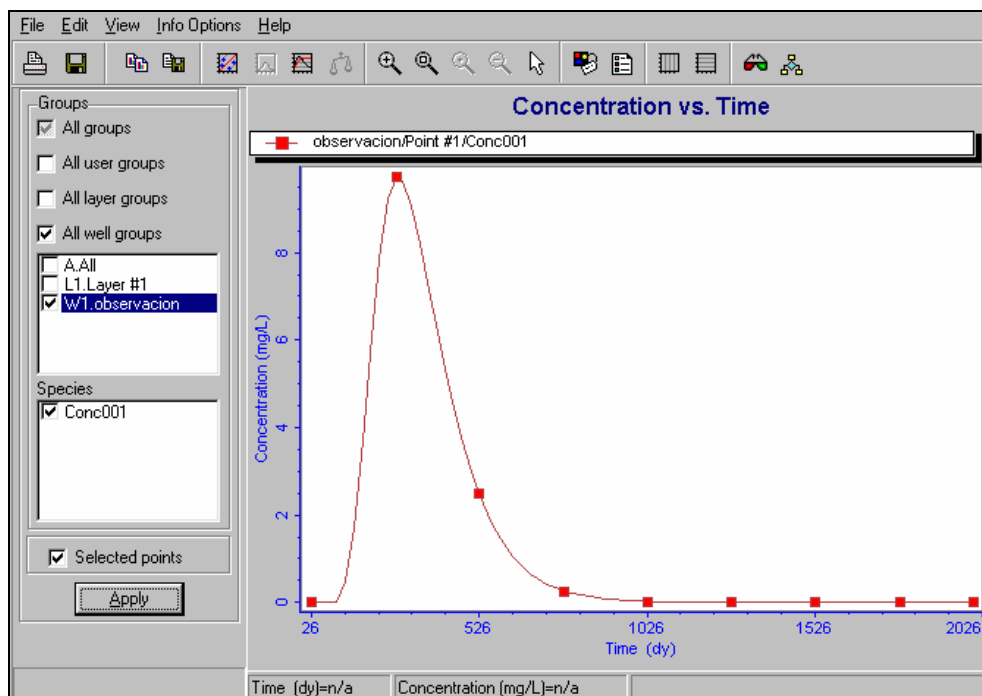
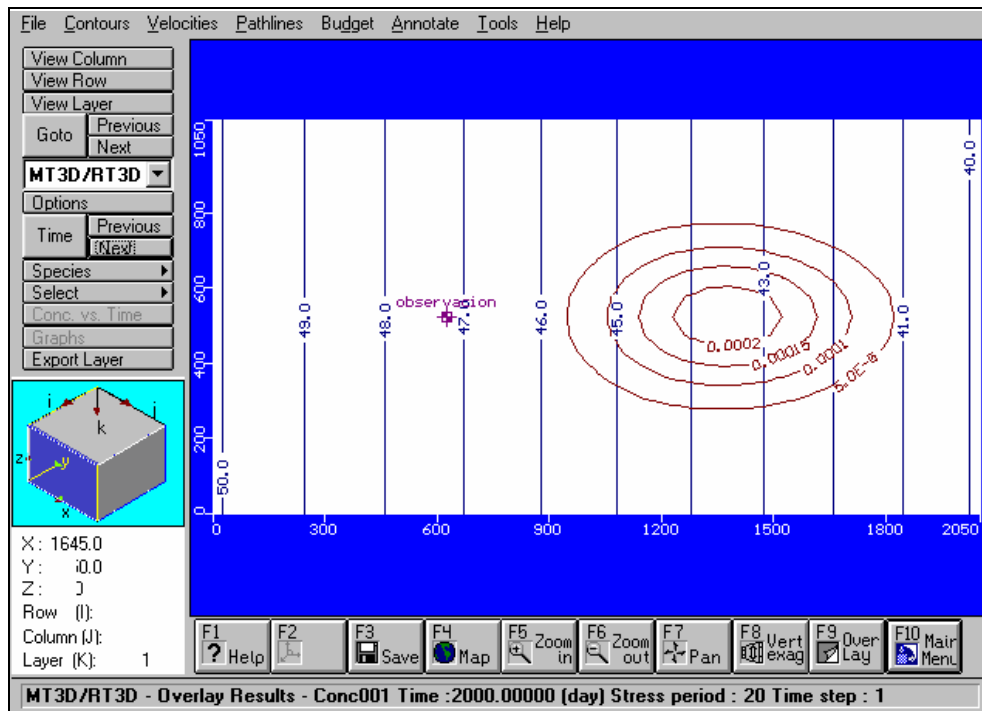
Paso 58: Repetir los pasos 17 a 49.

Avance de la pluma para un período de 2000 días.



- Analice el efecto de una descarga instantánea de 500 mg/L de un compuesto no conservativo que decae a una tasa de primer orden de 0.005 1/día.

Avance de la pluma para un período de 2000 días.



Si se desea estudiar el efecto de variar la tasa de decaimiento, se den realizar los siguientes pasos.

Paso 59: Ir al menú y hacer Click en el botón “Properties” y seleccionar la condición “Species Parameters”.

File Grid Wells Properties Boundaries Particles ZBud Tools Help

Paso 60: Seleccionar la opción “Database”.

Se despliega la ventana “Conc001 Parameters Database” y cambiar los valores deseados para K_mobile. Notar que si K_mobile es cero, entonces el contaminante se comporta como compuesto conservativo.

Property #	K_mobile [1/day]	K_sorbed [1/day]	Color
1	0.005	0	

Paso 61: Hacer Click en el botón “Ok”.