

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

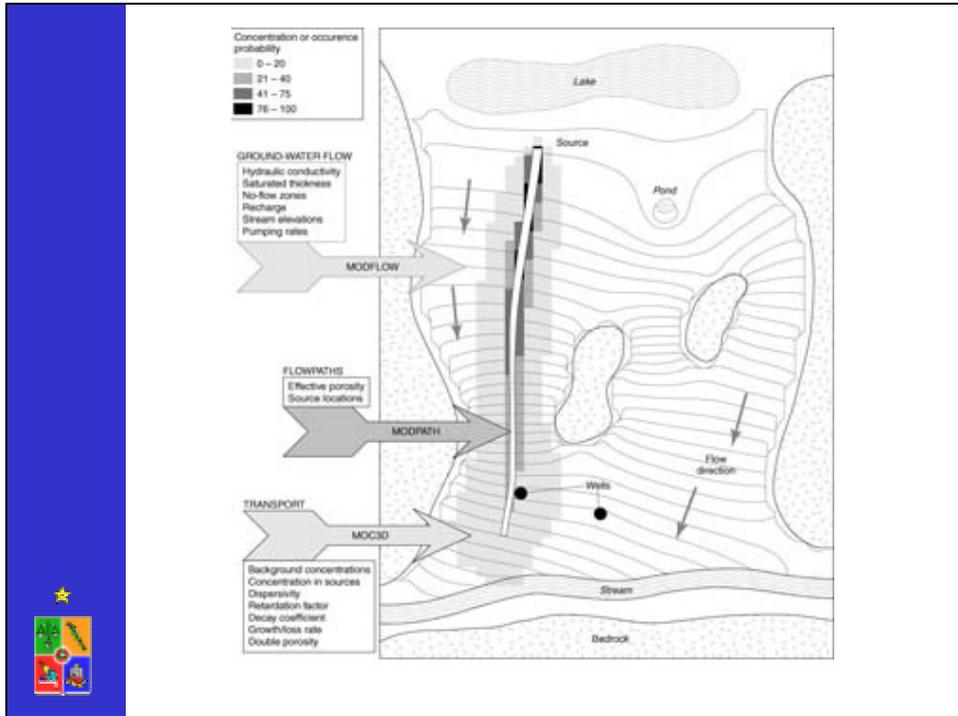
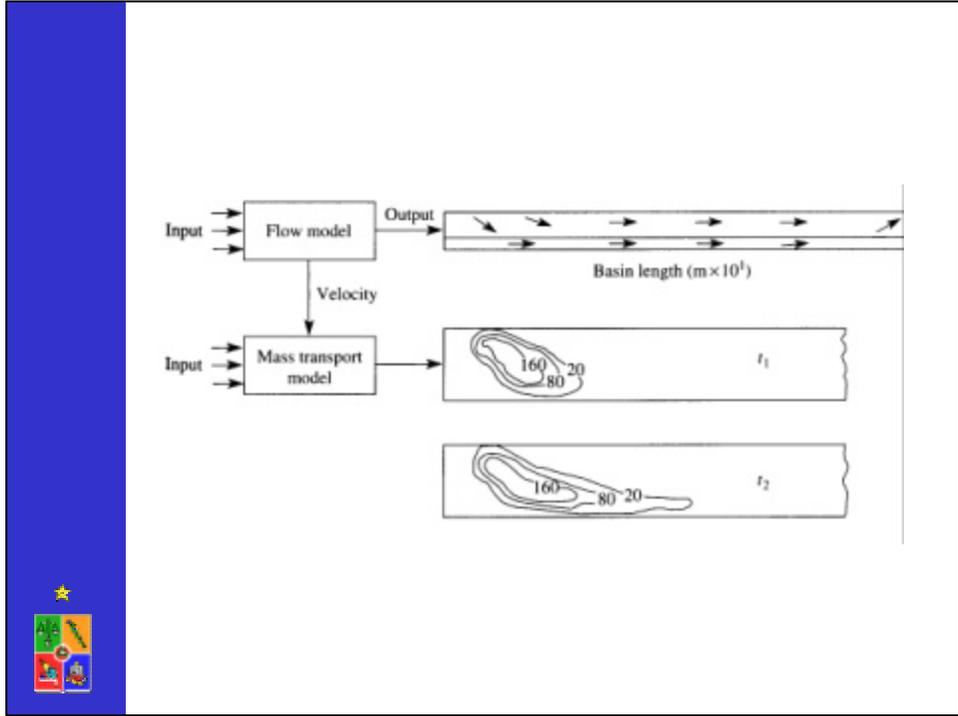
$$v = -\underline{K} \cdot \nabla h$$



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.

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

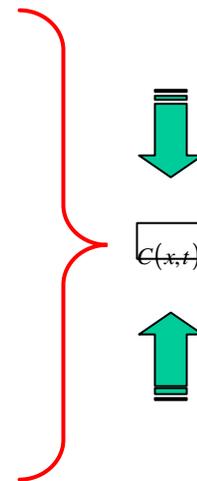
Condiciones de Borde.

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

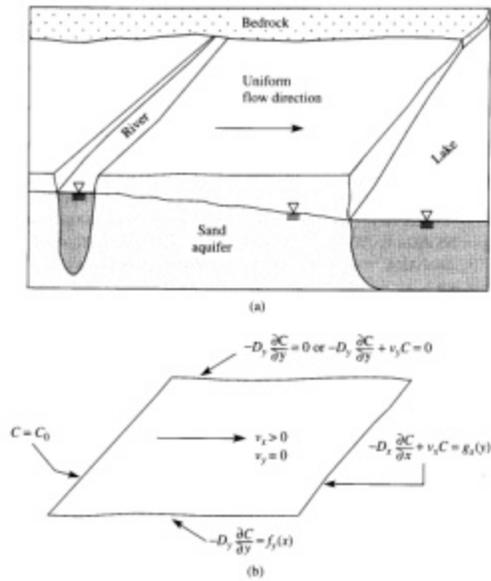
$$C(\infty, t) = 0 \quad t > 0$$

Condiciones Iniciales.

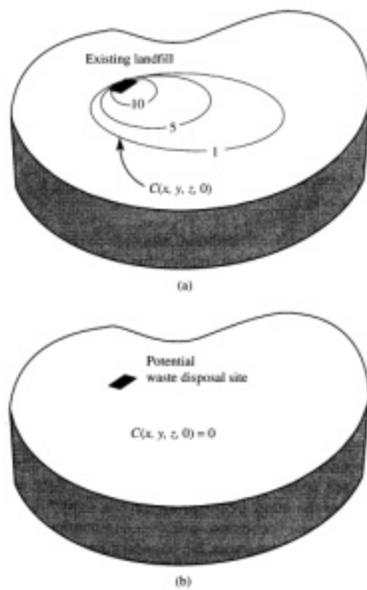
$$C(x, 0) = 0 \quad x > 0$$



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.

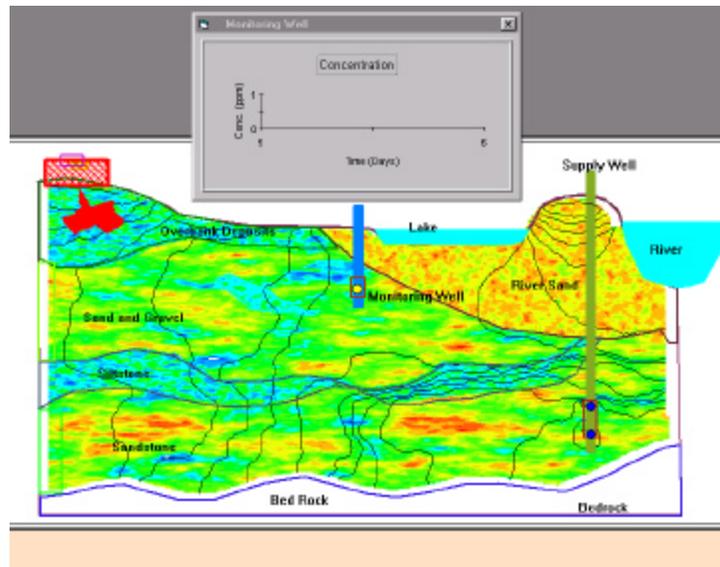
Estos códigos (por ejemplo MODPATH) son postprocesadores que acompañan a un programa como MODFLOW al utilizar las velocidades determinadas por este último para calcular la posición de estas partículas imaginarias.

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

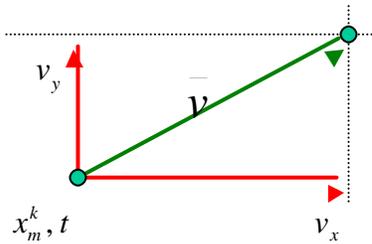
Se debe determinar la velocidad v .



PARTICLE TRACKING



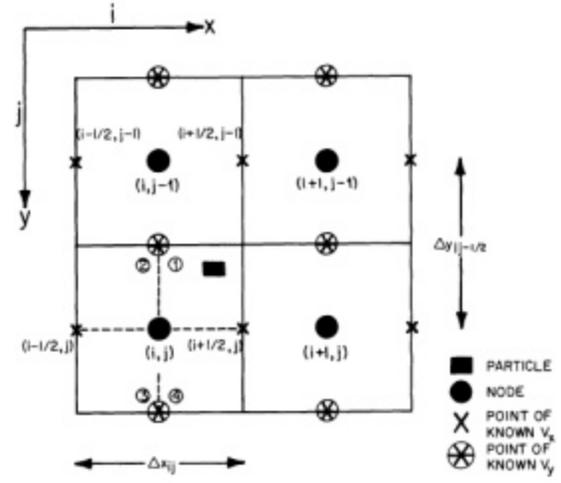
PARTICLE TRACKING:



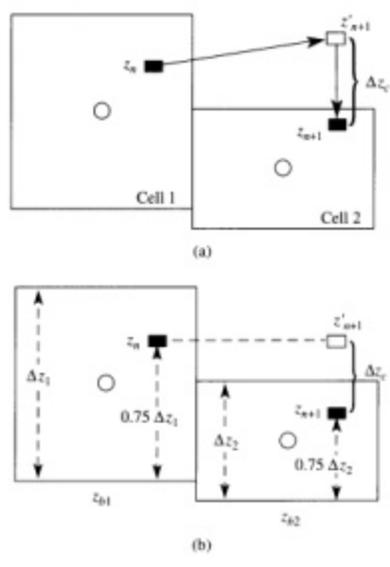
$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t$$

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

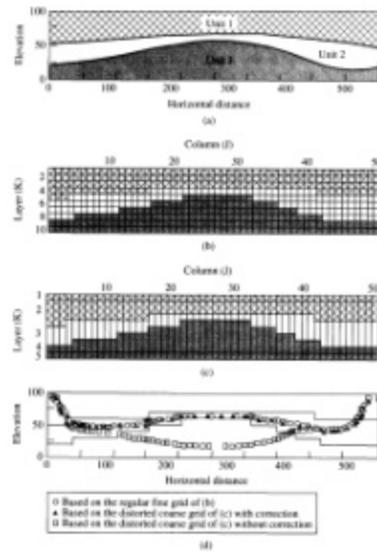
$$v_x = (1 - f_x) \cdot v_{x(i-1/2, j)} + f_x \cdot v_{x(i+1/2, j)} \quad f_x = \frac{(x_P - x_{i-1/2, j})}{\Delta x}$$



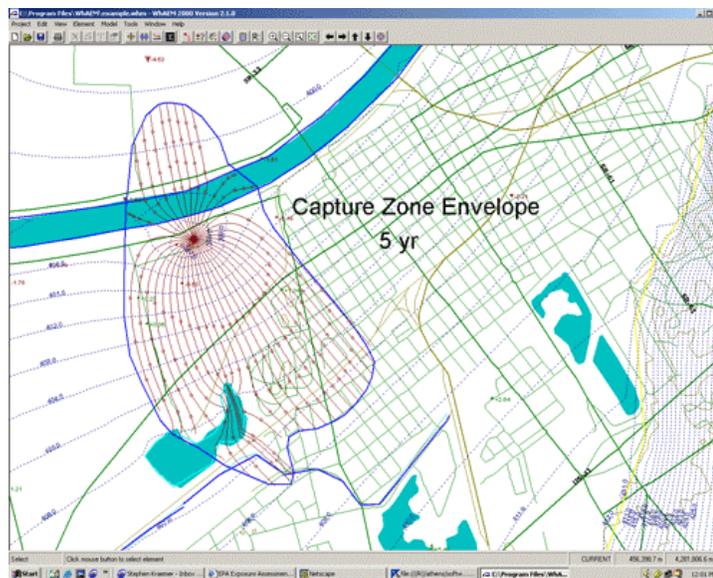
Problemas con mallas distorsionadas:



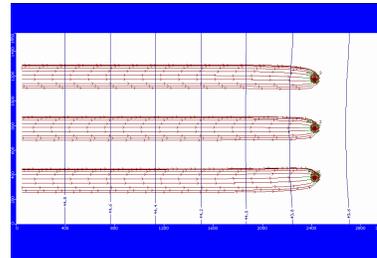
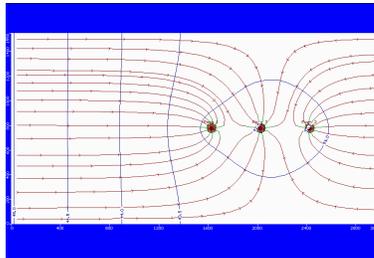
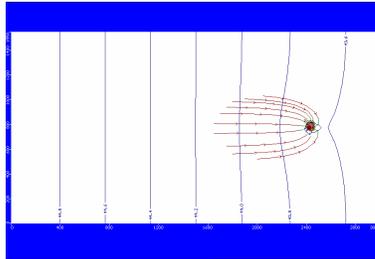
Problemas con mallas distorsionadas:.



ZONAS DE CAPTURA



PERIMETROS DE PROTECCION



INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO



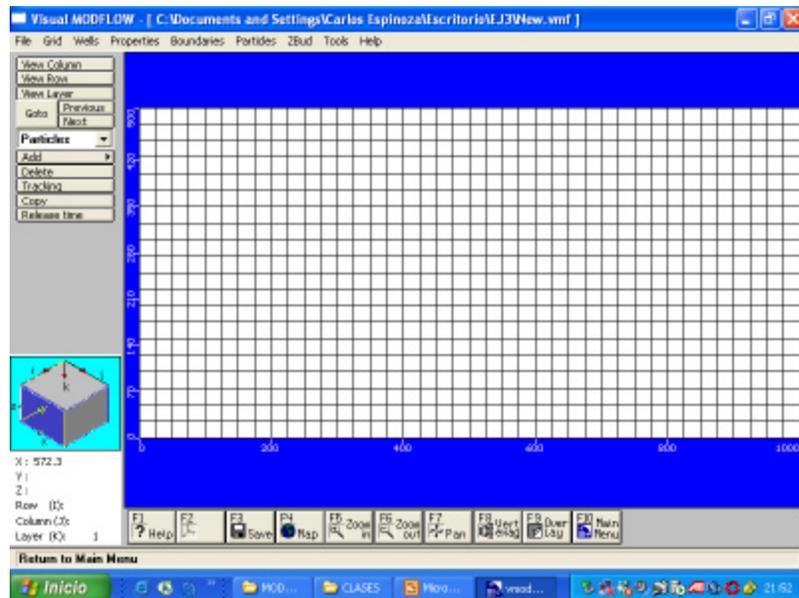
El programa MODPATH fue desarrollado por el USGS (Pollock, 1989) para calcular el movimiento de partículas en 3D a partir de simulaciones de flujo permanente, obtenidas MODFLOW.

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

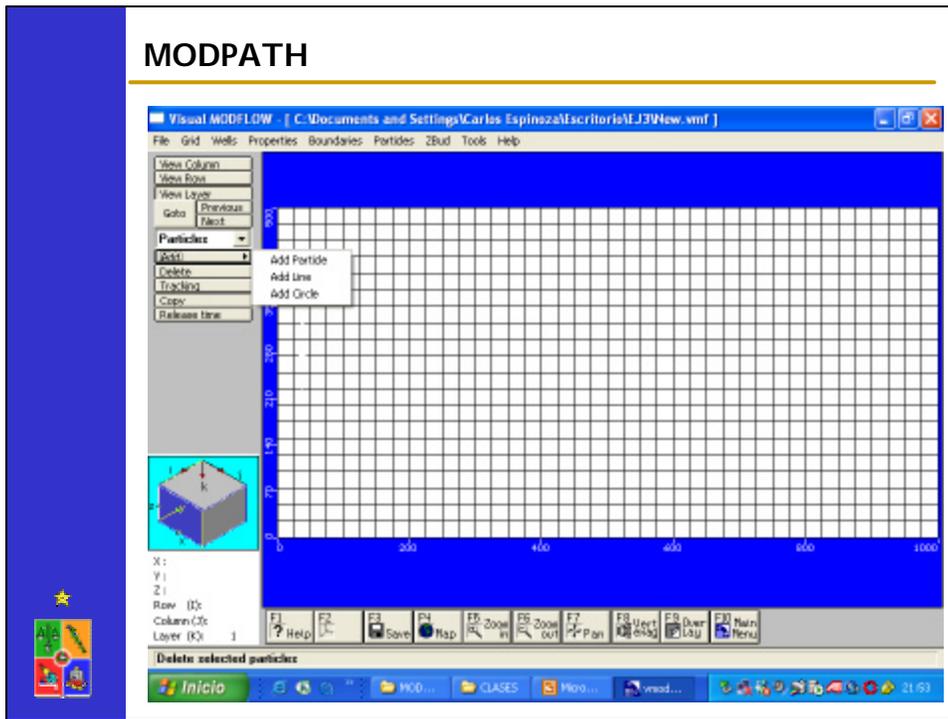
MODPATH usa un esquema semianalítico, que se basa en el supuesto de que cada componente de la velocidad varía linealmente en una grilla. Este supuesto permite obtener una expresión analítica para describir el patrón de flujo en una celda. Si se tiene la posición inicial de una partícula es posible obtener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



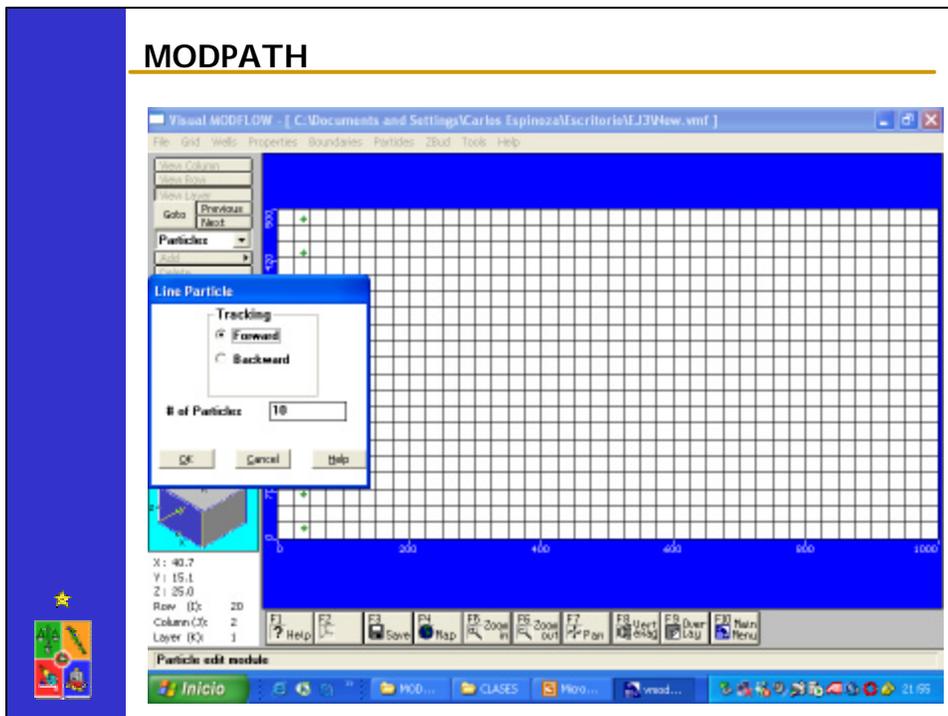
MODPATH



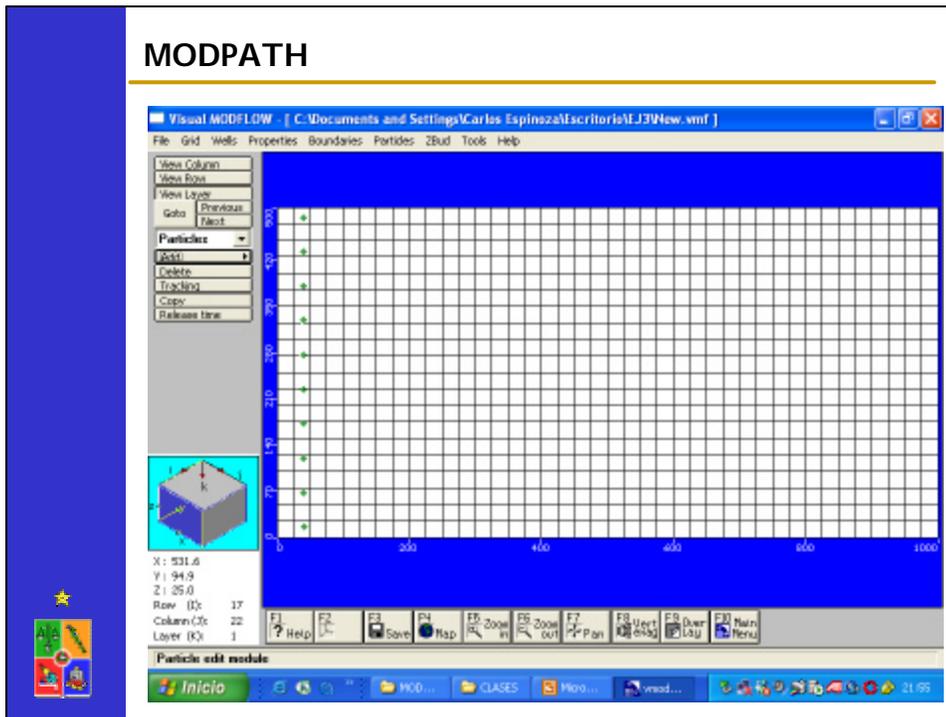
MODPATH



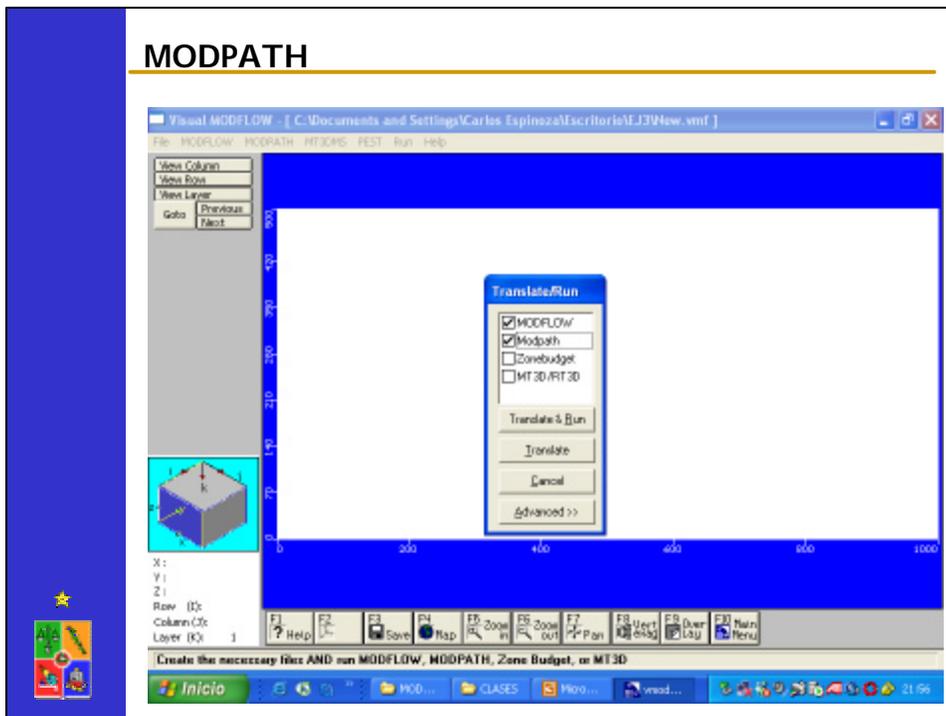
MODPATH



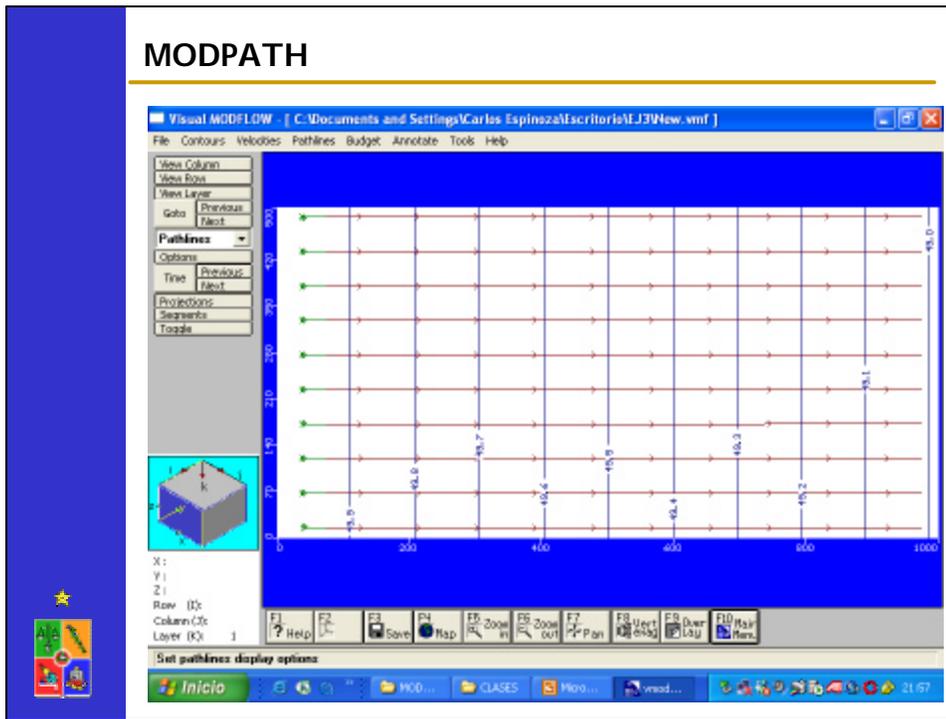
MODPATH



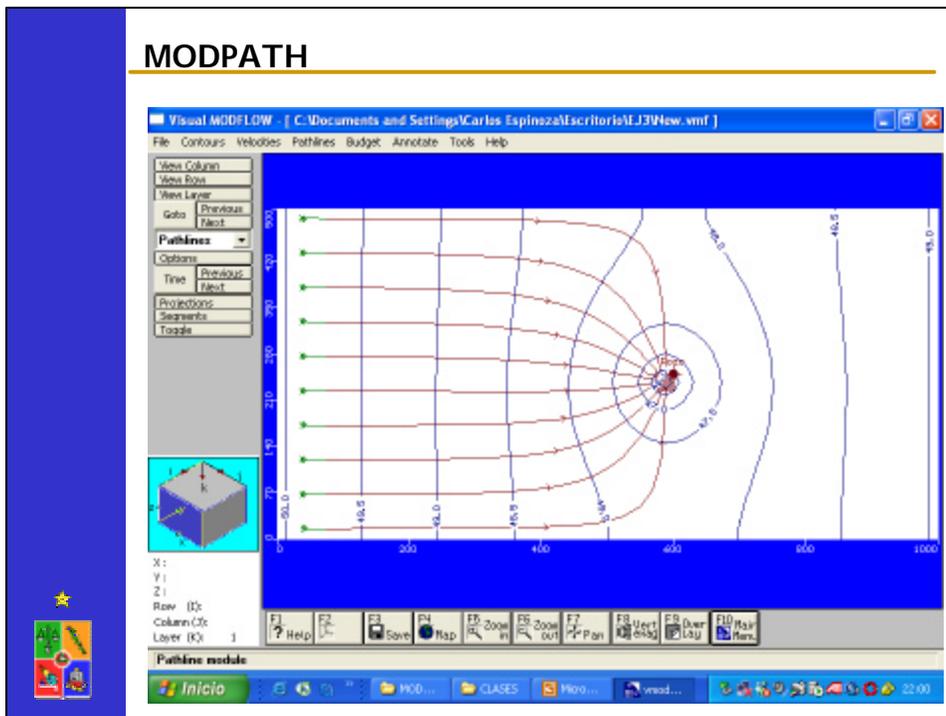
MODPATH



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:

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

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

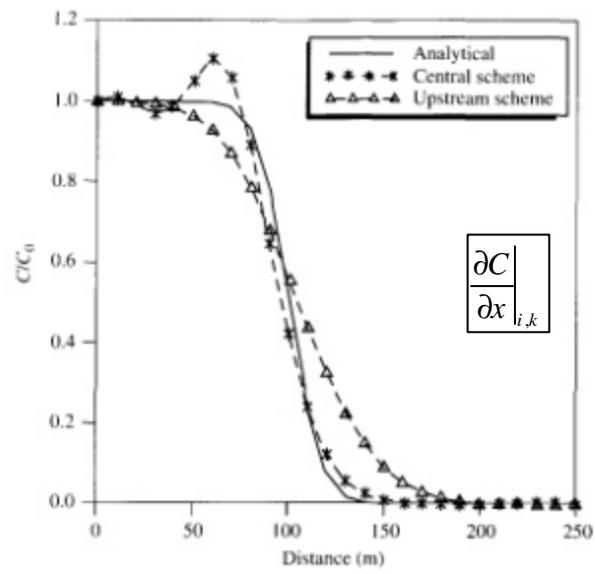
$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{i,k} \cong \frac{C_{i+1}^{k+1} - C_i^{k+1}}{\Delta x}$$

**ESQUEMA
EULERIANO**

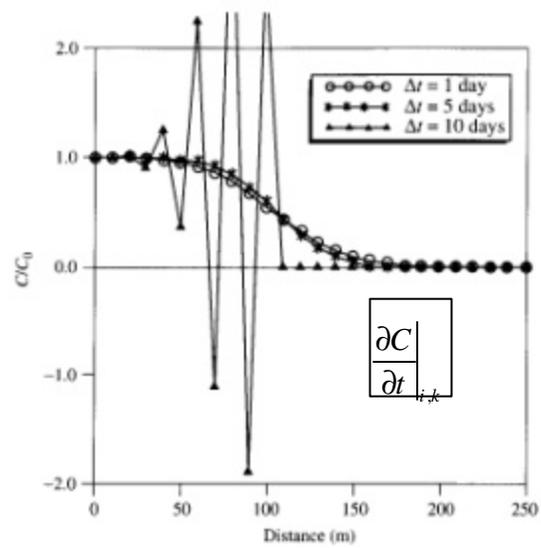
$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{i,k} \cong \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t}$$



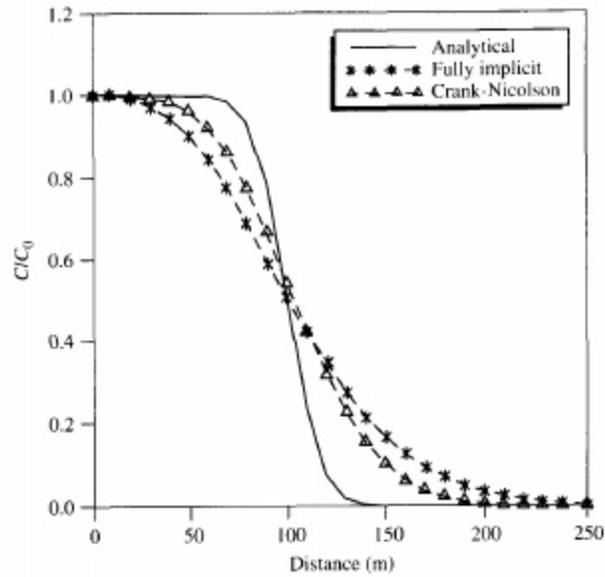
DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS

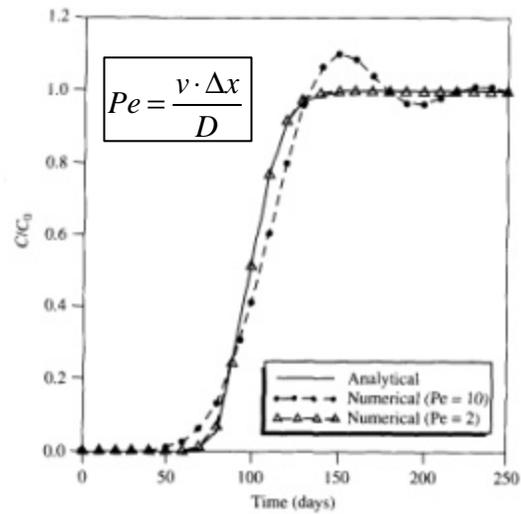
Dispersión numérica es significativa para problemas de advección dominante y/o problemas con frentes de concentración.

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

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

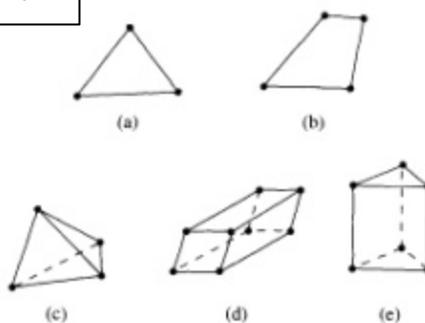
LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

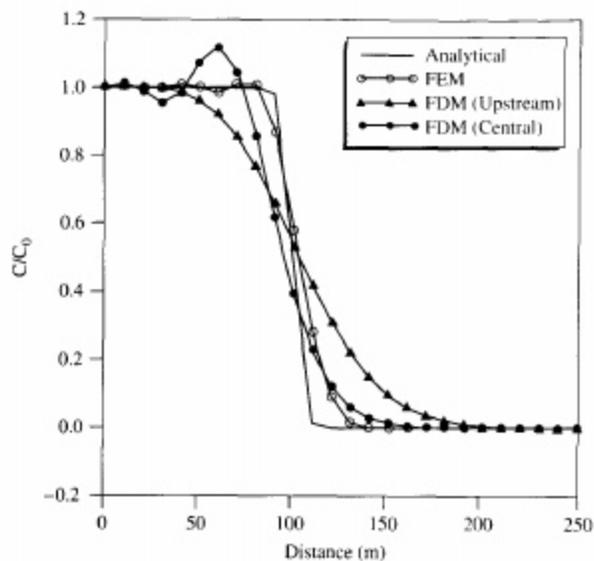
ELEMENTOS FINITOS

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.

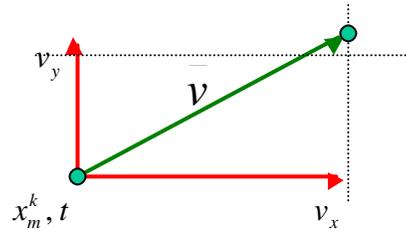
No presenta problemas de estabilidad; si presenta problemas de aproximación de la solución numérica, la que depende del número de partículas utilizadas en la modelación.



RANDOM WALK

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

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

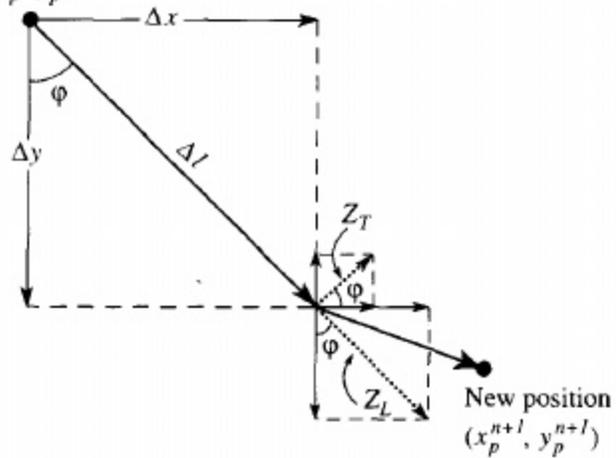


ESQUEMA
LAGRANGIANO

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

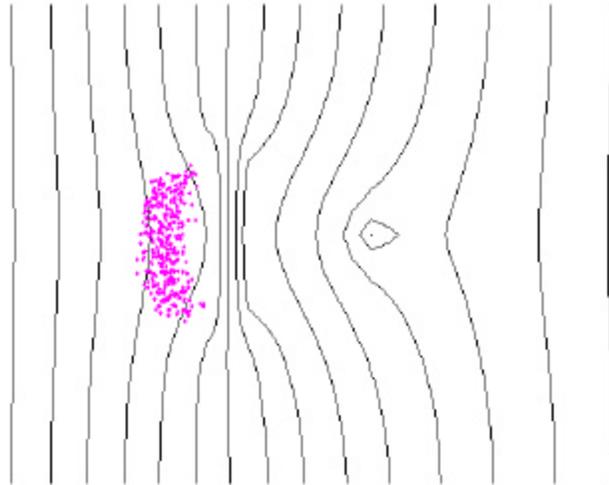
RANDOM WALK

Old position
 (x_p^n, y_p^n)



New position
 (x_p^{n+1}, y_p^{n+1})

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)

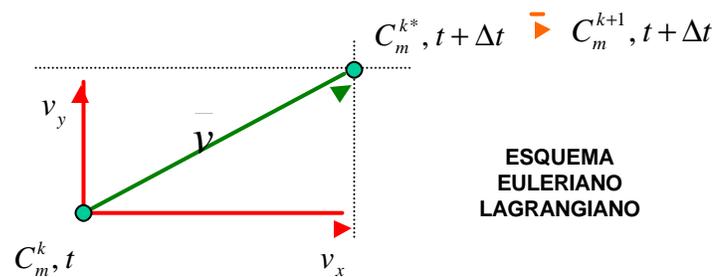
-METODO DE LAS CARACTERISTICAS MODIFICADO (MMOC)

-METODO HIBRIDO DE LAS CARACTERISTICAS (HMOC)

MOC/MMOC/HMOC

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

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



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:

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