

**CI66J**

**CI66J/CI71T  
MODELACION DE AGUAS  
SUBTERRANEAS**

**MODELACION NUMERICA DEL TRANSPORTE DE  
CONTAMINANTES EN AGUAS SUBTERRANEAS**



**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 TÍPICA 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

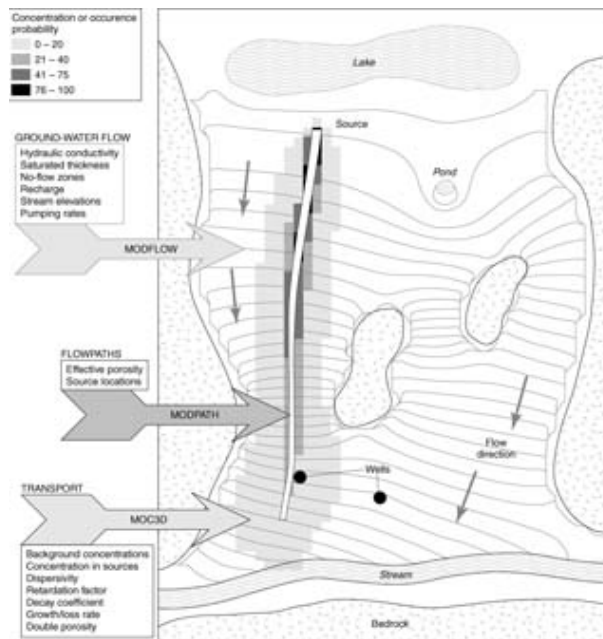
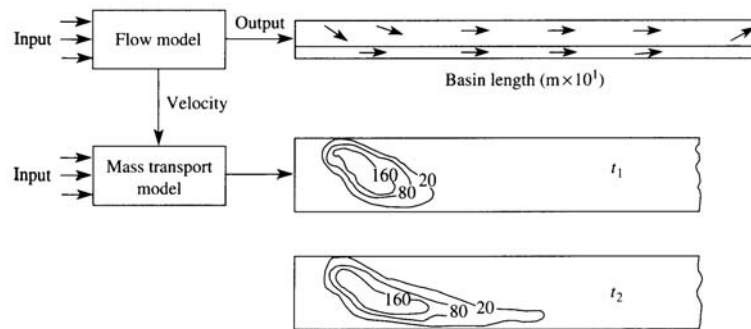
$$v = -\underline{K} \cdot \nabla h$$



RESOLVER  
PROBLEMA DE  
TRANSPORTE

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





## 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.

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

Condiciones de Borde.

$$C(0, t) = C_0 \quad t > 0$$

$$C(\infty, t) = 0 \quad t > 0$$

Condiciones Iniciales.

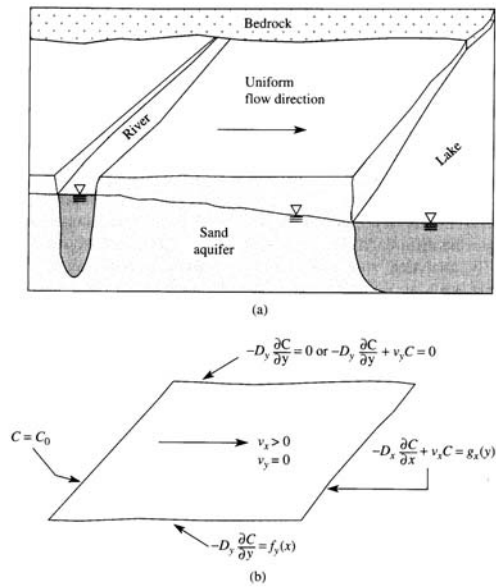
$$C(x, 0) = 0 \quad x > 0$$



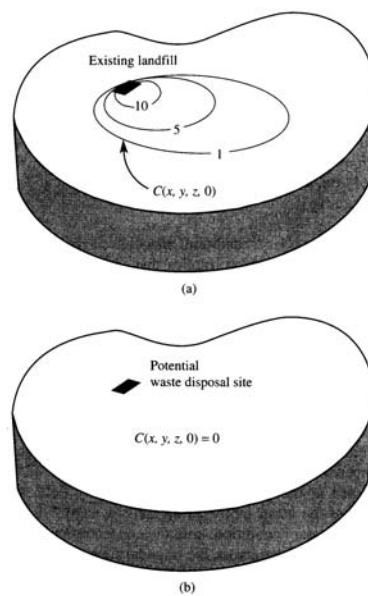
$$C(x, t)$$



## 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.

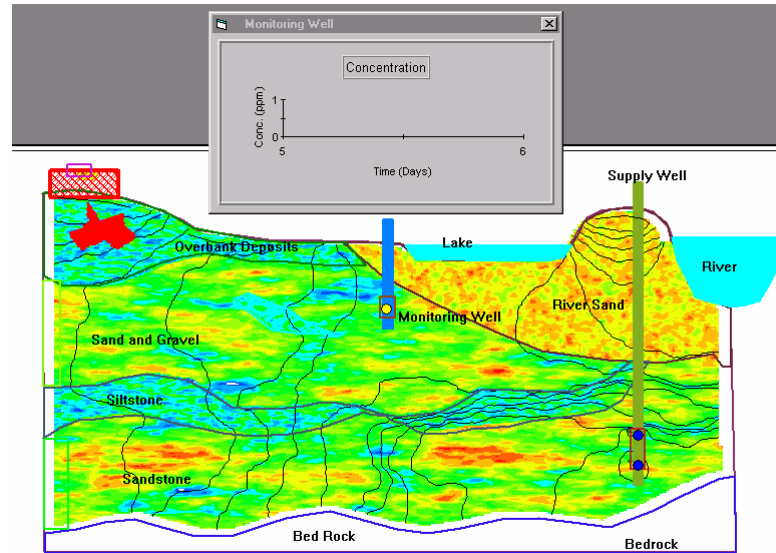
Estos códigos (por ejemplo MODPATH) son postprocesadores que acompañan a un programa como MODFLOW al utilizar las velocidades determinadas por este último para calcular la posición de estas partículas imaginarias.

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

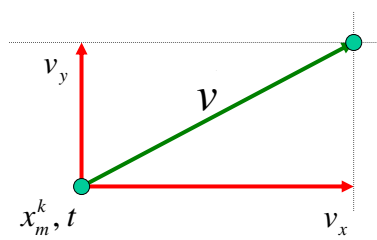
Se debe determinar la velocidad  $v$ .



## PARTICLE TRACKING



## PARTICLE TRACKING:

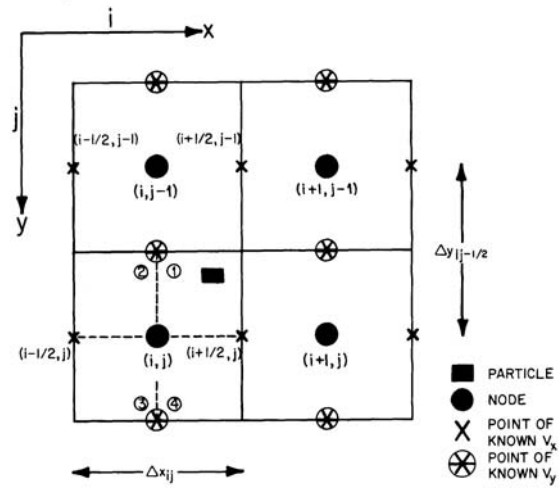


$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t$$

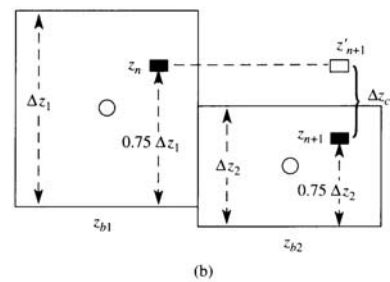
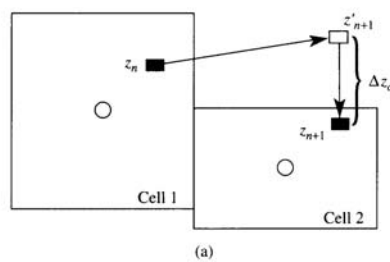
$$y_m^{k+1} = y_m^k + v_y \cdot \Delta t$$

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

$$f_x = \frac{(x_p - x_{i-1/2, j})}{\Delta x}$$

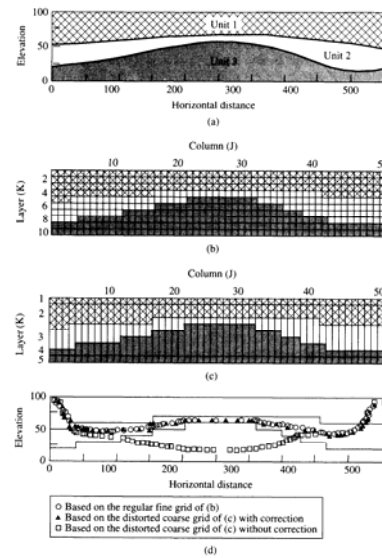


Problemas con mallas distorsionadas:

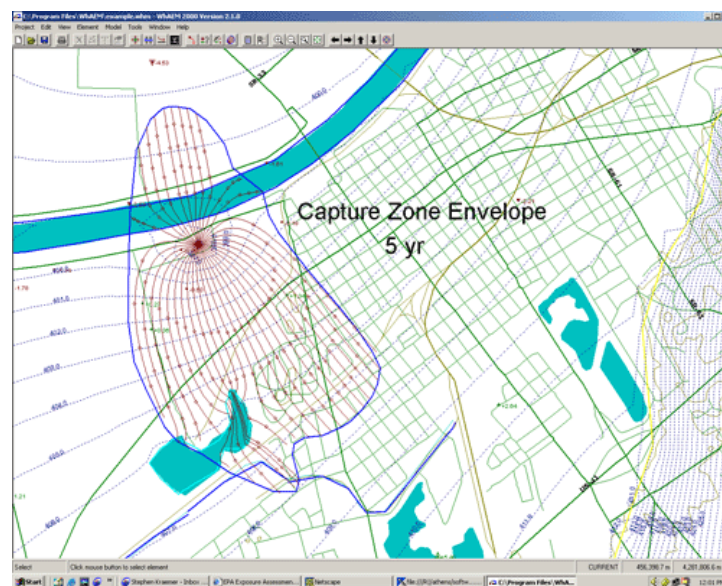




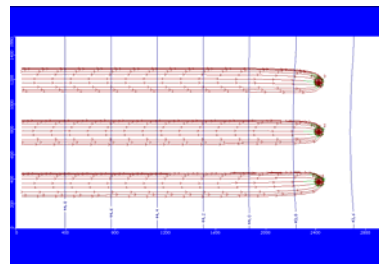
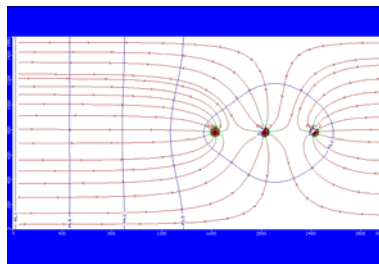
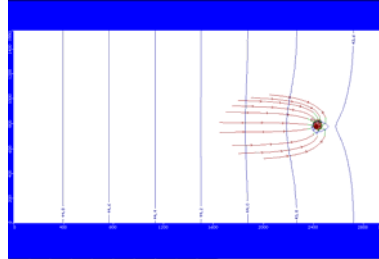
## Problemas con mallas distorsionadas:



## ZONAS DE CAPTURA



## PERIMETROS DE PROTECCION



## INTRODUCCION

### ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

### TRANSPORTE ADVECTIVO

### MODPATH

### TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO



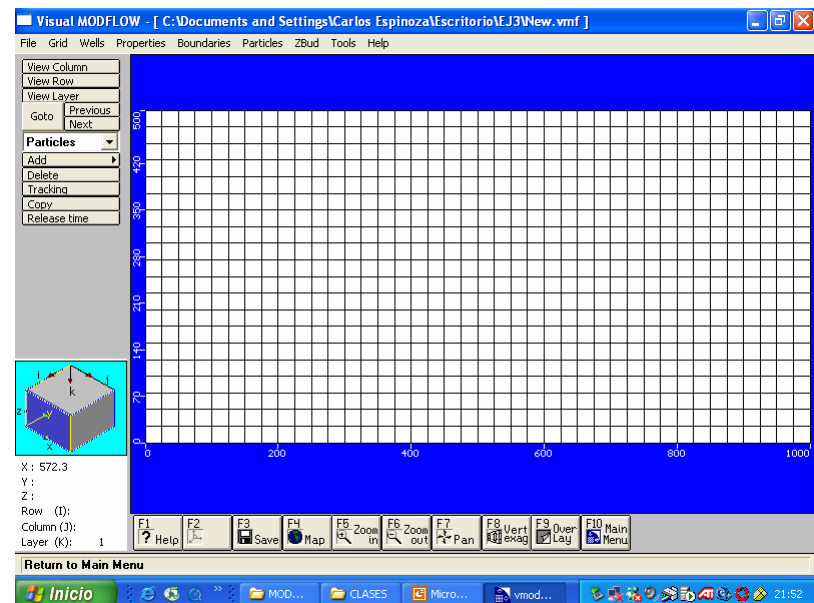
El programa MODPATH fue desarrollado por el USGS (Pollock, 1989) para calcular el movimiento de partículas en 3D a partir de simulaciones de flujo permanente, obtenidas MODFLOW.

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

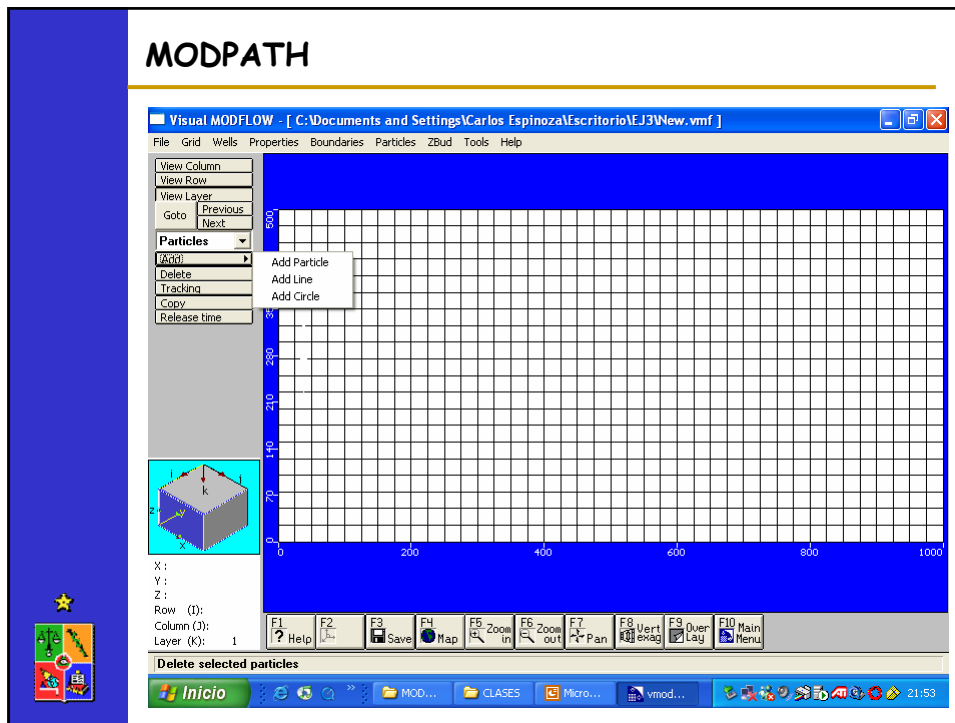
MODPATH usa un esquema semianalítico, que se basa en el supuesto de que cada componente de la velocidad varía linealmente en una grilla. Este supuesto permite obtener una expresión analítica para describir el patrón de flujo en una celda. Si se tiene la posición inicial de una partícula es posible obtener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



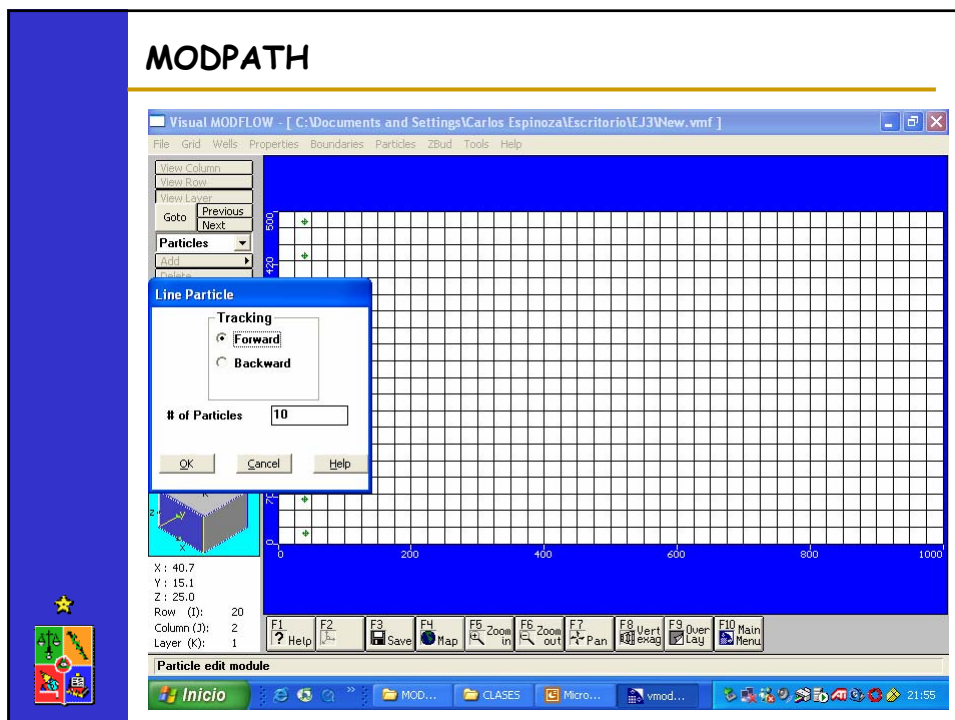
## MODPATH



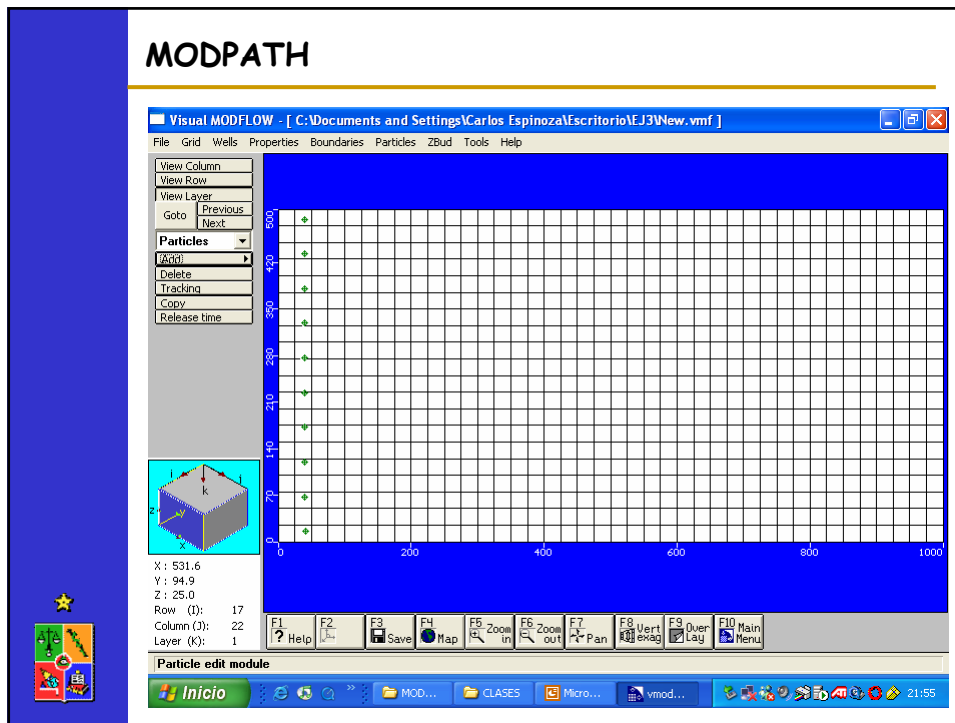
## MODPATH



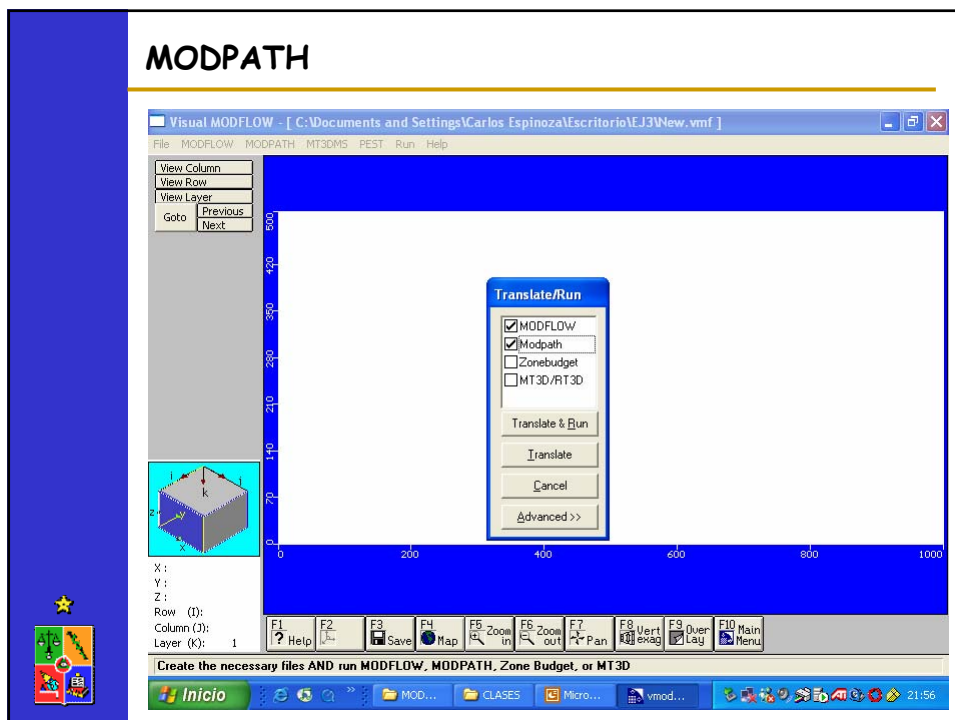
## MODPATH



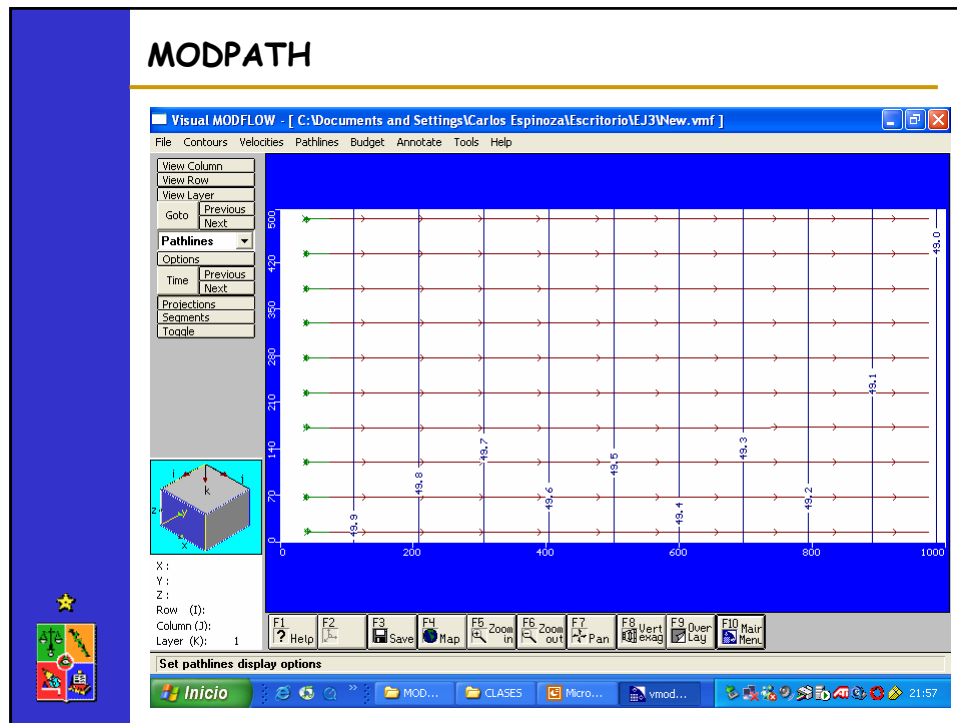
## MODPATH



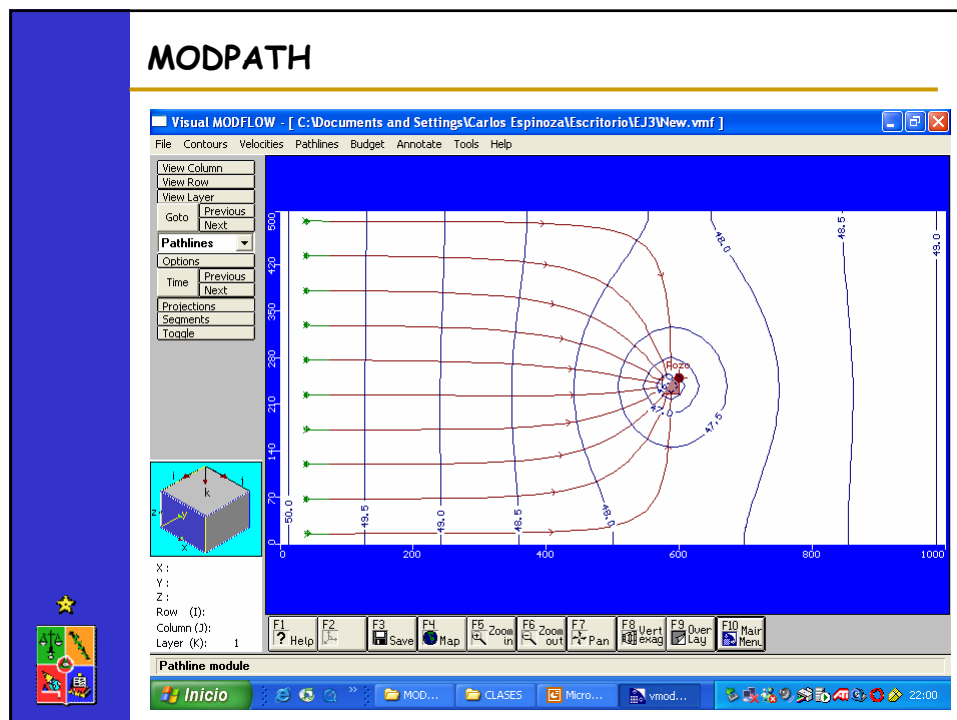
## MODPATH



## 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:

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

- 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:

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

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

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

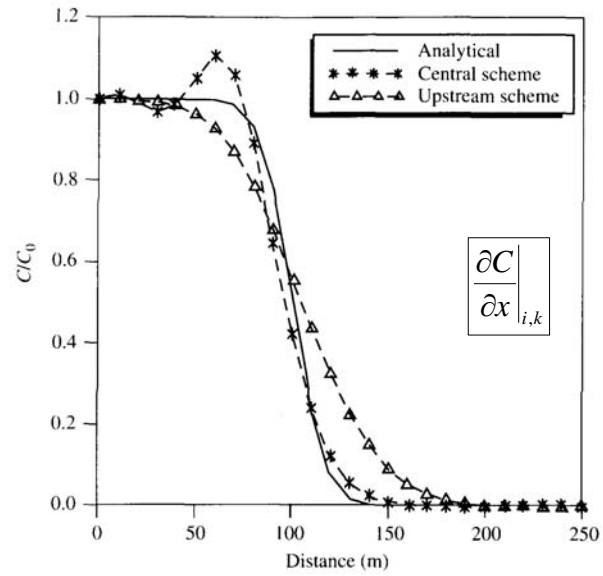
ESQUEMA  
EULERIANO

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

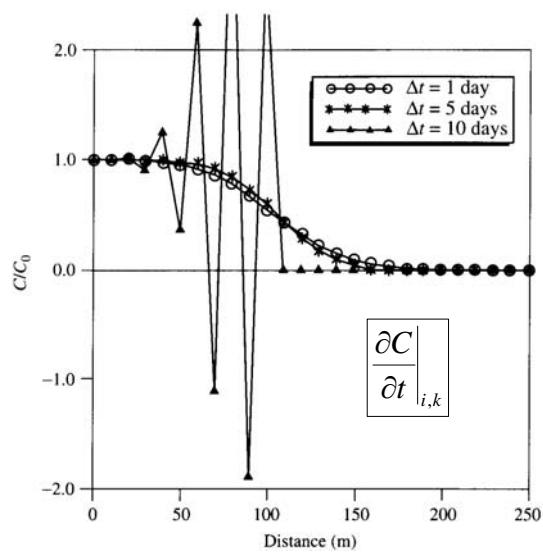




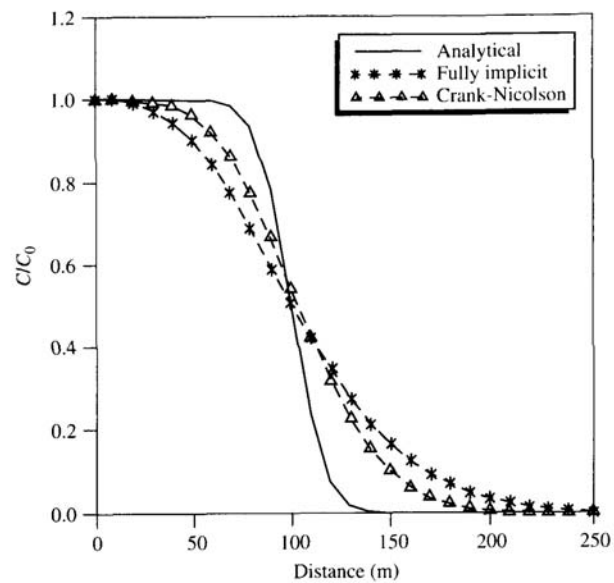
## DIFERENCIAS FINITAS



## DIFERENCIAS FINITAS



## DIFERENCIAS FINITAS



## DIFERENCIAS FINITAS

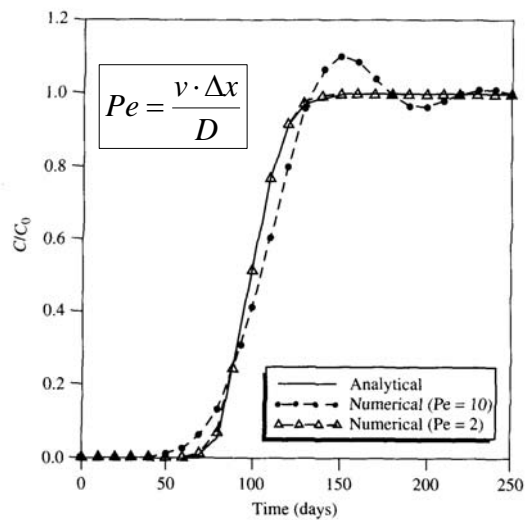
Dispersión numérica es significativa para problemas de advección dominante y/o problemas con frentes de concentración.

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

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

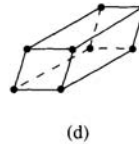
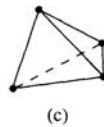
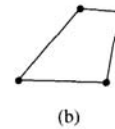
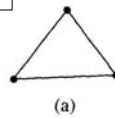
#### LAGRANGIANO

#### EULERIANO - LAGRANGIANO

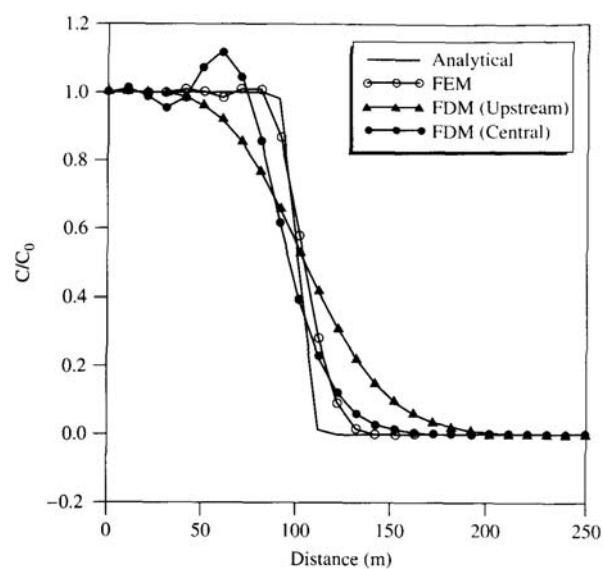
## ELEMENTOS FINITOS

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.

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



## 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 (determinística) y una componente dispersiva (aleatoria). Método Lagrangiano.

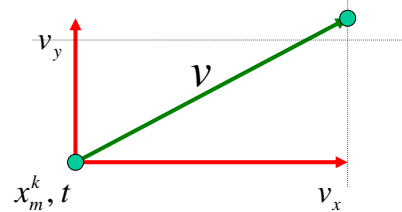
No presenta problemas de estabilidad; si presenta problemas de aproximación de la solución numérica, la que depende del número de partículas utilizadas en la modelación.



## RANDOM WALK

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

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

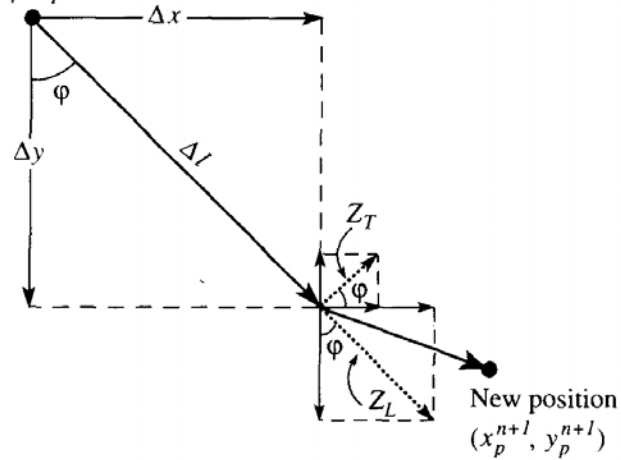


ESQUEMA  
LAGRANGIANO

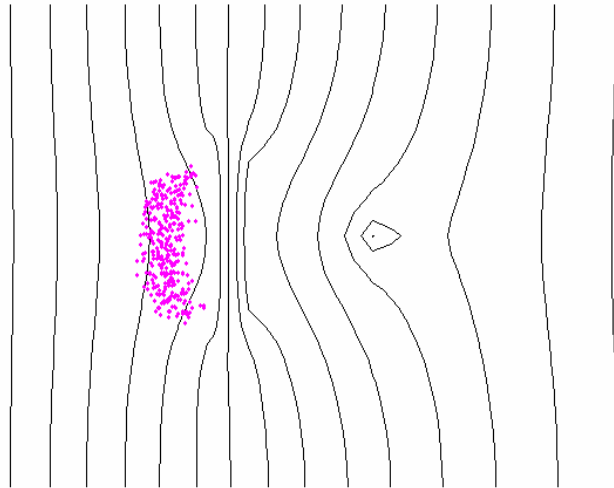
$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t + \sqrt{2 \cdot D_x \cdot t} \cdot z$$

## RANDOM WALK

Old position  
( $x_p^n, y_p^n$ )



## 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)

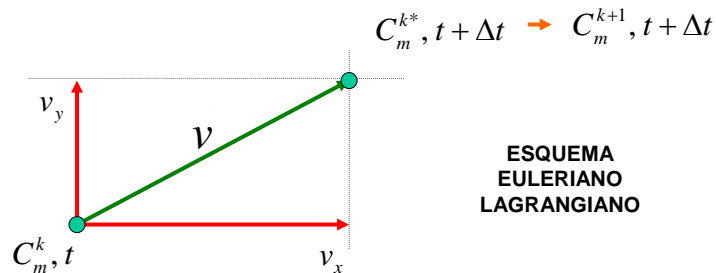
-METODO DE LAS CARACTERISTICAS MODIFICADO (MMOC)

-METODO HIBRIDO DE LAS CARACTERISTICAS (HMOC)

## MOC/MMOC/HMOC

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

$$D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \underbrace{v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{advection}} = \frac{\partial C}{\partial t}$$





### MOC/MMOC/HMOC

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

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

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

Métodos se diferencian en como evalúan el término:

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

## CURSO DE MODELACION NUMERICA DE AGUAS SUBTERRANEAS

18 a 21 de Diciembre de 2006

### TEMA 6b MODELACION NUMERICA DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN AGUAS SUBTERRANEAS



Carlos Espinoza C.  
Ingeniero Civil, Ph.D.  
Académico Universidad de Chile

