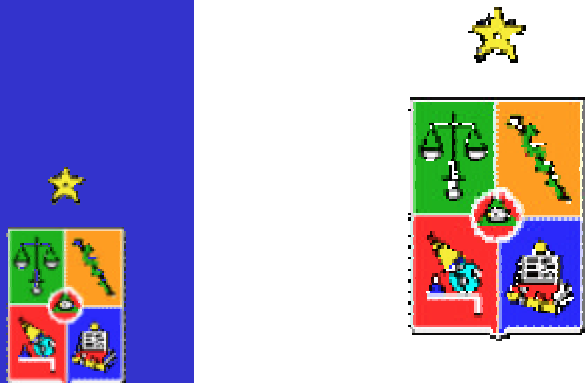


CI66J

**CI66J/CI71T
MODELACION DE AGUAS
SUBTERRANEAS**

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



CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



CI66J

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

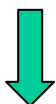
Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente



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**

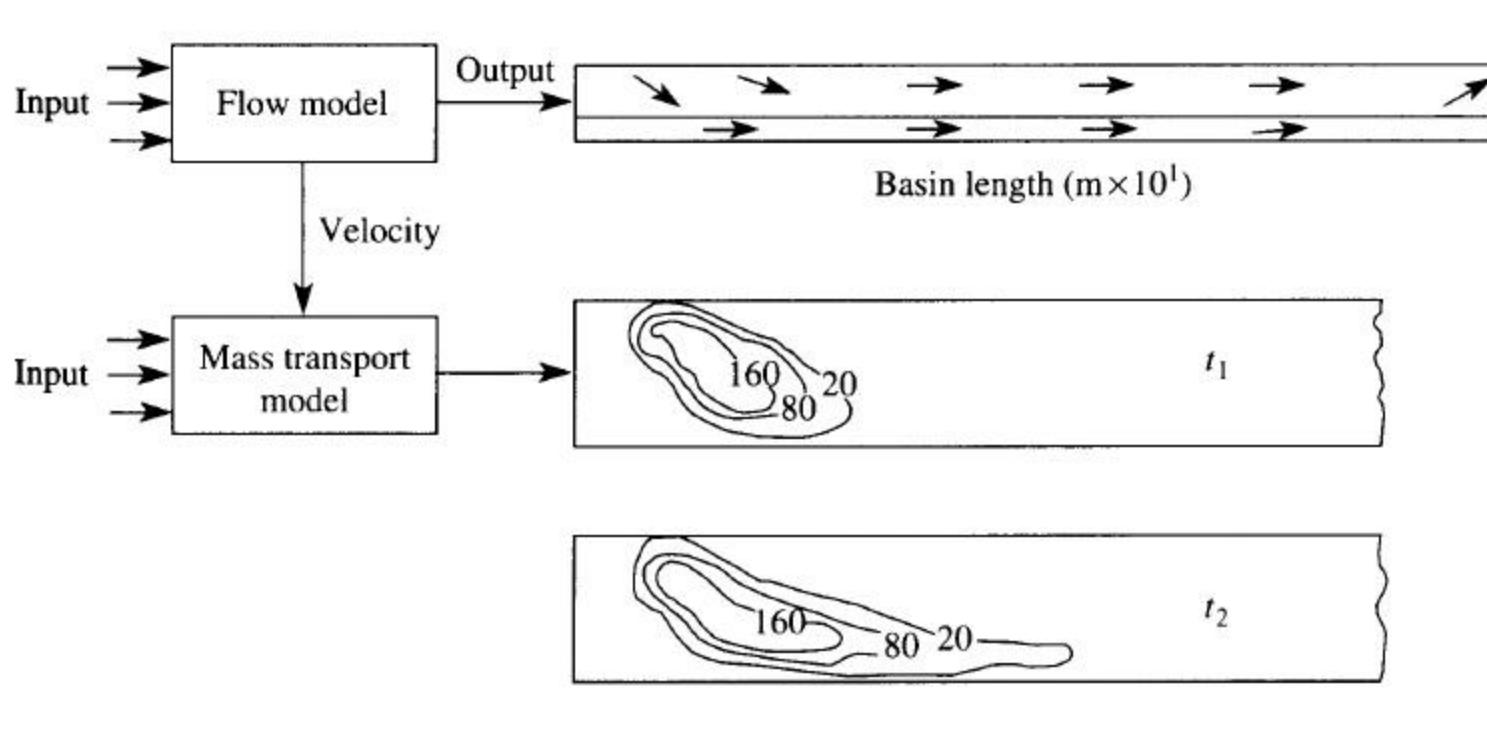
$$v = -\underline{K} \cdot \nabla h$$

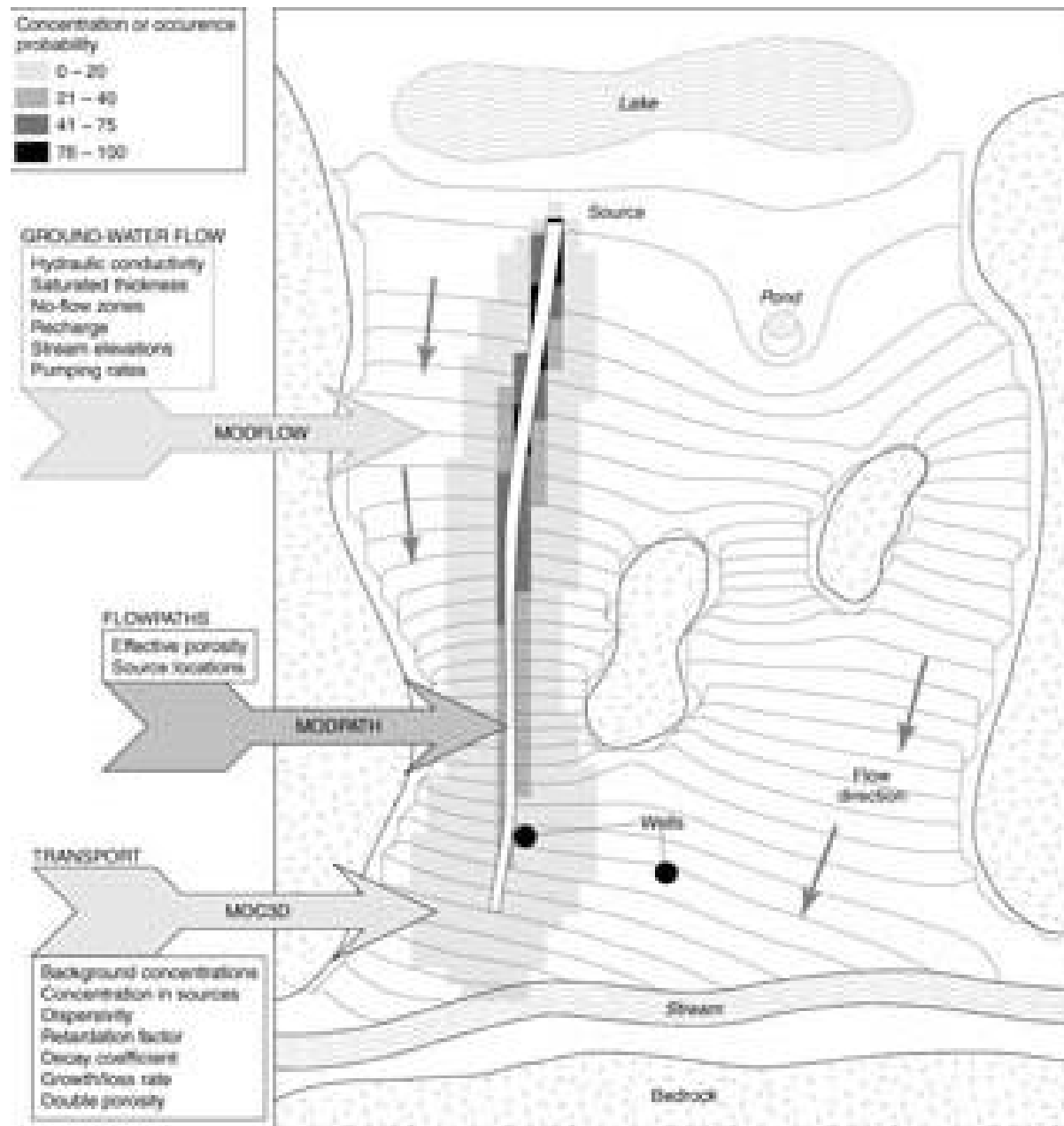


**RESOLVER
PROBLEMA DE
TRANSPORTE**

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







CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



Resolución de un problema de transporte de contaminantes requiere de:

Una ecuación de estado.

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

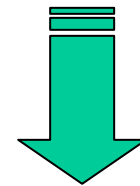
Condiciones de Borde.

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

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

Condiciones Iniciales.

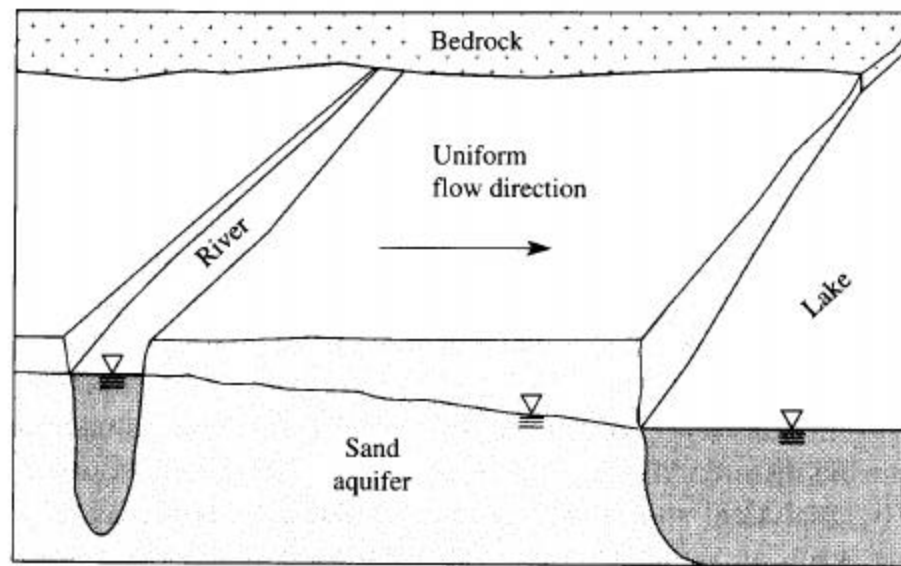
$$C(x, 0) = 0 \quad x > 0$$



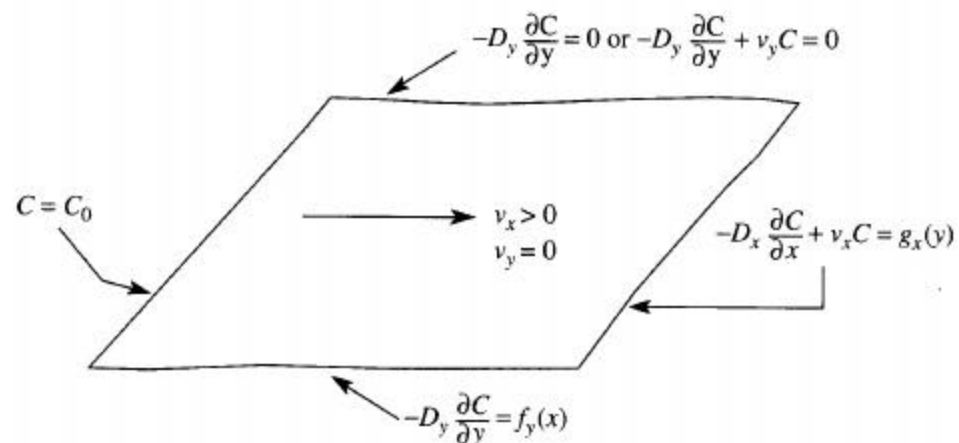
$$C(x, t)$$



CONDICIONES DE BORDE



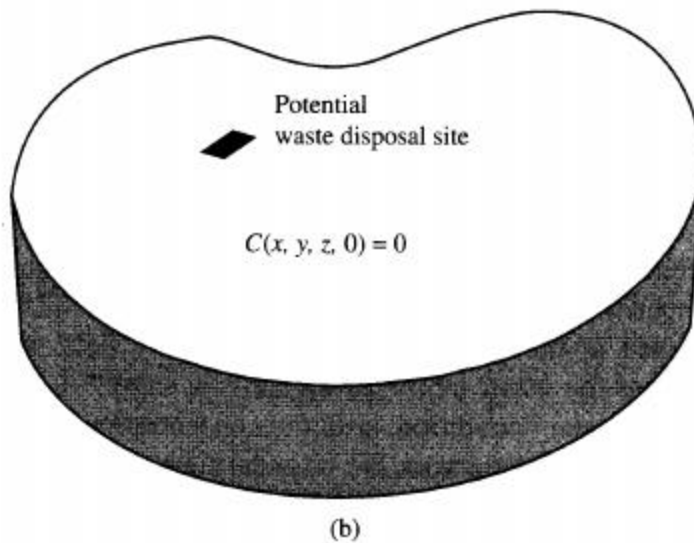
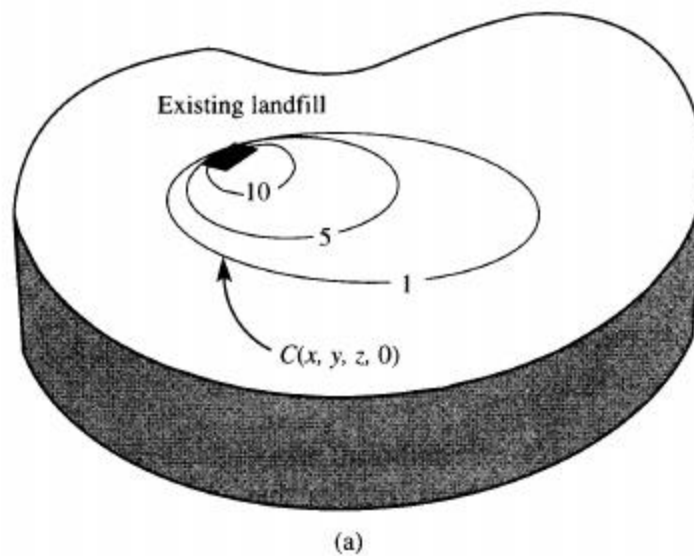
(a)



(b)



CONDICIONES INICIALES



CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



CI66J

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

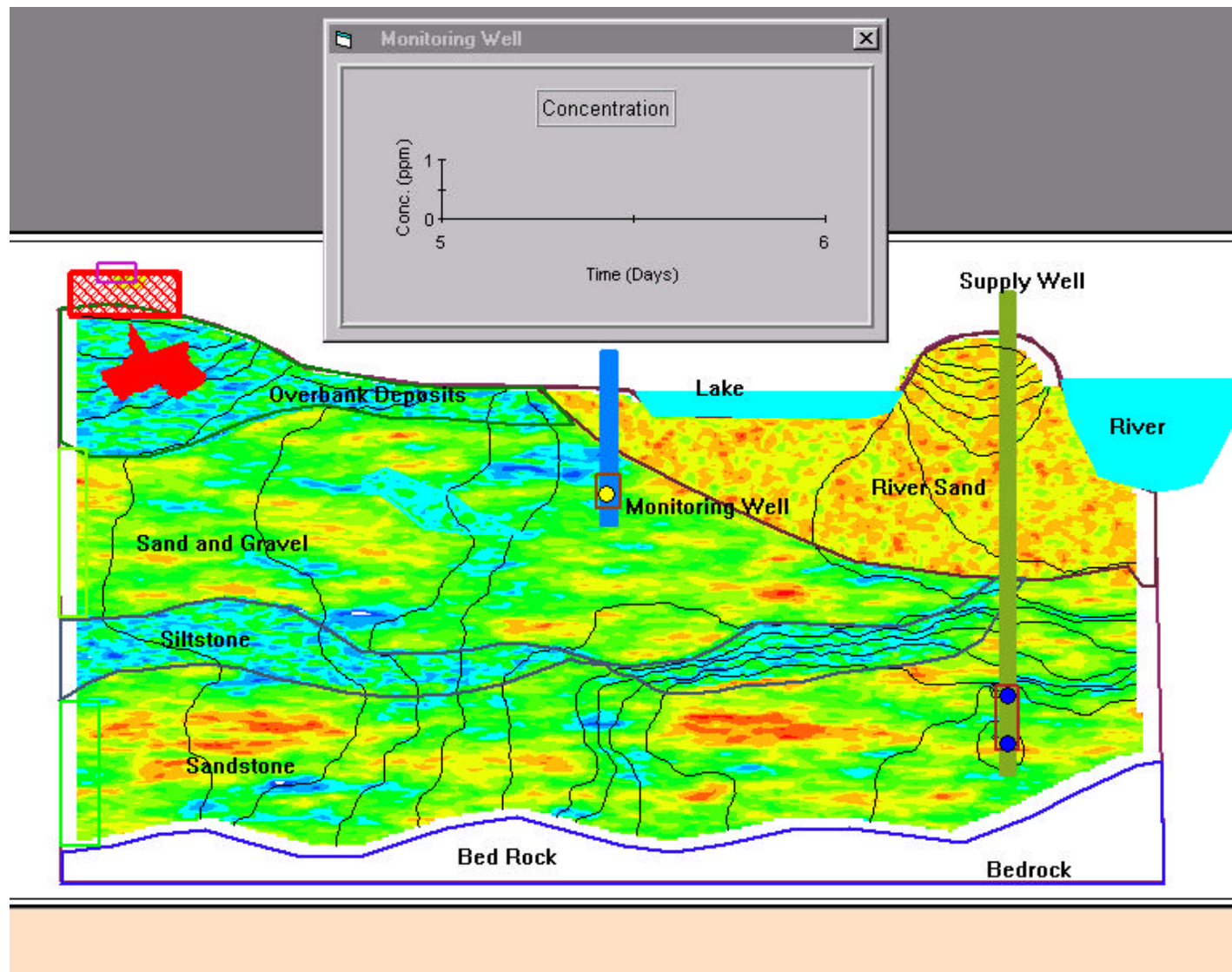
Estos códigos (por ejemplo MODPATH) son postprocesadores que acompañan a un programa como MODFLOW al utilizar las velocidades determinadas por este último para calcular la posición de estas partículas imaginarias.

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

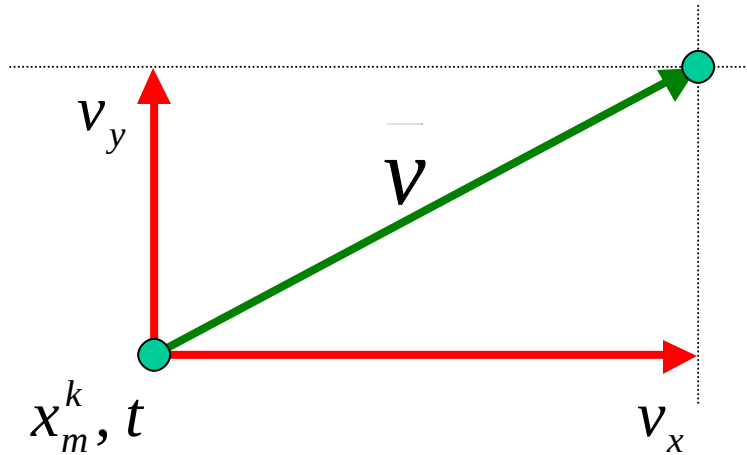
Se debe determinar la velocidad v .



PARTICLE TRACKING



PARTICLE TRACKING:



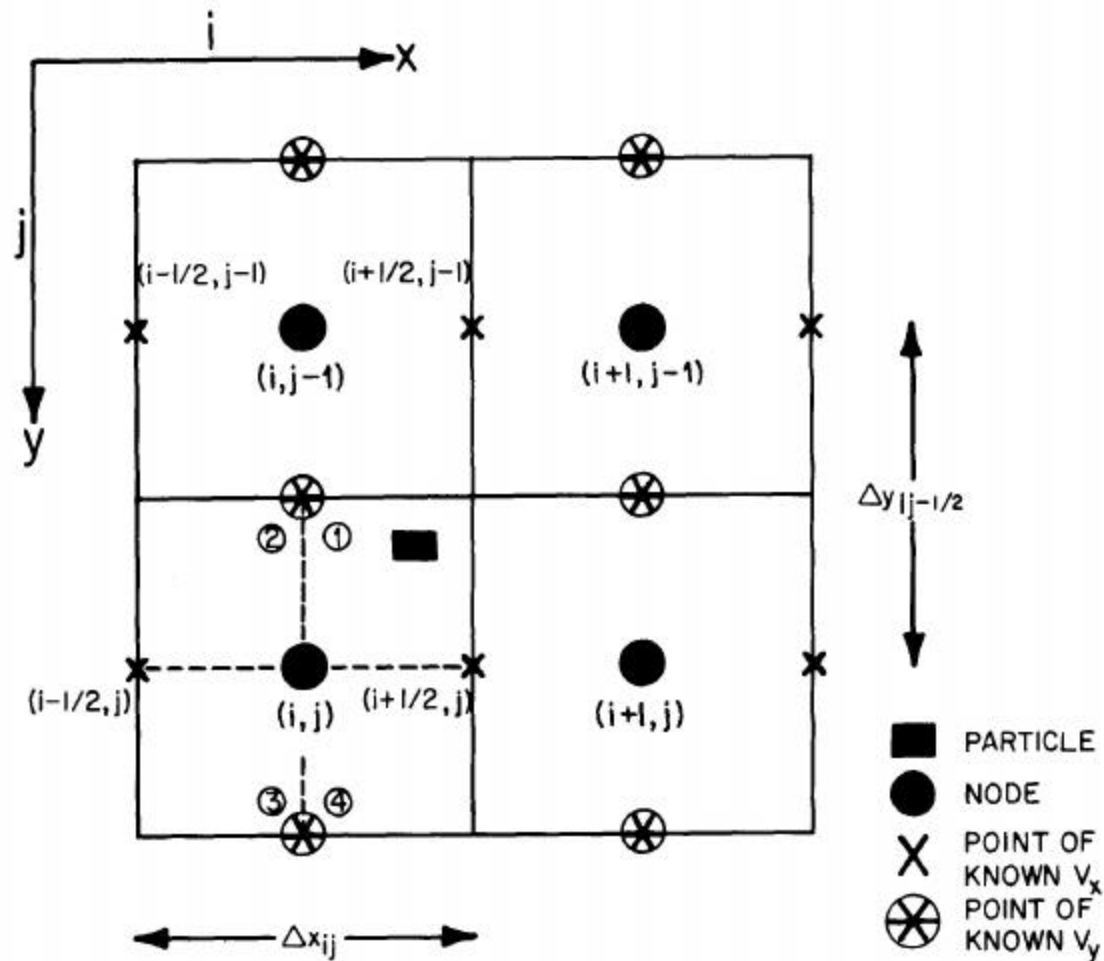
$$x_m^{k+1} = x_m^k + v_x \cdot \Delta t$$

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

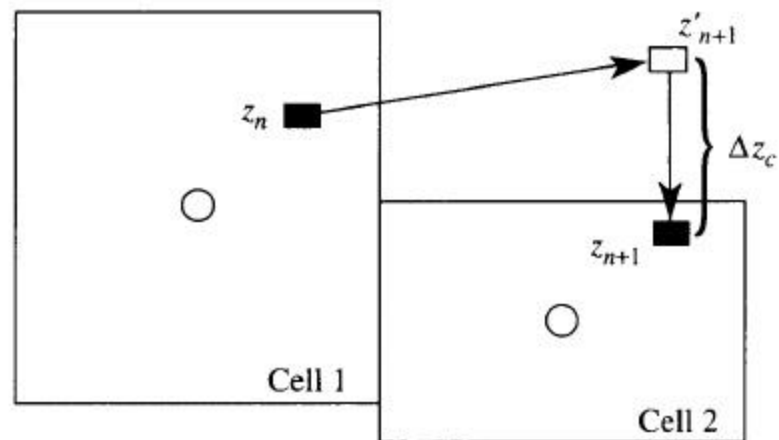


$$v_x = (1 - f_x) \cdot v_{x(i-1/2, j)} + f_x \cdot v_{x(i+1/2, j)}$$

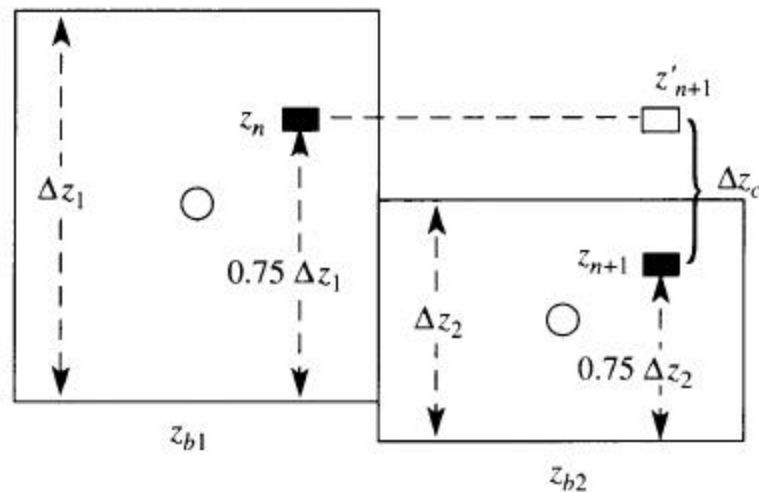
$$f_x = \frac{(x_P - x_{i-1/2, j})}{\Delta x}$$



Problemas con mallas distorsionadas:



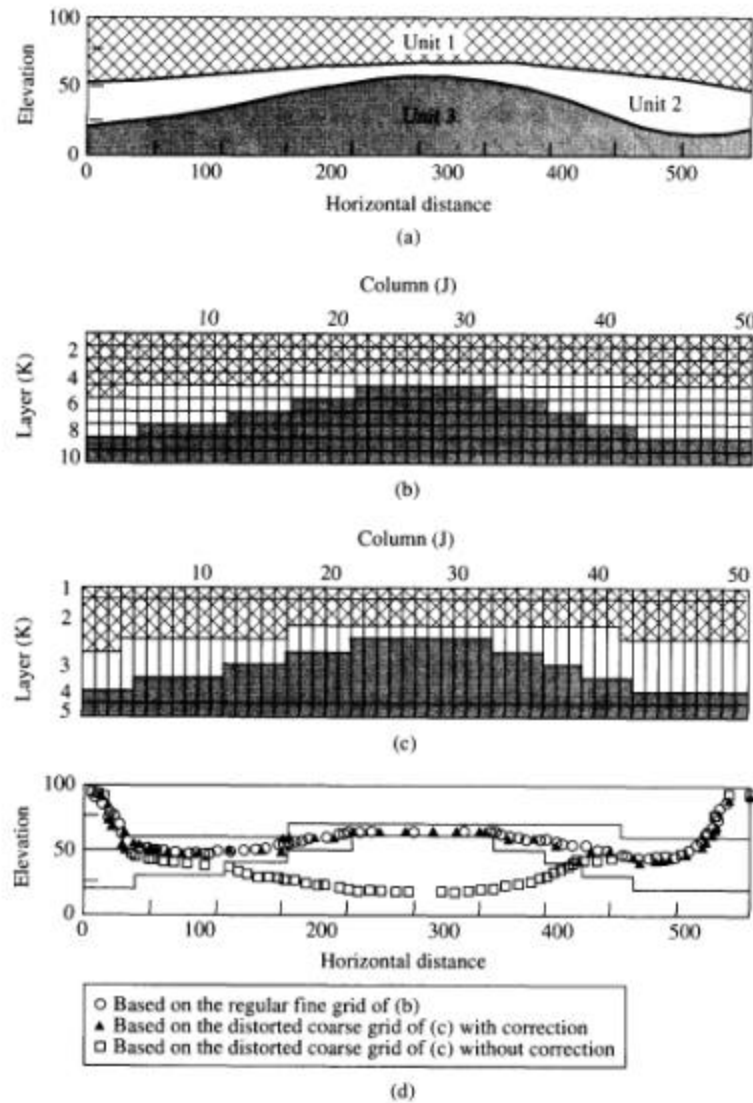
(a)

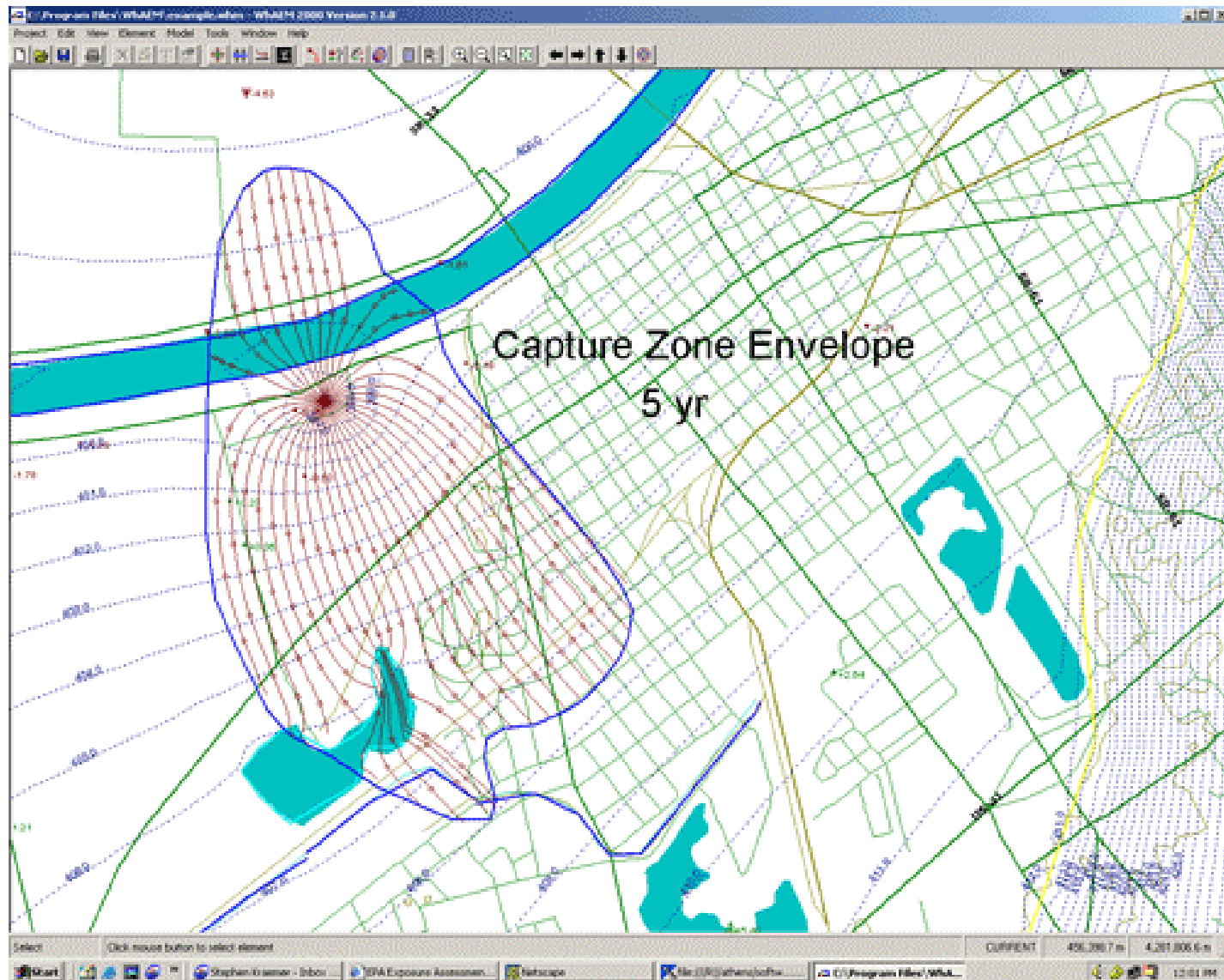


(b)

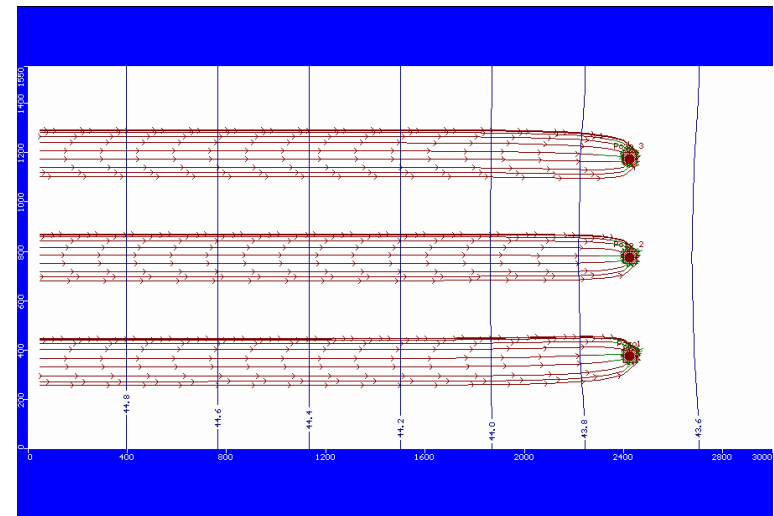
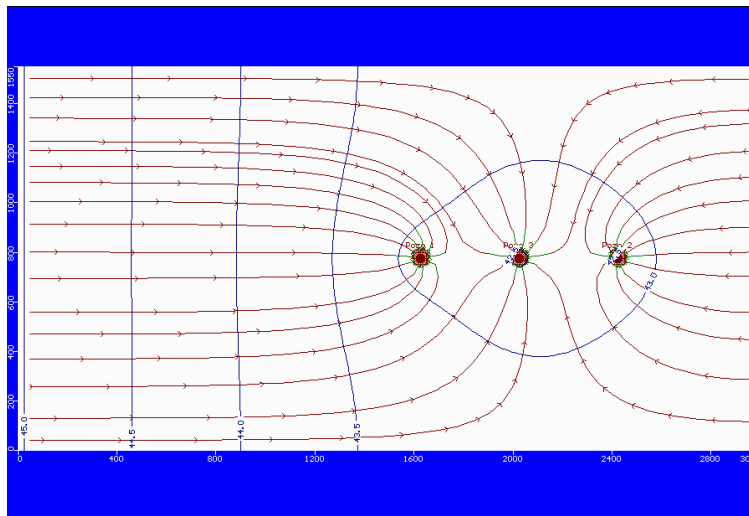
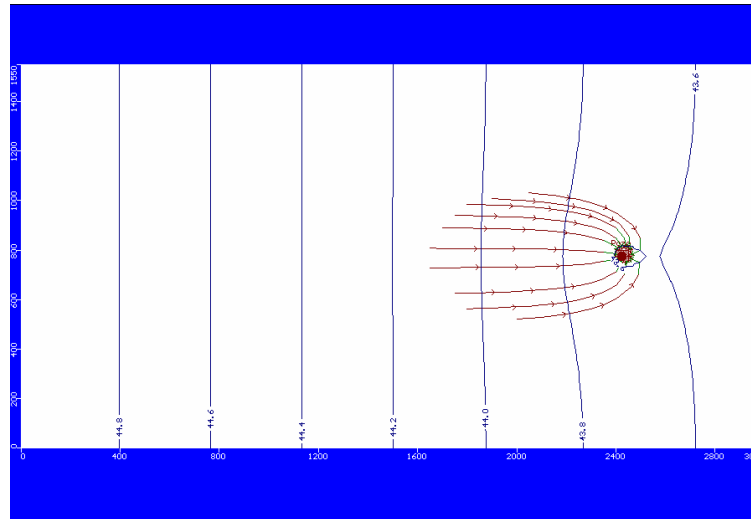


Problemas con mallas distorsionadas:.





PERIMETROS DE PROTECCION



CI66J

**INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO**

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



CI66J

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.

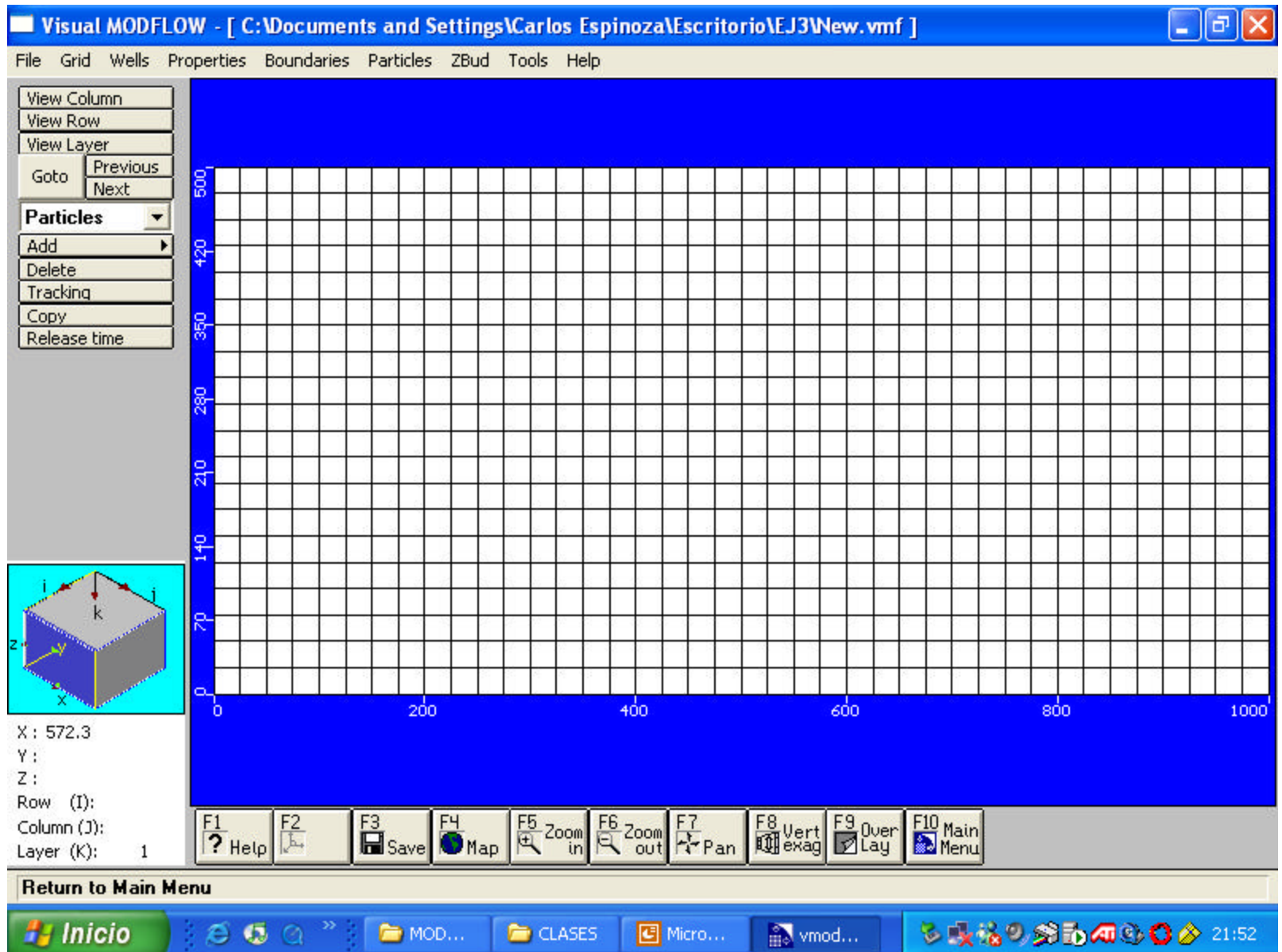
MODPATH puede ser utilizado para calcular líneas de flujo 3D y la posición de partículas en tiempos específicos.

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.



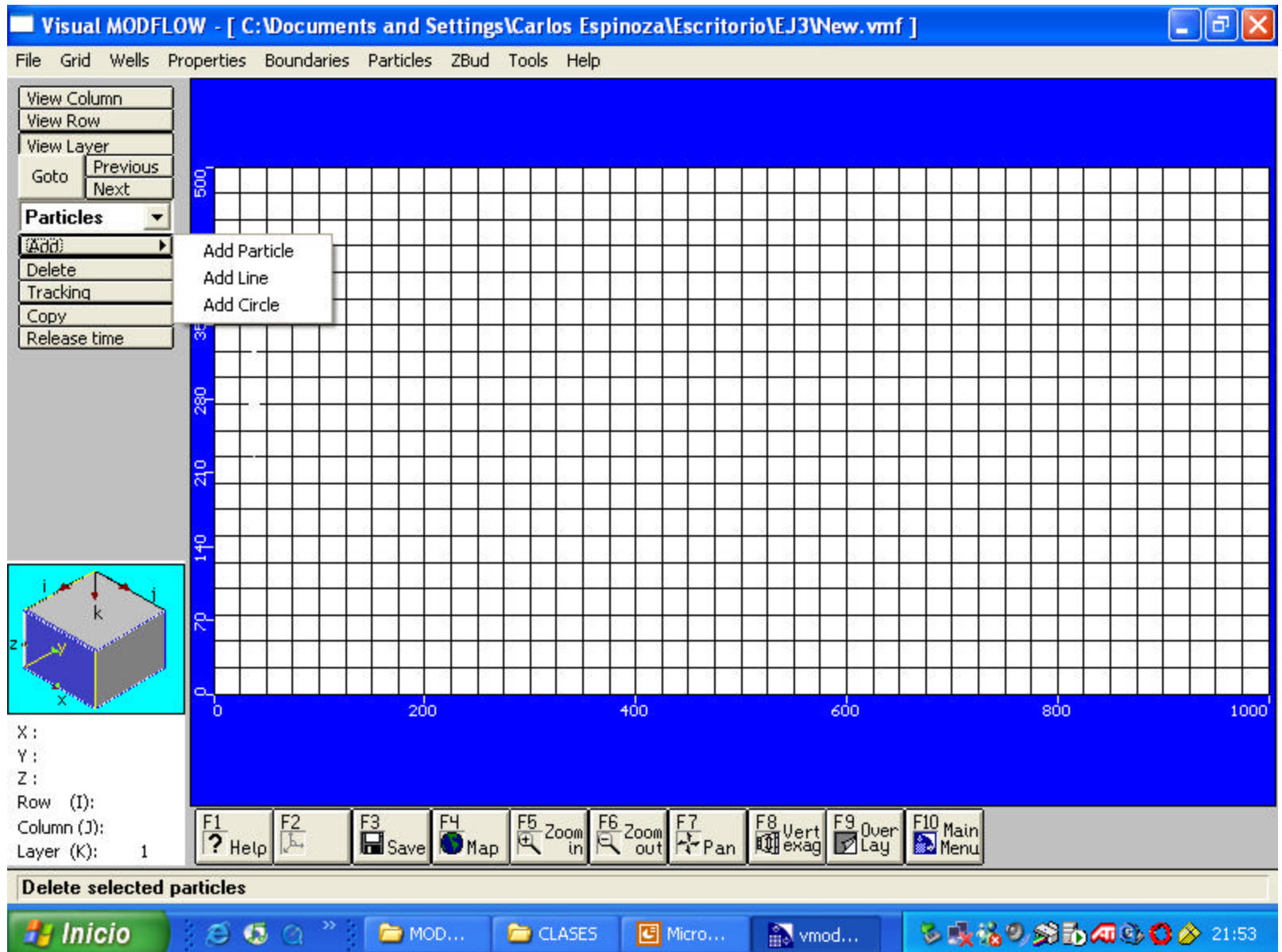
CI66J

MODPATH



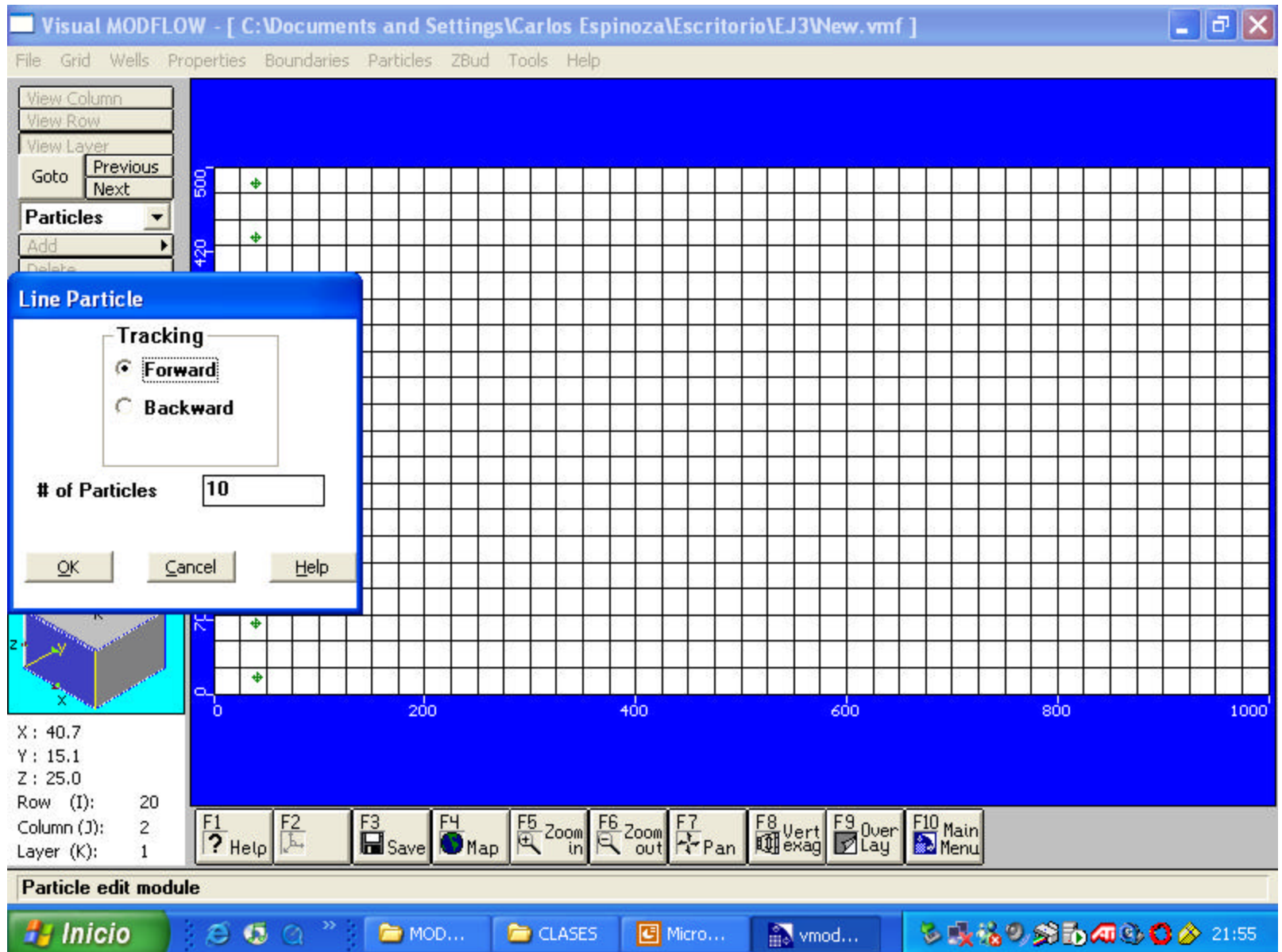
CI66J

MODPATH



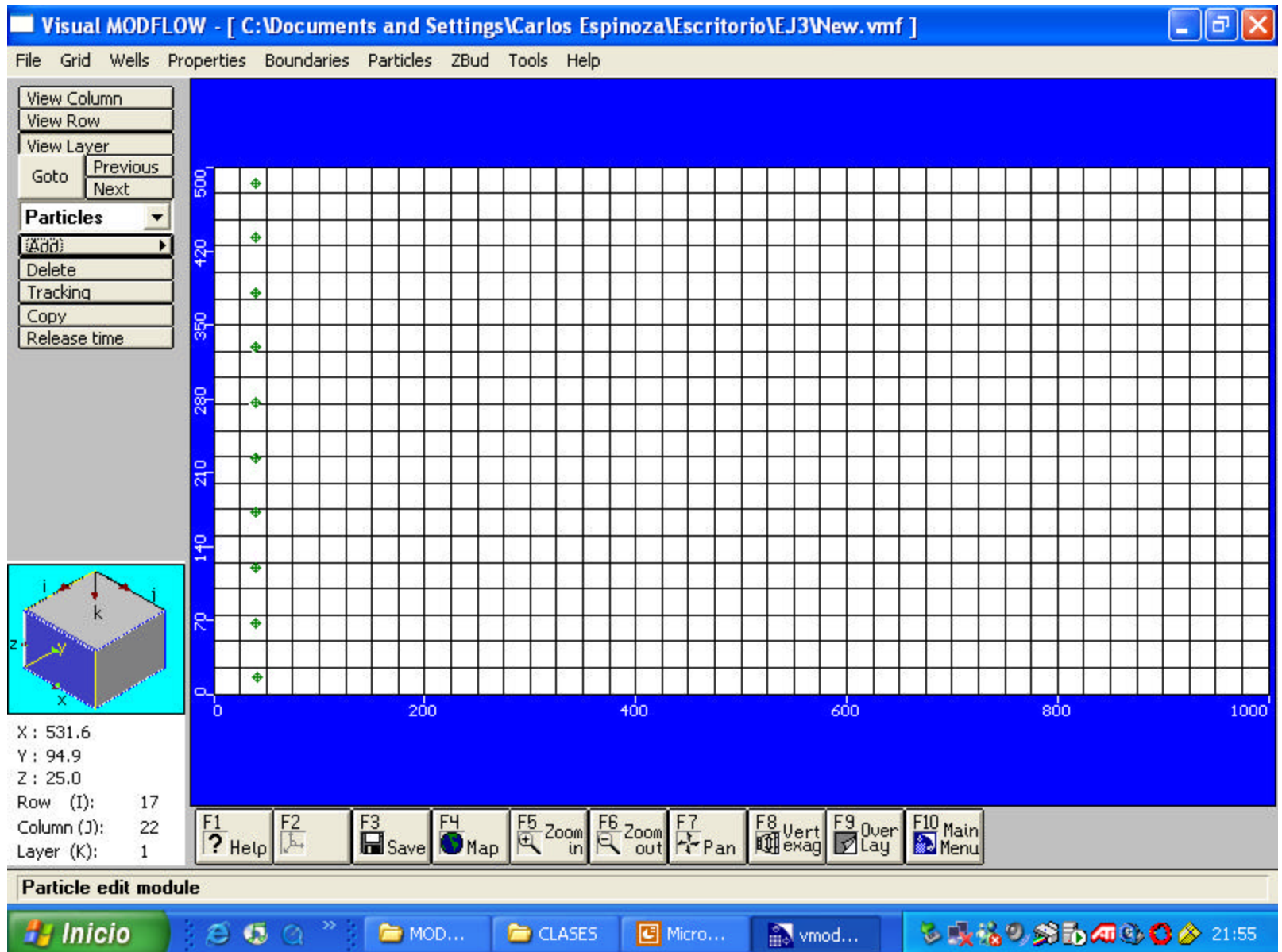
CI66J

MODPATH



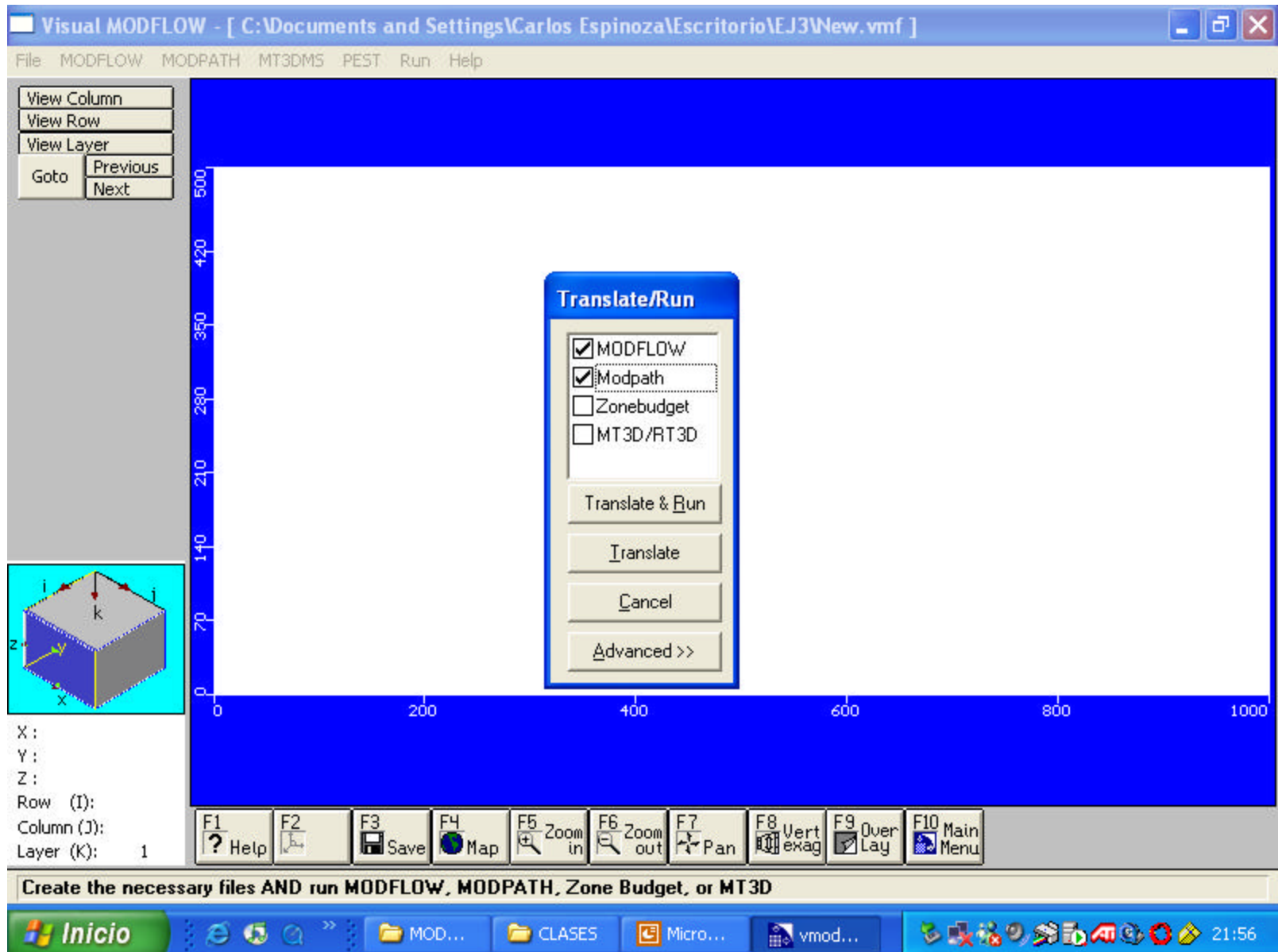
CI66J

MODPATH



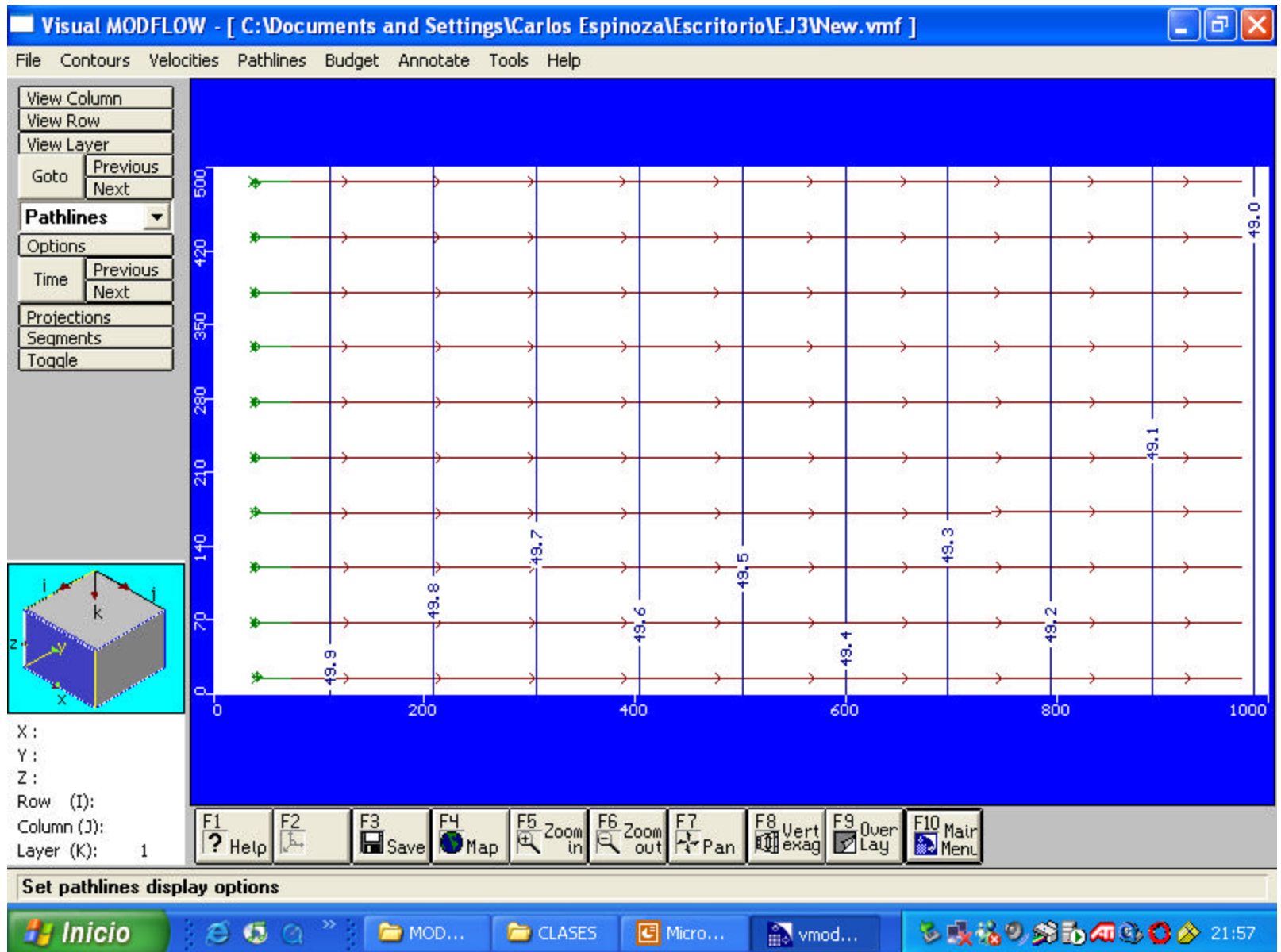
CI66J

MODPATH



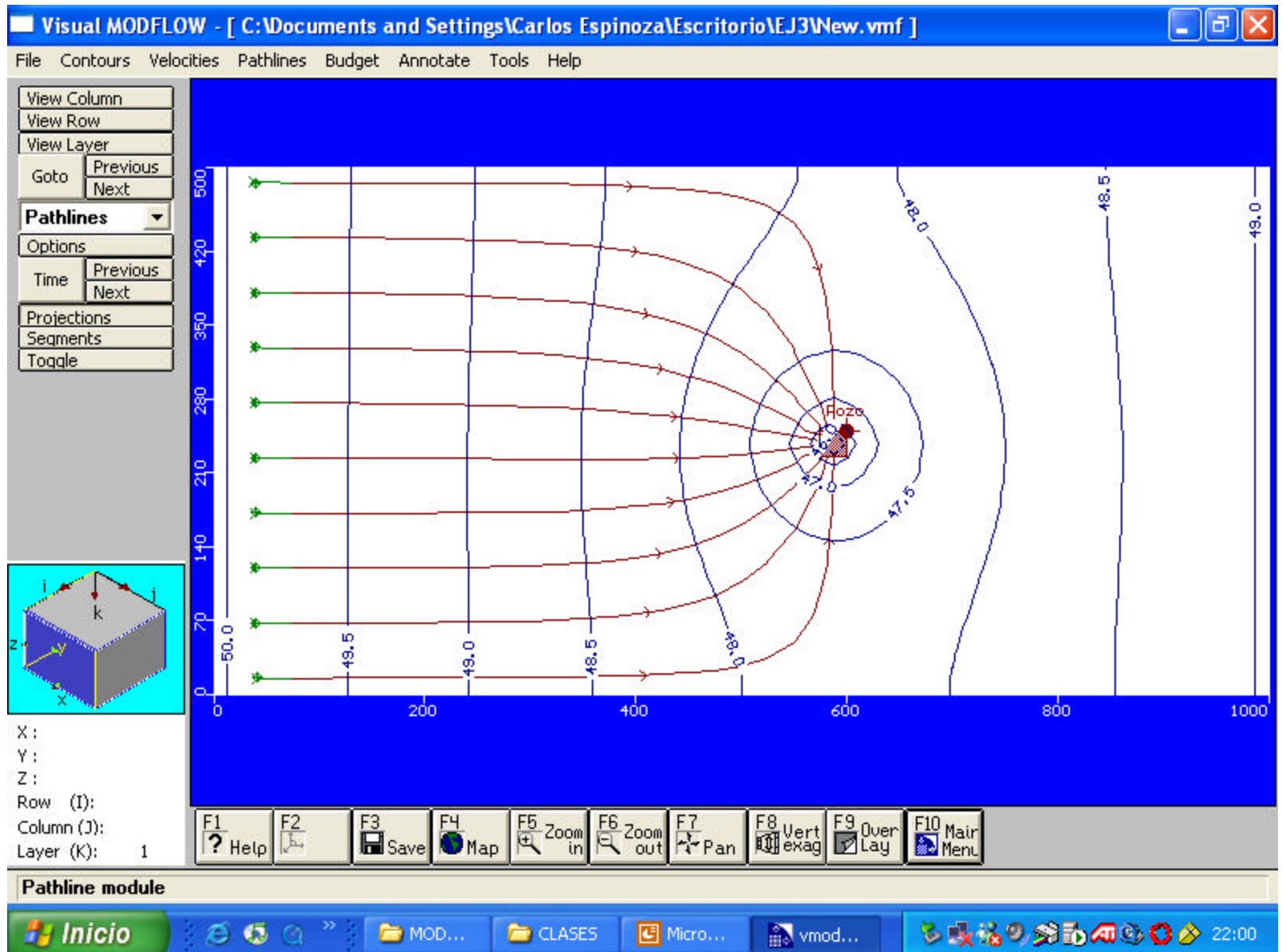
CI66J

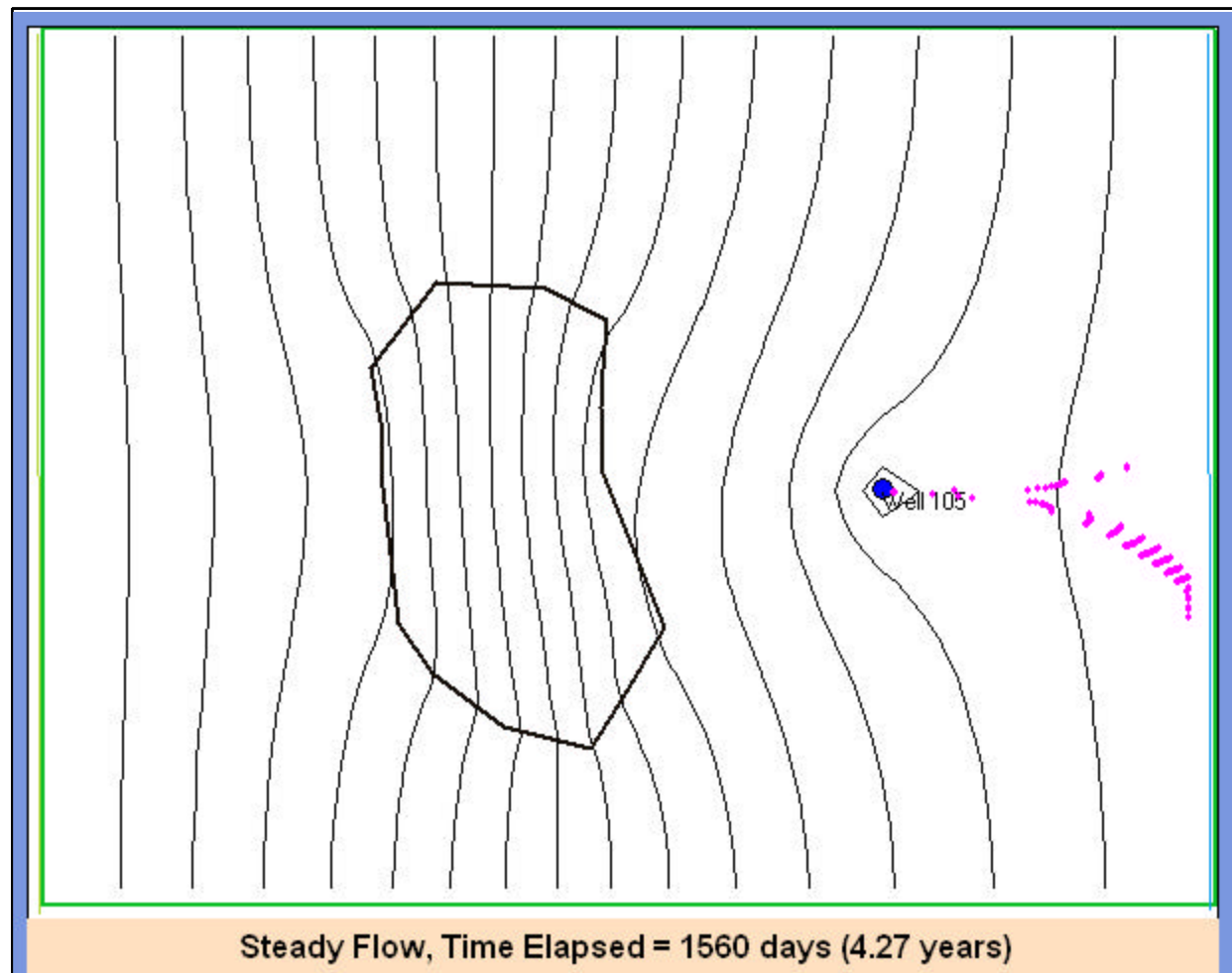
MODPATH

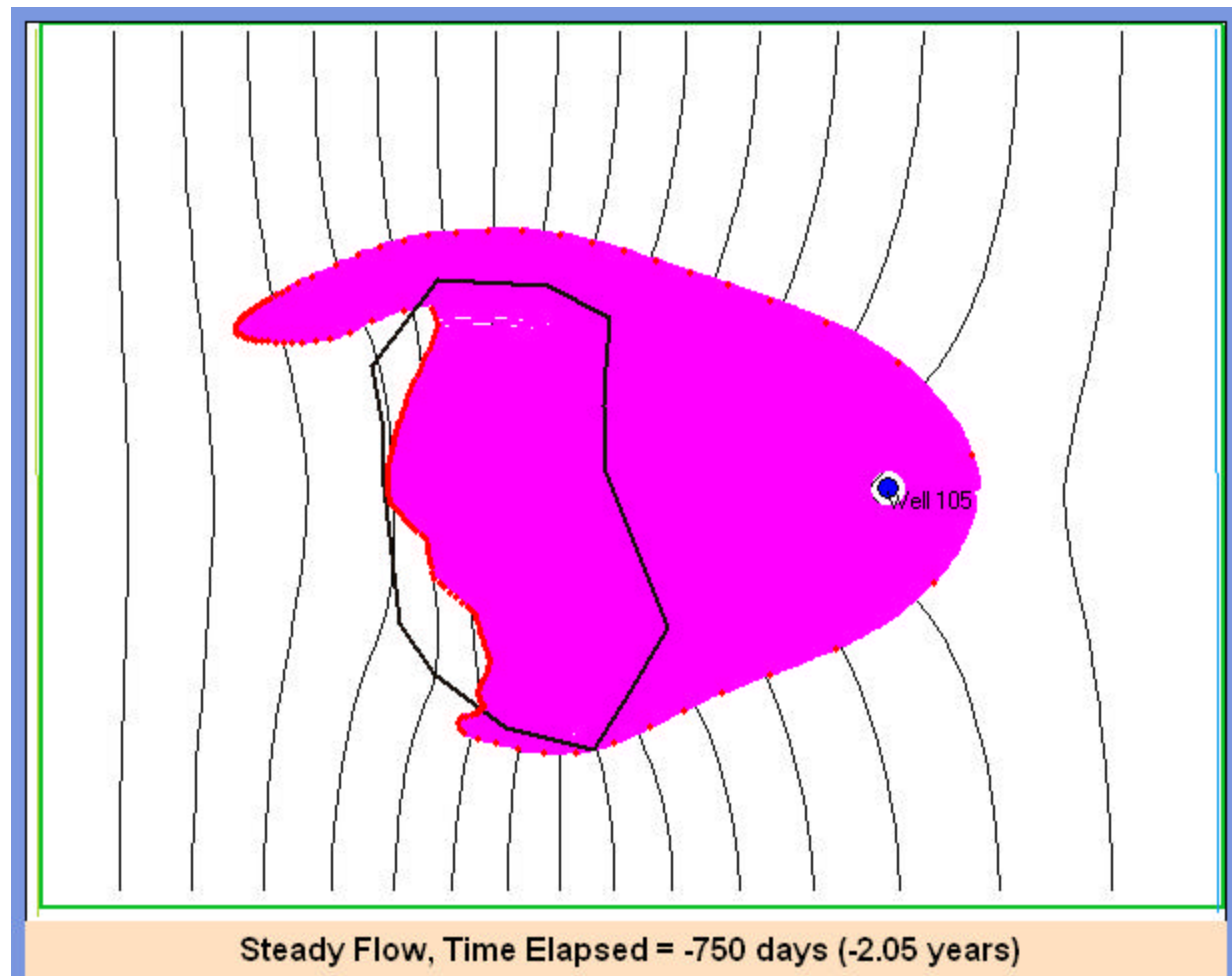


CI66J

MODPATH







CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



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**



CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

MT3D



DIFERENCIAS FINITAS

Expandir términos de ADE usando diferencias finitas:

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

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

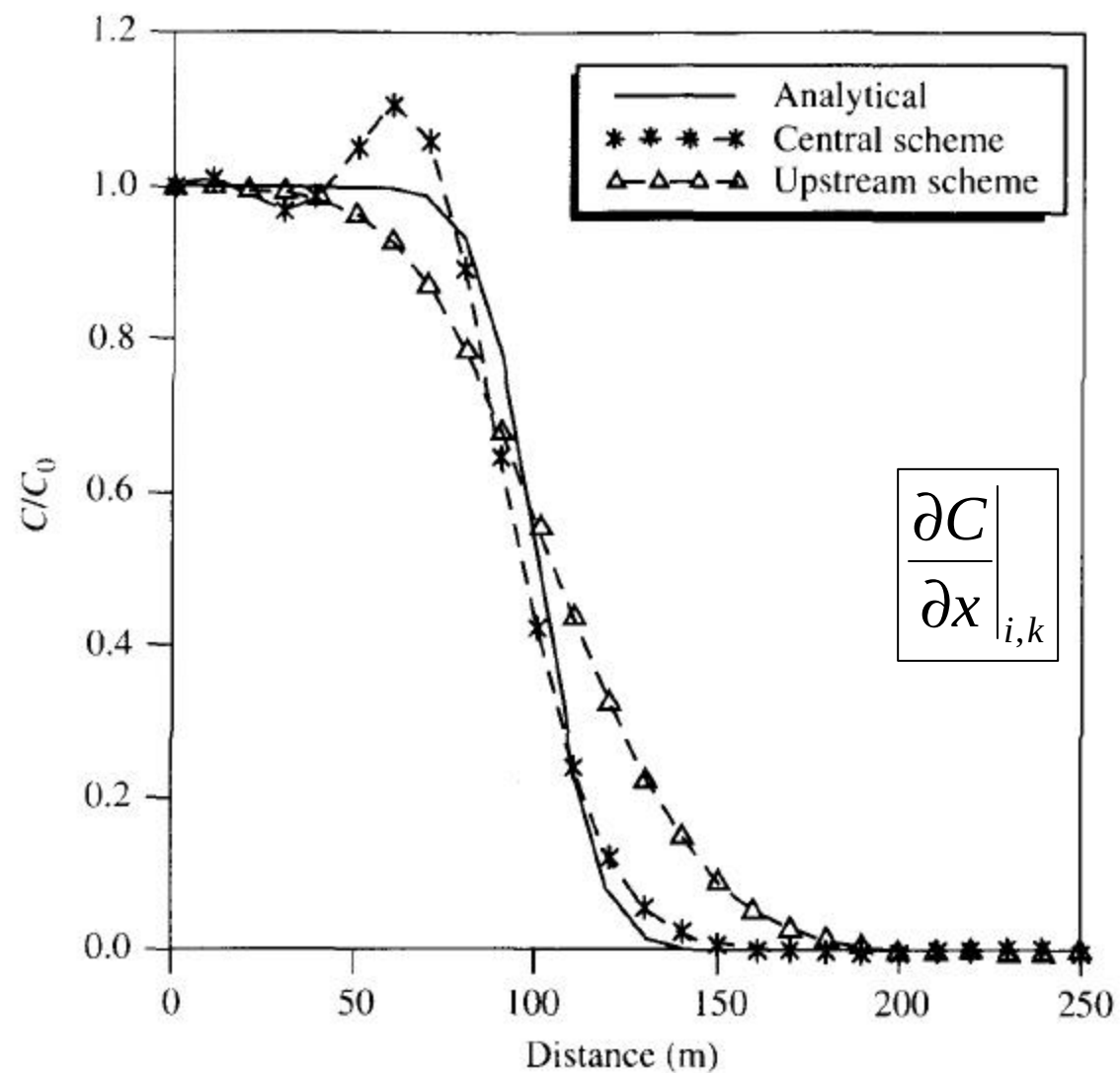
$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{i,k} \cong \frac{C_{i+1}^{k+1} - C_i^{k+1}}{\Delta x}$$

**ESQUEMA
EULERIANO**

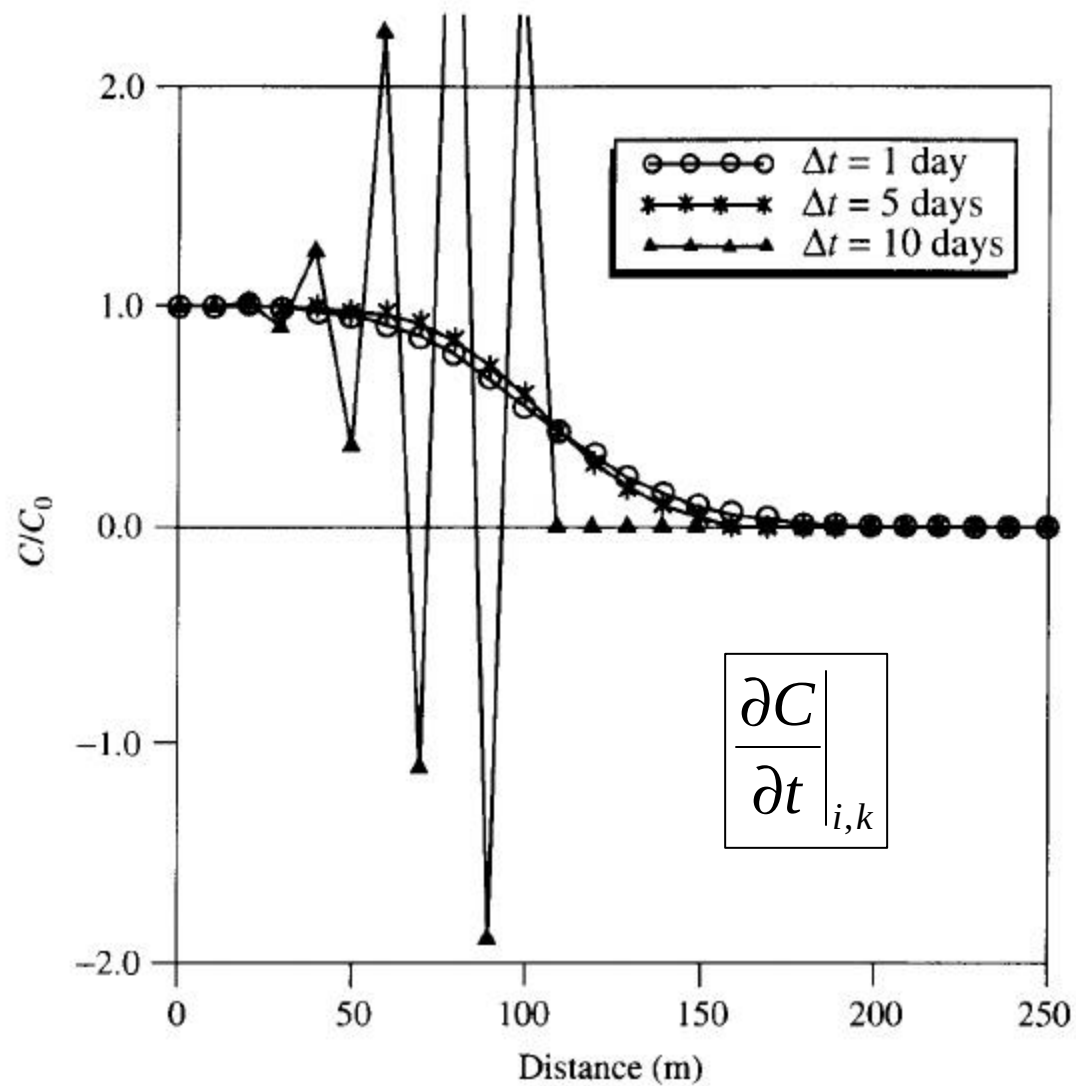
$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{i,k} \cong \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t}$$

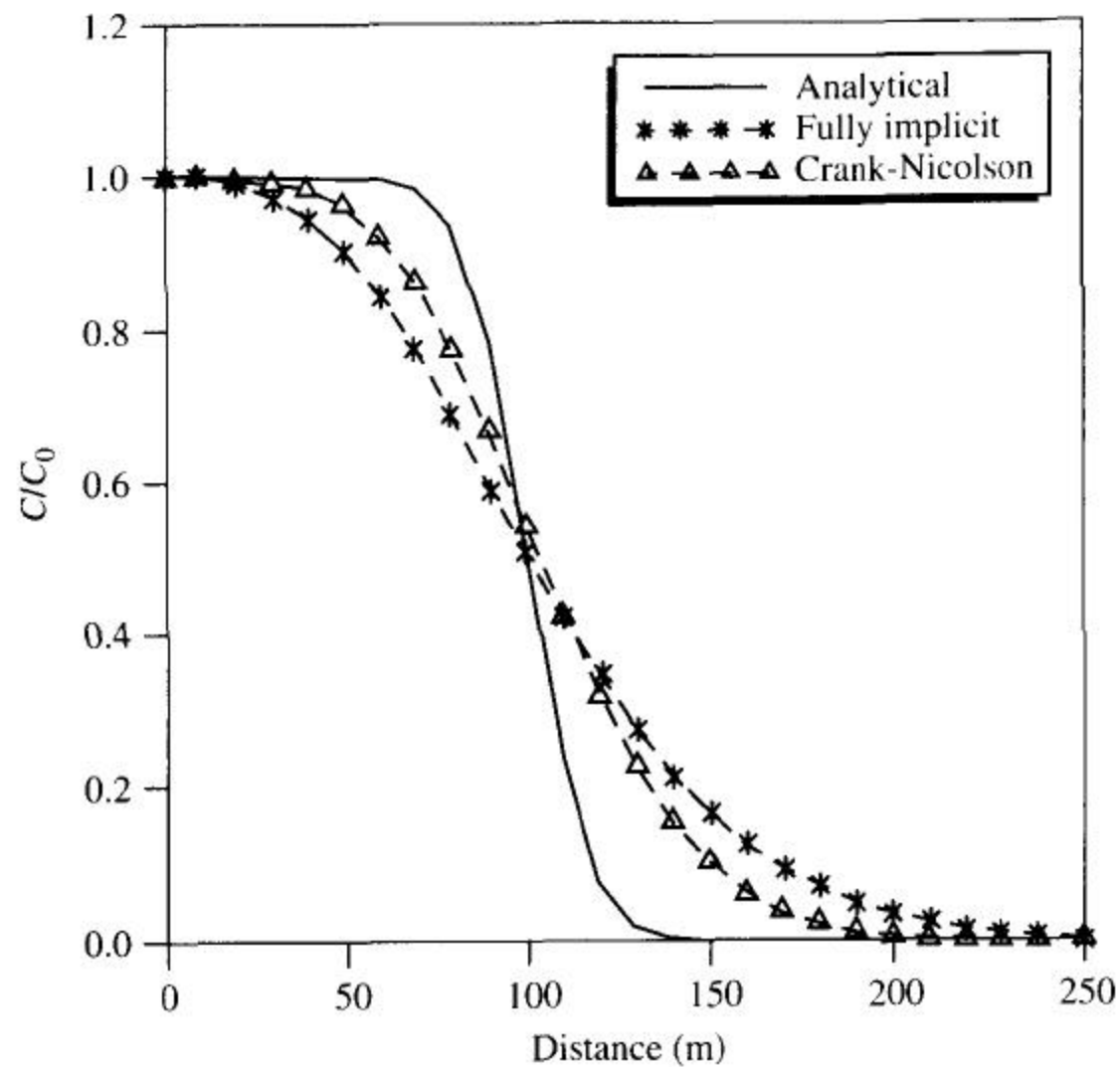


DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS



DIFERENCIAS FINITAS

DIFERENCIAS FINITAS

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

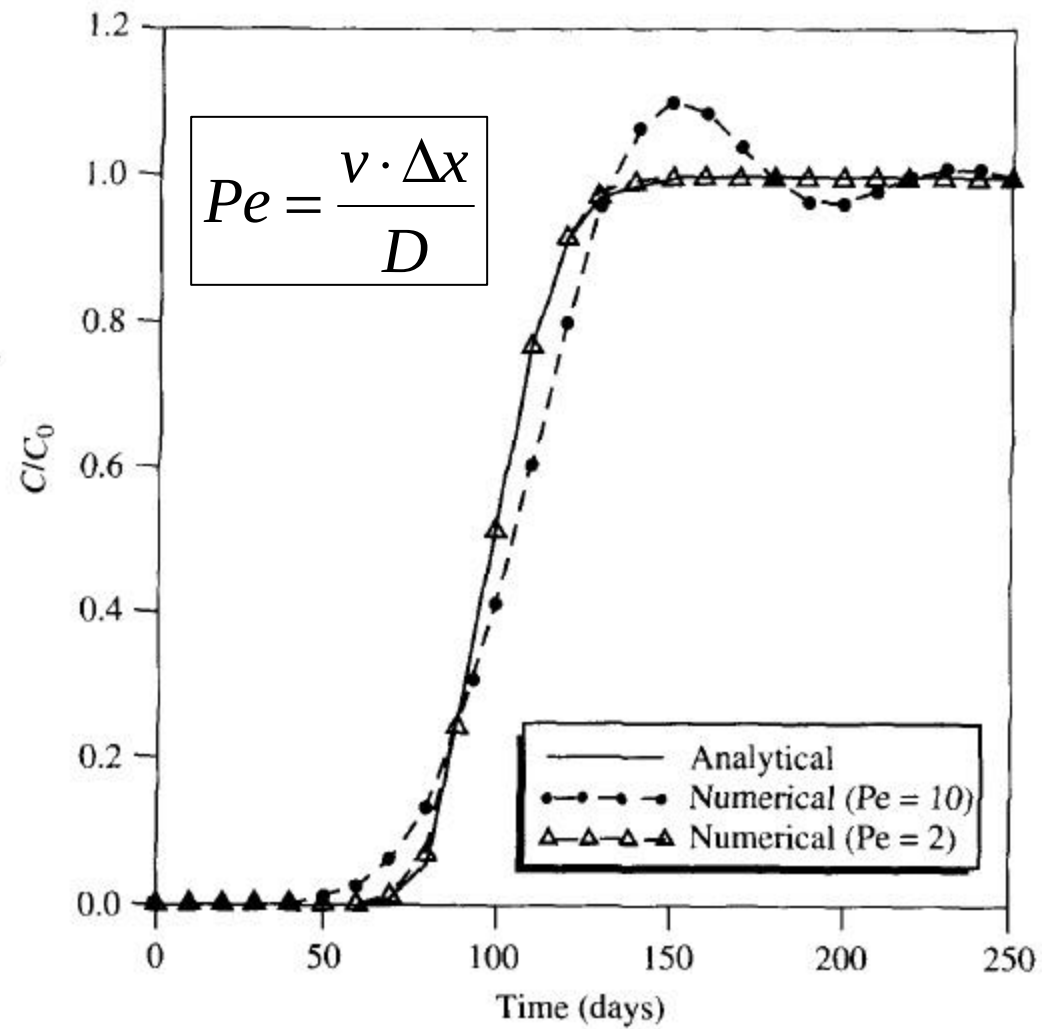
$$Pe = \frac{v \cdot \Delta x}{D}$$

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



CI66J

INTRODUCCION

ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION

TRANSPORTE ADVECTIVO

MODPATH

TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO

GENERAL

EULERIANO

LAGRANGIANO

EULERIANO - LAGRANGIANO

TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

RESUMEN

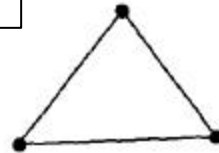
MT3D



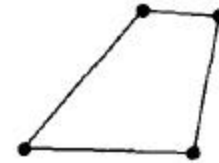
ELEMENTOS FINITOS

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.

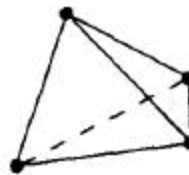
$$\hat{C}(x,t) = \sum_{j=1}^{NODOS} C_j(t) \cdot N_j(x)$$



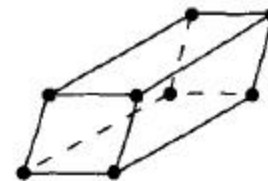
(a)



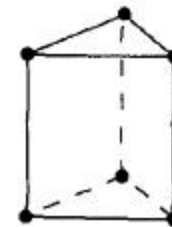
(b)



(c)



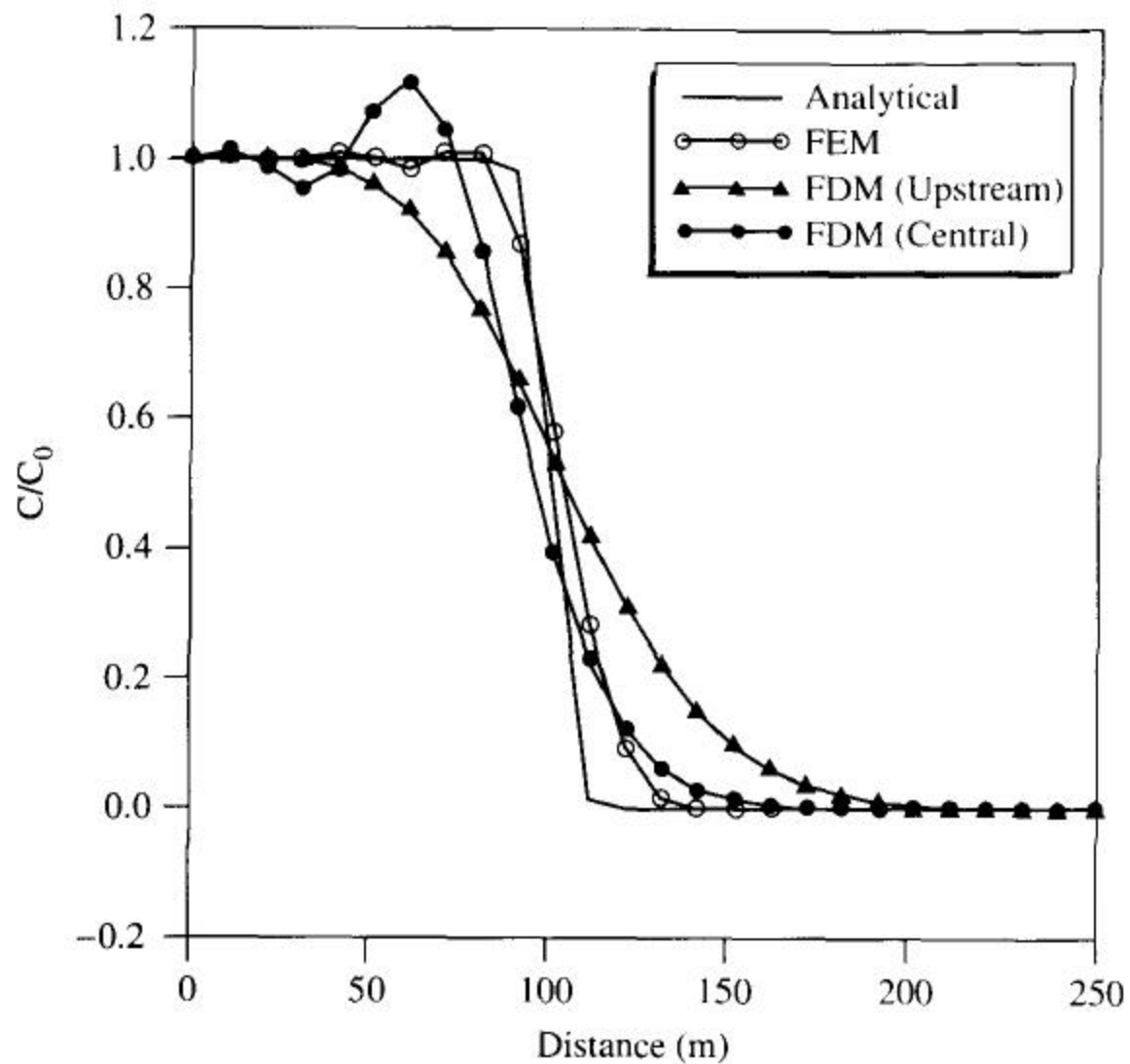
(d)



(e)



ELEMENTOS FINITOS



CI66J

INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
GENERAL
EULERIANO
LAGRANGIANO
EULERIANO - LAGRANGIANO
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)
RESUMEN
MT3D



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente

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.

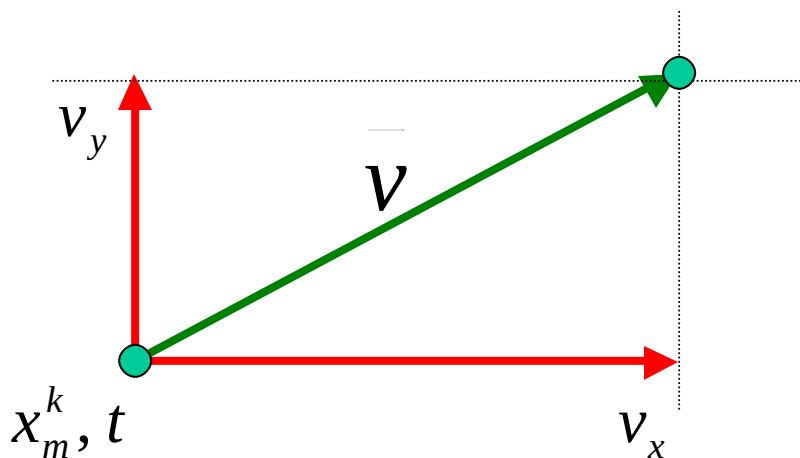
No presenta problemas de estabilidad; si presenta problemas de aproximación de la solución numérica, la que depende del número de partículas utilizadas en la modelación.



RANDOM WALK

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

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



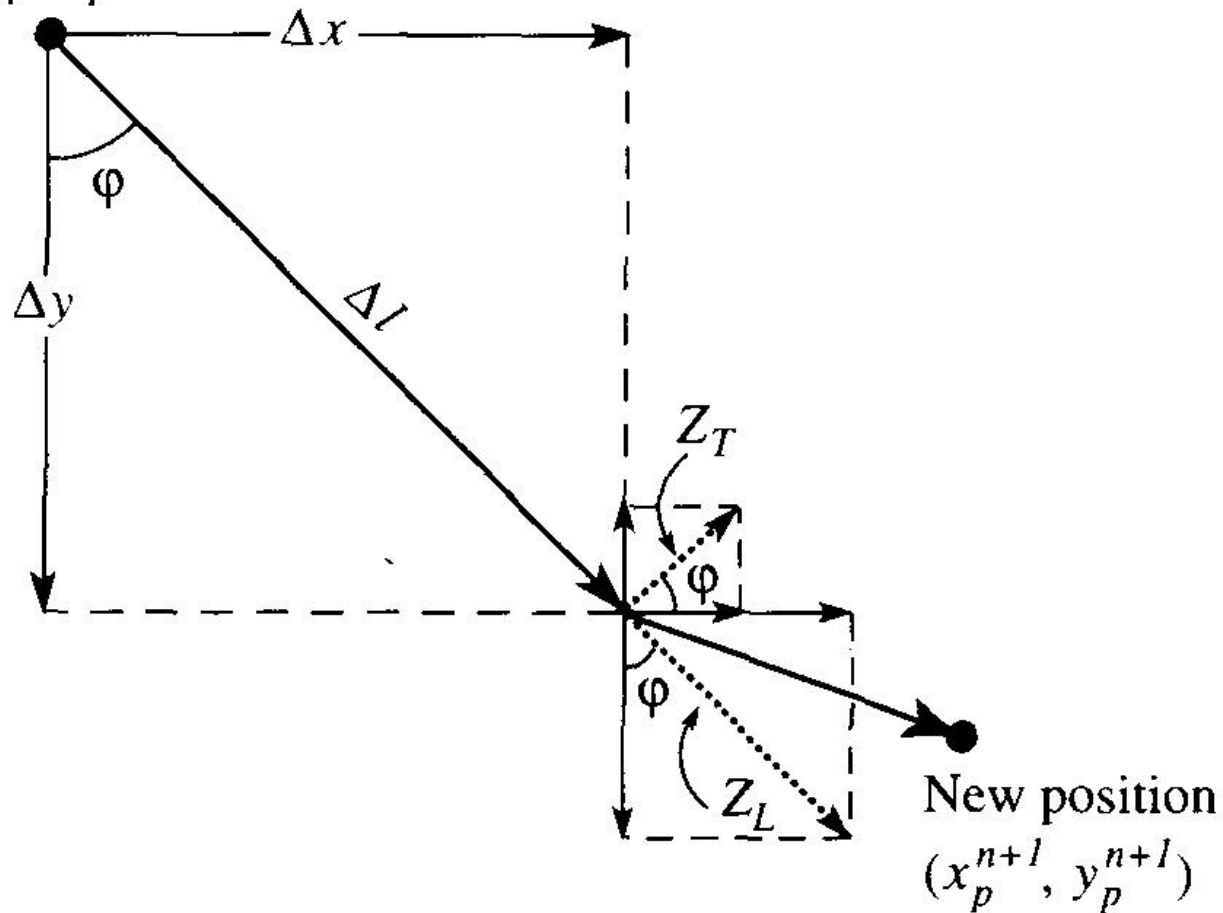
ESQUEMA
LAGRANGIANO

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



RANDOM WALK

Old position

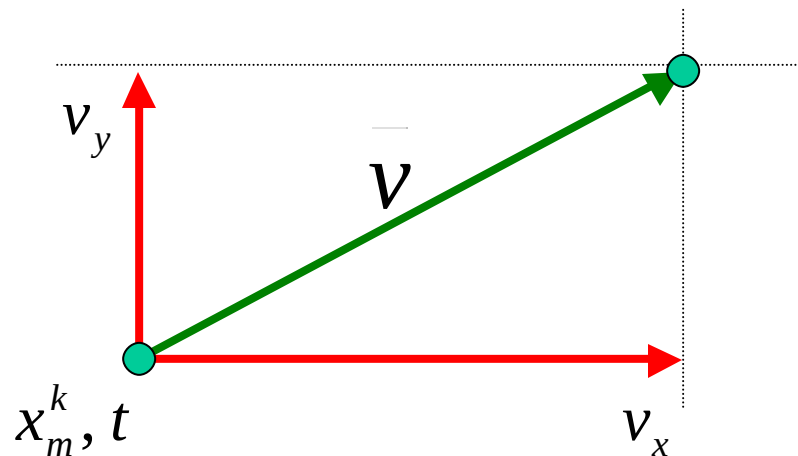
 (x_p^n, y_p^n) 

RANDOM WALK

Evaluación de término correctivo para velocidad:

$$v'_x = v_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y}$$

$$v'_y = v_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y}$$



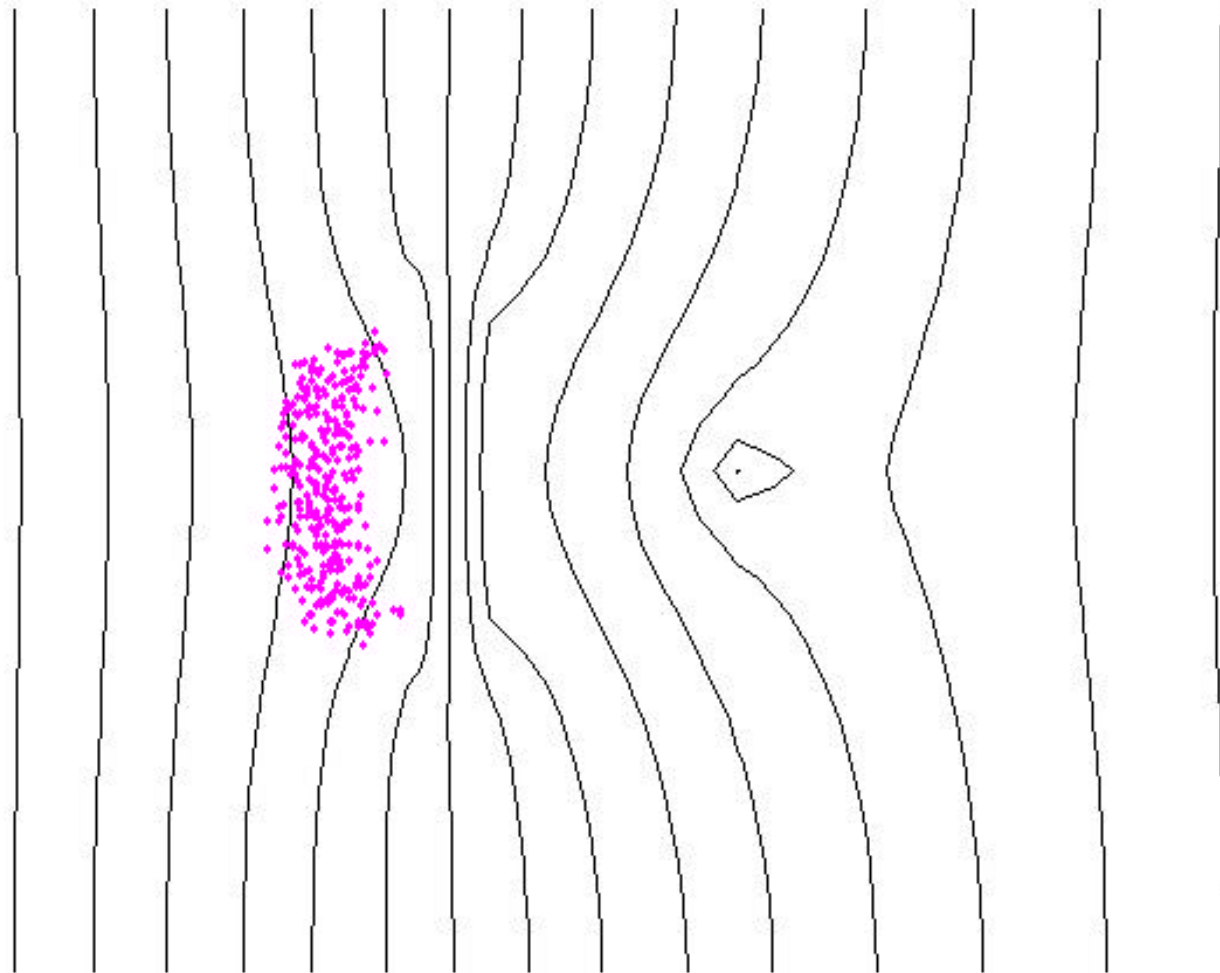
**ESQUEMA
LAGRANGIANO**

$$x_m^{k+1} = x_m^k + v'_x \cdot \Delta t + \sqrt{2 \cdot D_{xx} \cdot t} \cdot z$$



CI66J

RANDOM WALK



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente



CI66J

INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
GENERAL
EULERIANO
LAGRANGIANO
EULERIANO - LAGRANGIANO
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)
RESUMEN
MT3D



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.

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

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

$$D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{DC}{Dt}$$

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



MOC/MMOC/HMOC

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

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

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

Métodos se diferencian en como evalúan el término:

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



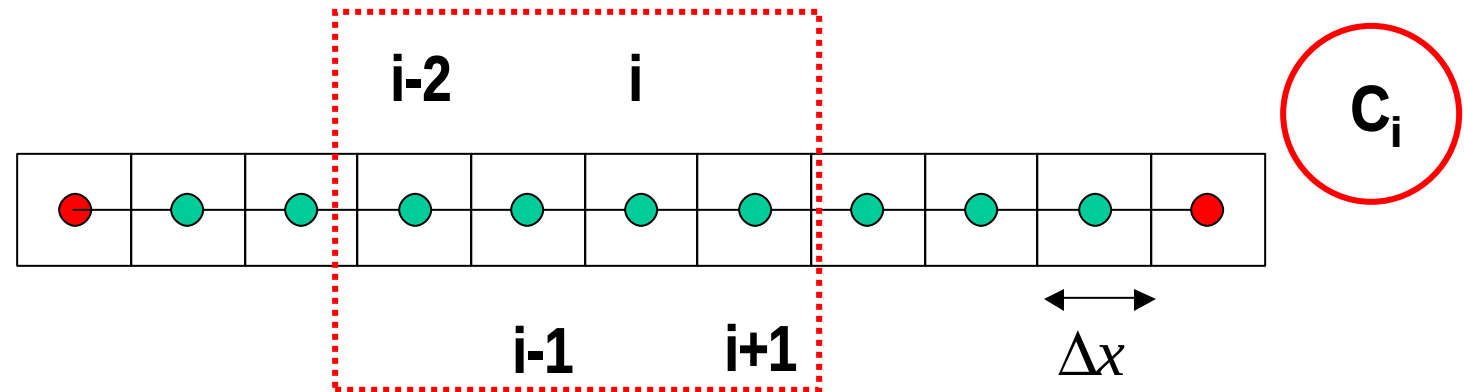
CI66J

INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
GENERAL
EULERIANO
LAGRANGIANO
EULERIANO - LAGRANGIANO
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)
RESUMEN
MT3D



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

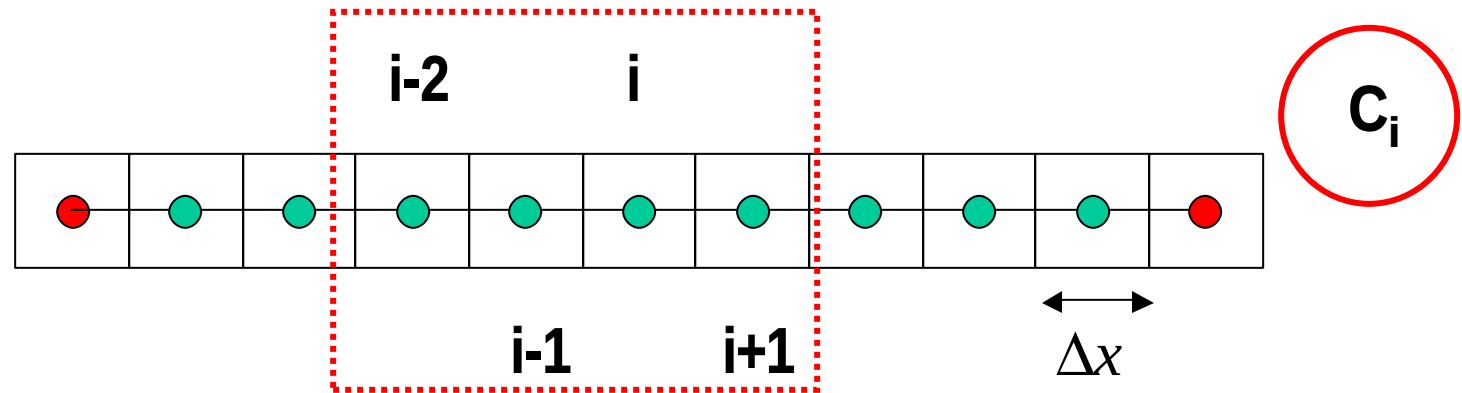
Es un método basado en elementos o diferencias finitas de alto orden. Conservan masa y requieren sistemas especiales para suprimir oscilaciones numéricas.



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



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)



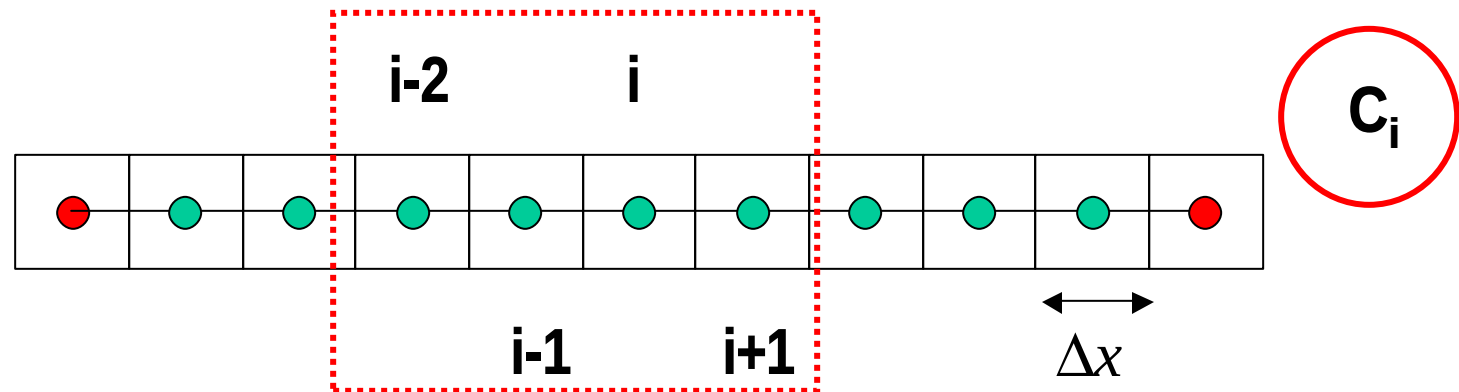
$$C_i^{n+1} = C(0, \Delta t) = C(-v \cdot \Delta t, 0)$$

$$C(x, 0) = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot c^3$$



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

$$C(x,0) = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot c^3$$



$$C(0,0) = C_i \quad a \quad x = 0$$

$$C(-2 \cdot \Delta x, 0) = C_{i-2} \quad a \quad x = -2 \cdot \Delta x$$

$$C(-\Delta x, 0) = C_{i-1} \quad a \quad x = -\Delta x$$

$$C(\Delta x, 0) = C_{i+1} \quad a \quad x = \Delta x$$



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

$$C(x,0) = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot x^3$$

$$a = C_i$$

$$b = \frac{1}{6 \cdot \Delta x} \cdot (2 \cdot C_{i+1} + 3 \cdot C_i - 6 \cdot C_{i-1} + C_{i-2})$$

$$c = \frac{1}{2 \cdot (\Delta x)^2} \cdot (C_{i+1} - 2 \cdot C_i + C_{i-1})$$

$$d = \frac{1}{6 \cdot (\Delta x)^3} \cdot (C_{i+1} - 3 \cdot C_i + 3 \cdot C_{i-1} - C_{i-2})$$



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

Solución explícita de tercer orden.

$$C_i^{n+1} = C(0, \Delta t) = C(-v \cdot \Delta t, 0)$$

$$C(x, 0) = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot c^3$$

$$C_i^{n+1} = C_i^n - Cr \cdot (C_{i+1/2}^n - C_{i-1/2}^n)$$

$$Cr = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x}$$



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)

Solución explícita de tercer orden.

$$Cr = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x}$$

$$C_i^{n+1} = C_i^n - Cr \cdot (C_{i+1/2}^n - C_{i-1/2}^n)$$

$$C_{i+1/2} = \frac{C_{i+1} + C_i}{2} - Cr \cdot \frac{C_{i+1} - C_i}{2} - (1 - Cr^2) \cdot \frac{C_{i+1} - 2 \cdot C_i + C_{i-1}}{6}$$

$$C_{i-1/2} = \frac{C_i + C_{i-1}}{2} - Cr \cdot \frac{C_i - C_{i-1}}{2} - (1 - Cr^2) \cdot \frac{C_i - 2 \cdot C_{i-1} + C_{i-2}}{6}$$



GRADIENTE

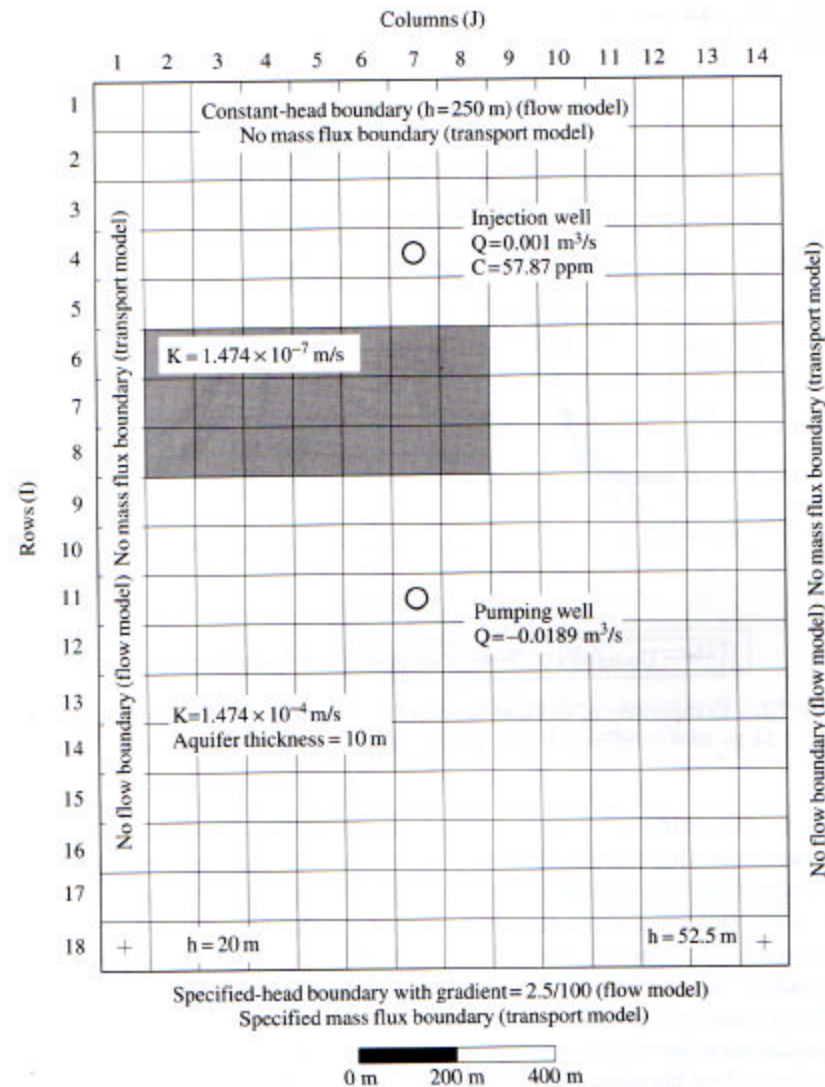


CURVATURA



CI66J

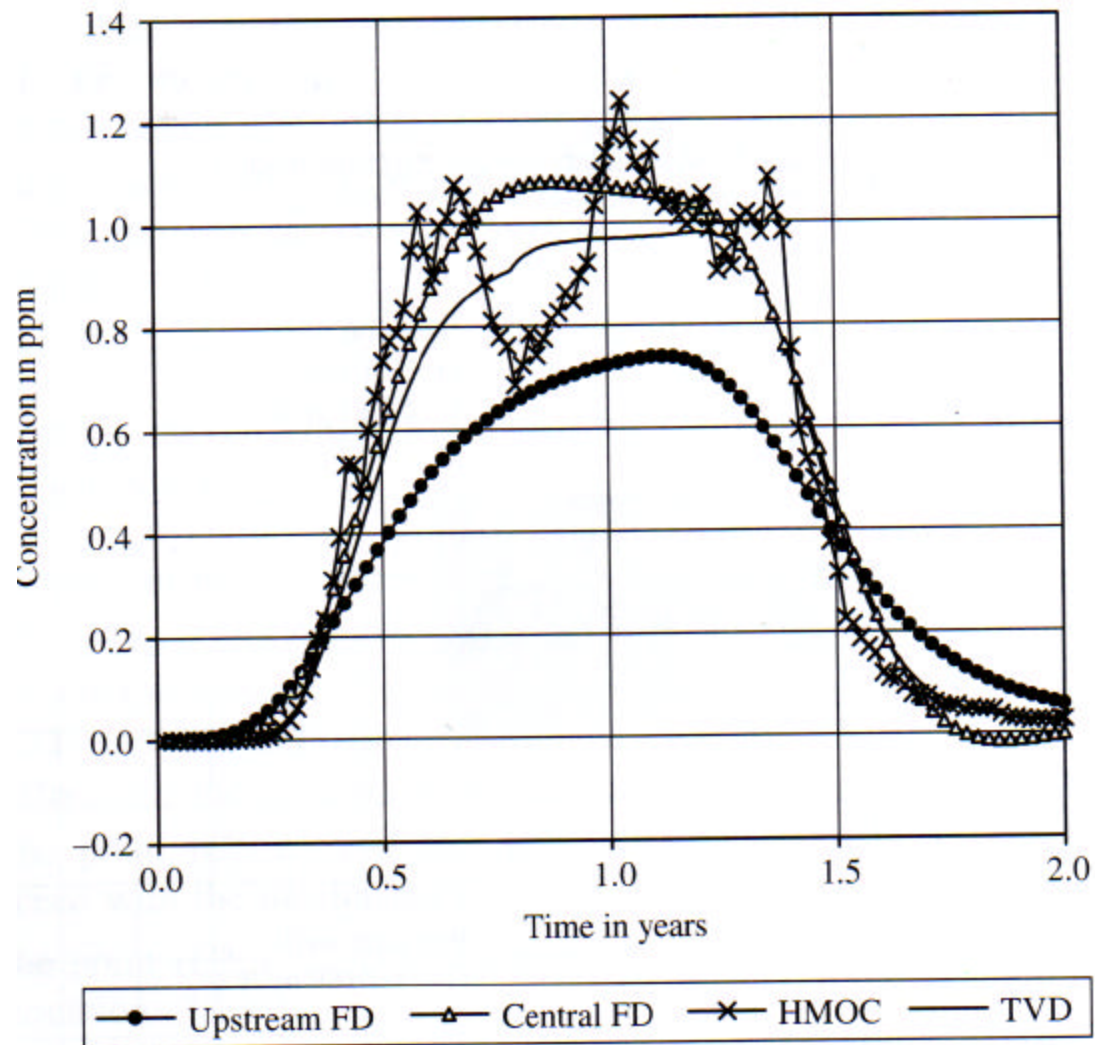
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)



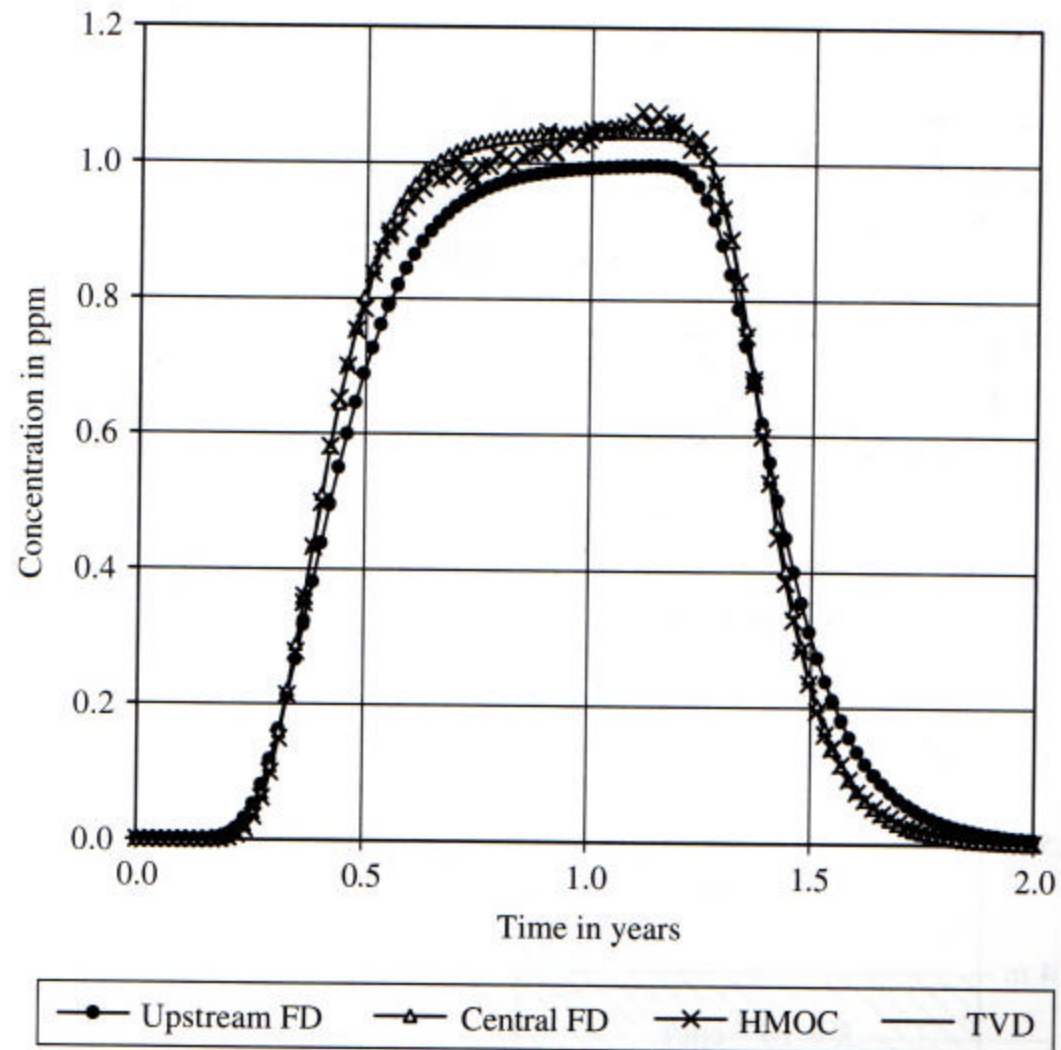
Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)



TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)



CI66J

INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
GENERAL
EULERIANO
LAGRANGIANO
EULERIANO - LAGRANGIANO
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)
RESUMEN
MT3D



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente



Advection Method	Advantages	Disadvantages	Appropriate Conditions
Implicit Finite Difference (with implicit GCG solver)	Computationally efficient Minimal mass balance errors Faster than the explicit method	Numerical dispersion	Dispersed fronts Peclet < 2
Explicit Finite Difference (without implicit GCG solver)	Computationally efficient Minimal mass balance errors	Numerical dispersion	Dispersed fronts Peclet < 2
Method of Characteristics	Low numerical dispersion	Not mass conservative Potential for mass balance errors	Non-dispersed fronts Peclet > 10
Modified Method of Characteristics	Computationally efficient	Numerical dispersion Not mass conservative Potential for mass balance errors	Dispersed fronts Peclet < 0.1
Hybrid Method of Characteristics	Computationally efficient Low numerical dispersion	Must select adaptive criterion Not mass conservative Potential for mass balance errors	All conditions

CI66J

INTRODUCCION
ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION
TRANSPORTE ADVECTIVO
MODPATH
TRANSPORTE ADVECTIVO-DISPERSIVO
GENERAL
EULERIANO
LAGRANGIANO
EULERIANO - LAGRANGIANO
TOTAL-VARIATION-DIMINISHING (TVD)
RESUMEN

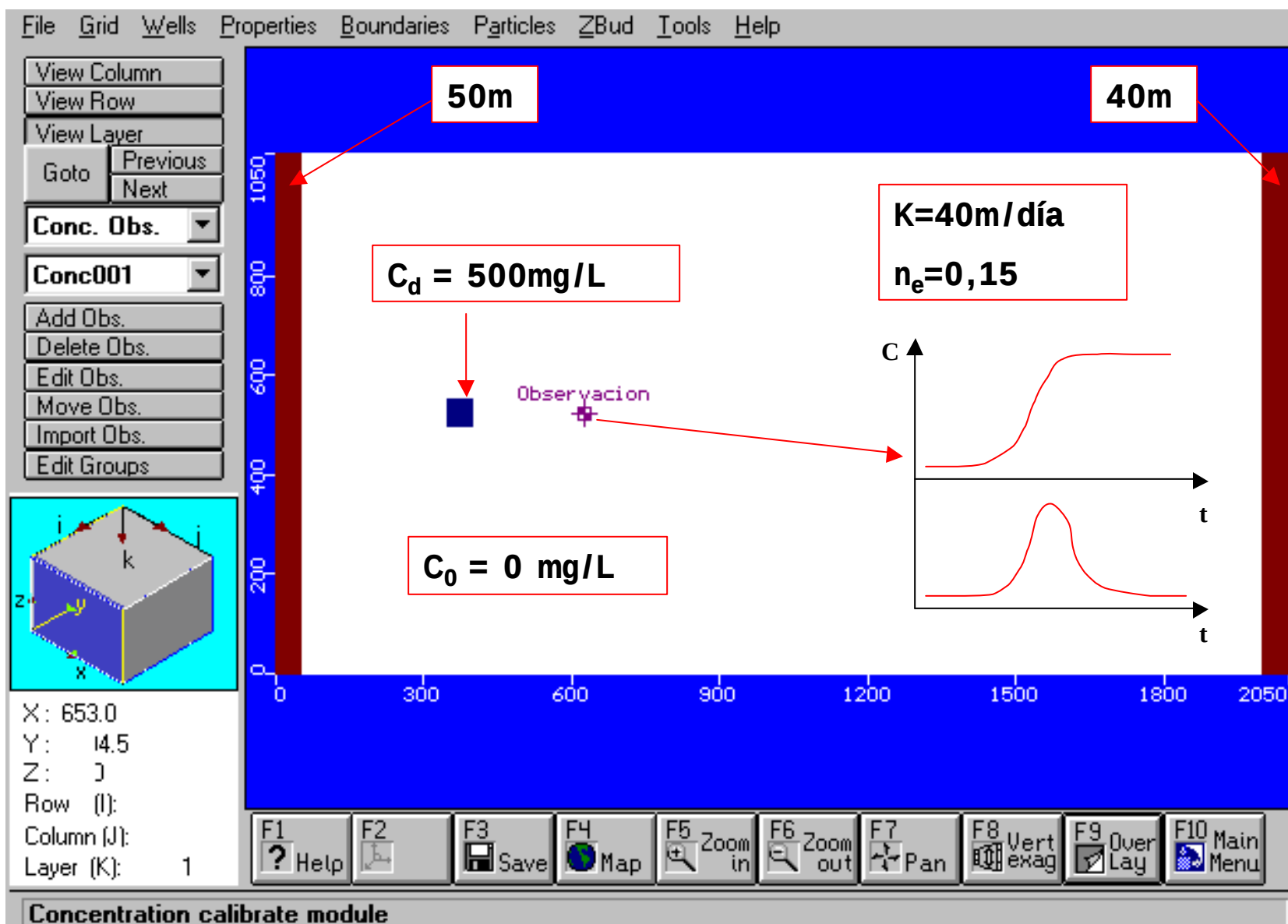
MT3D



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente

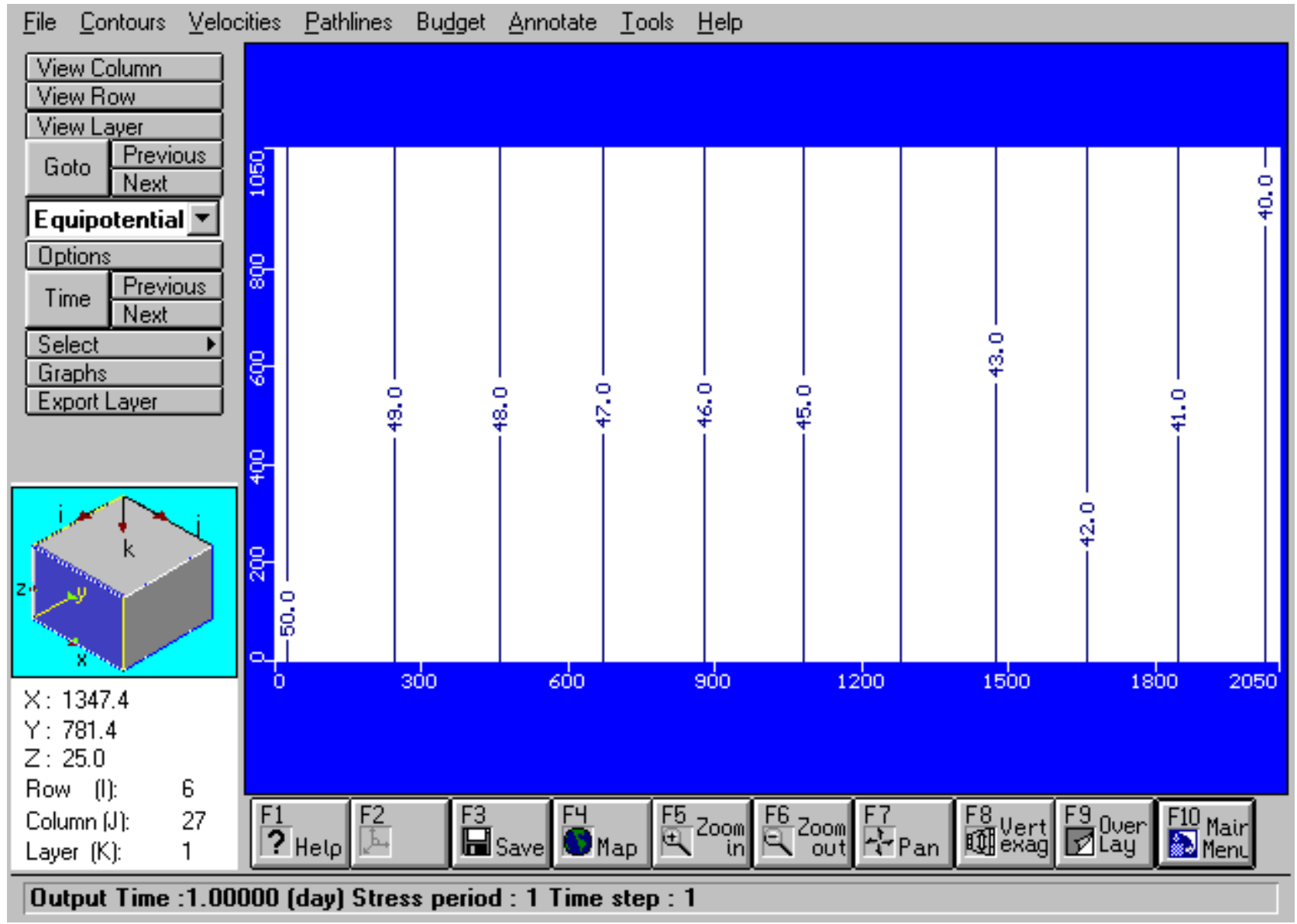
CI66J

MODFLOW - MT3D



CI66J

MODFLOW - MT3D



Ecuación Advección Dispersión (ADE)

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Dispersión Hidrodinámica

$$D_L = a_L \cdot v_i + D^*$$

$$D_T = a_T \cdot v_i + D^*$$

Dispersión Mecánica

$$D_{mL} = a_L \cdot v_i$$

a_L : Dispersividad

v_i : Velocidad en i

Difusión Efectiva

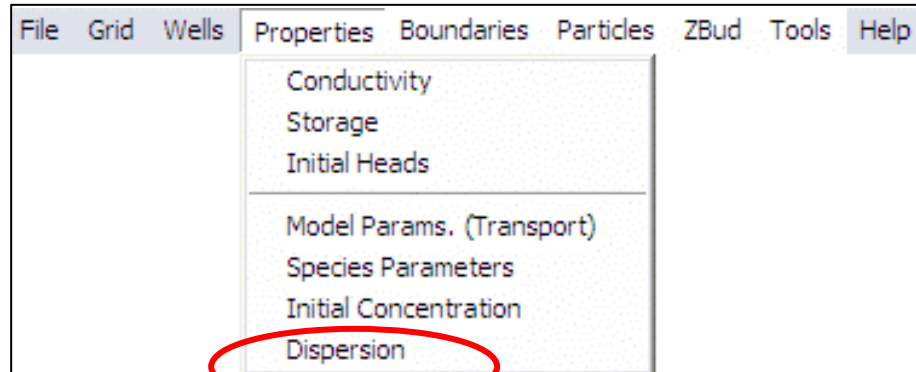
$$D^* = w \cdot D_d$$

w : Tortuosidad

D_d : Difusión Molecular



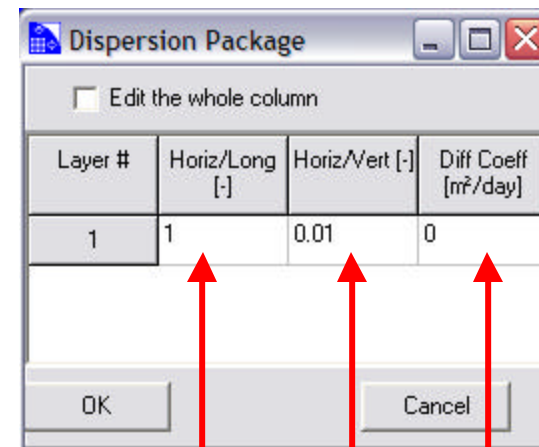
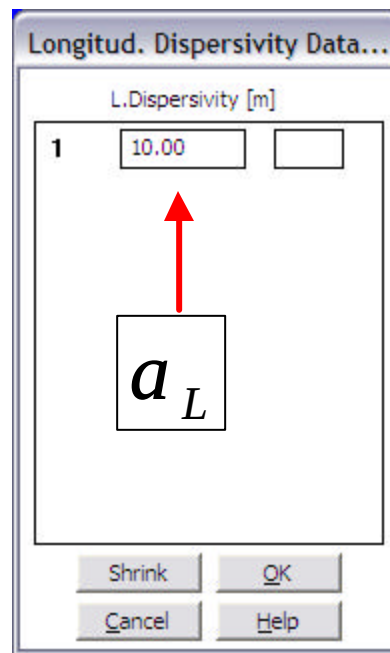
MODFLOW - MT3D



Dispersión Hidrodinámica

$$D_L = a_L \cdot v_i + D^*$$

$$D_T = a_T \cdot v_i + D^*$$



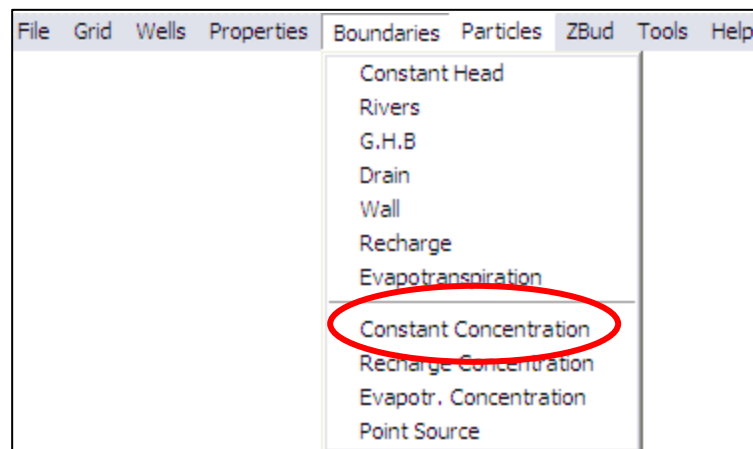
$$\frac{a_L}{a_T}$$

$$\frac{a_L}{a_V}$$

$$D^*$$



MODFLOW - MT3D



The 'Edit Constant Concentration Property' dialog box is shown. It includes a 'Property #' field set to 1, a 'Multiply values by:' field set to 1, and a 'Copy schedule from:' field set to 'EditCopyF'. Below these fields is a table with the following data:

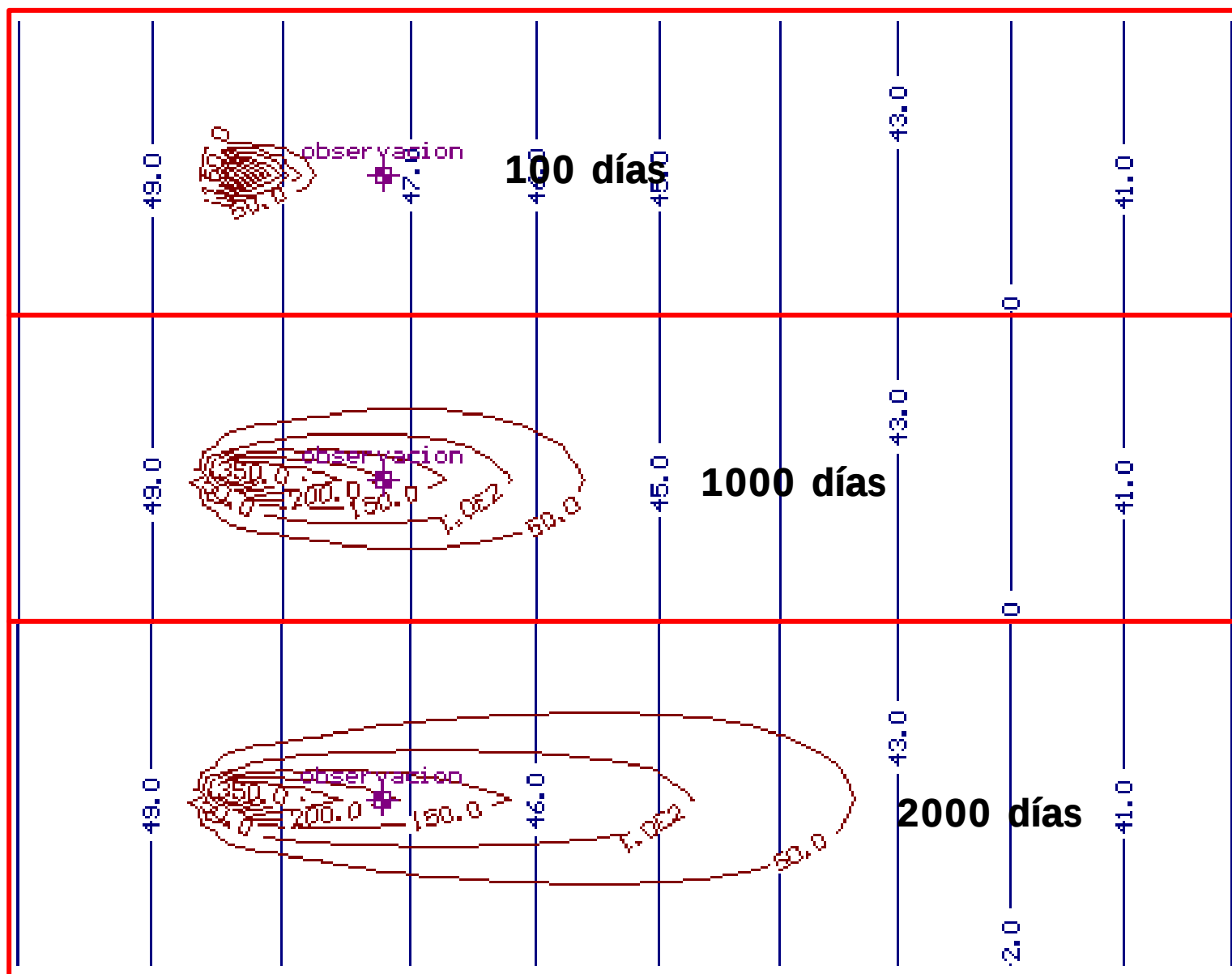
Start Time [day]	Stop Time [day]	Conc001 [mg/L]
0	100	500
100	200	0
200	300	0
300	400	0
400	500	0
500	600	0
600	700	0
700	800	0
800	900	0
900	1000	0
1000	1100	0

At the bottom of the dialog box are 'OK' and 'Cancel' buttons.



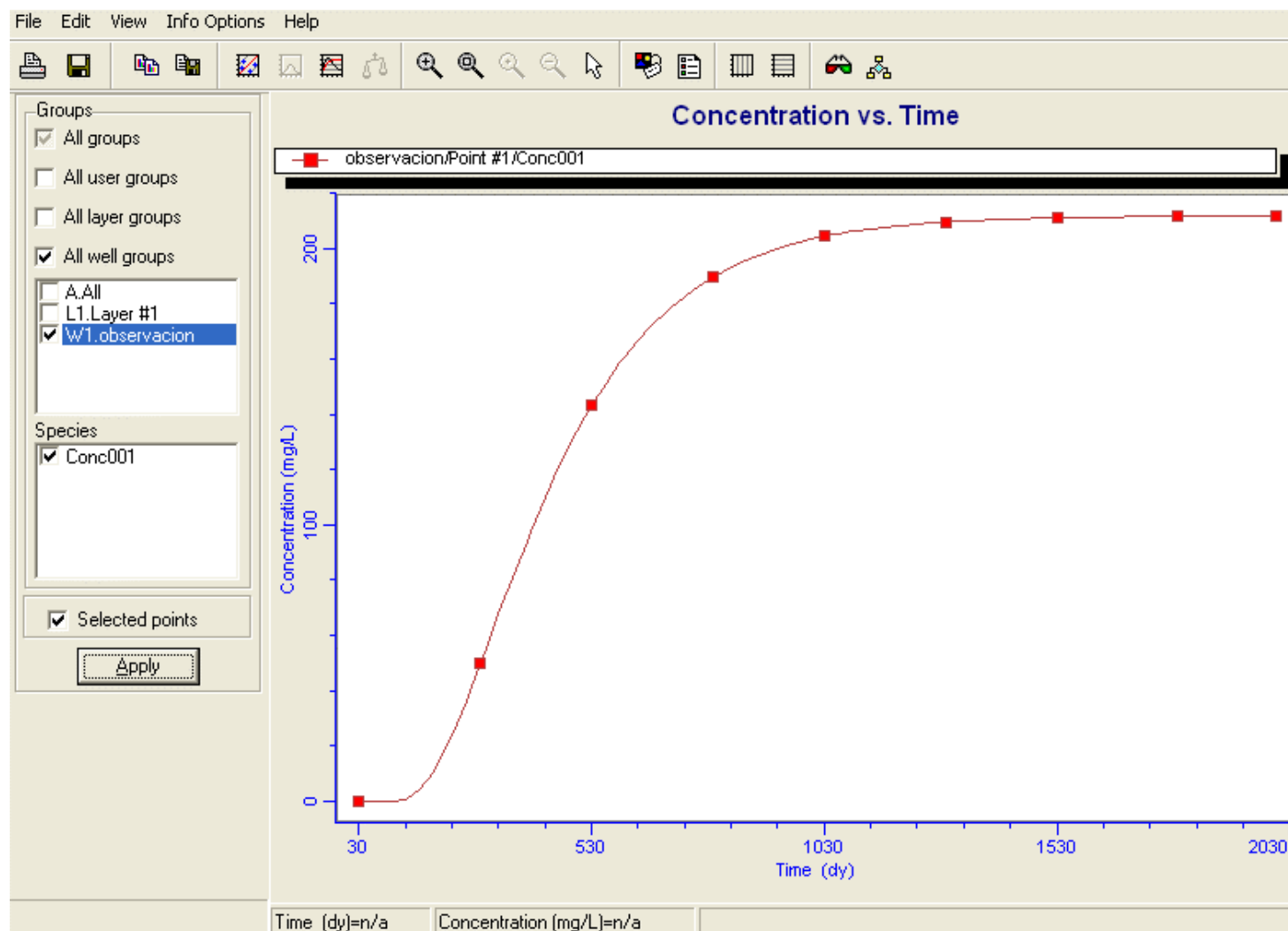
CI66J

PLUMA CONSERVATIVA, DESCARGA CONTINUA



CI66J

POZO OBSERVACION, DESCARGA CONTINUA



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente

COMPUESTO NO CONSERVATIVO DECAIMIENTO DE PRIMER ORDEN

Ecuación Advección Dispersión (ADE)

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

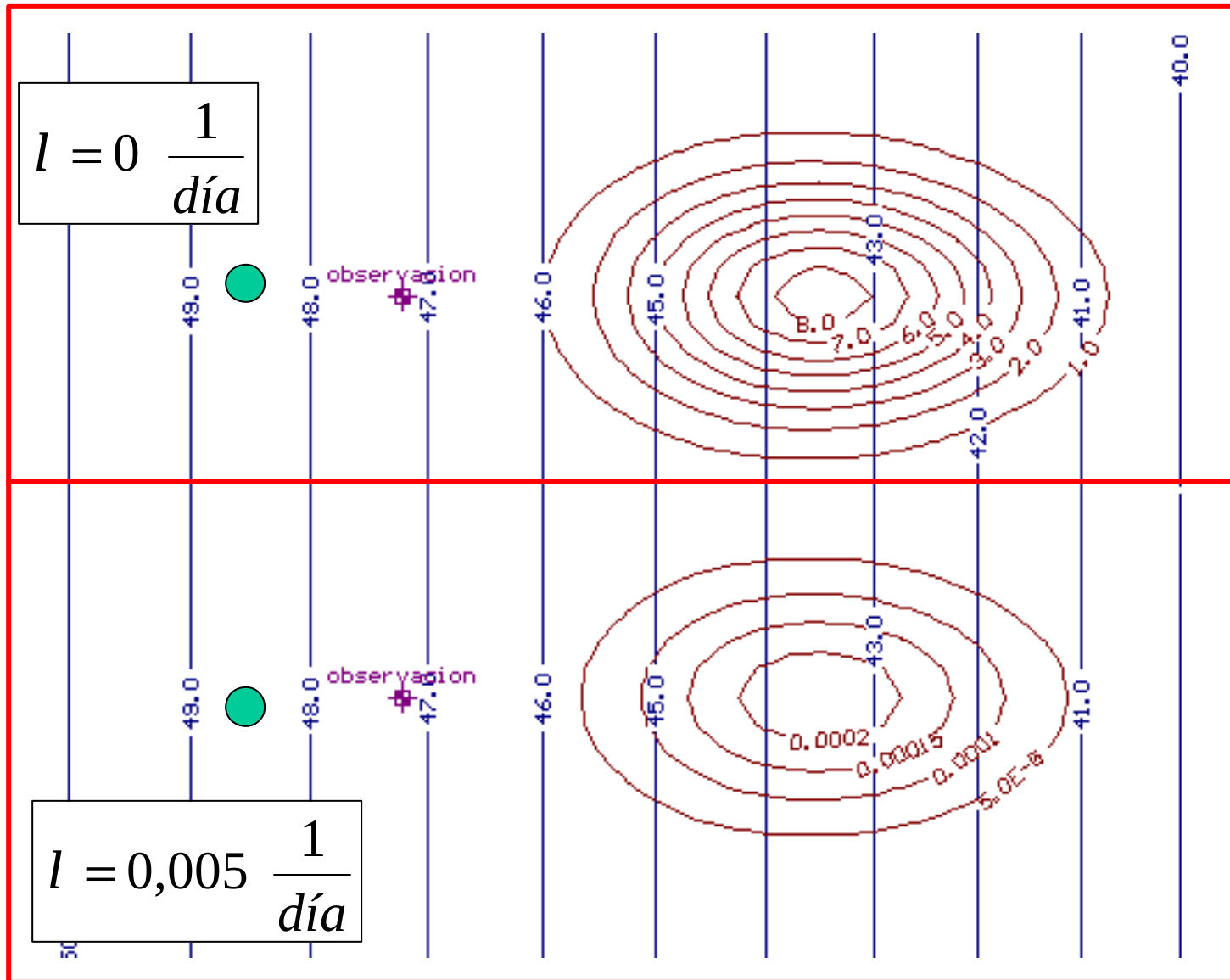


Compuesto NO conservativo

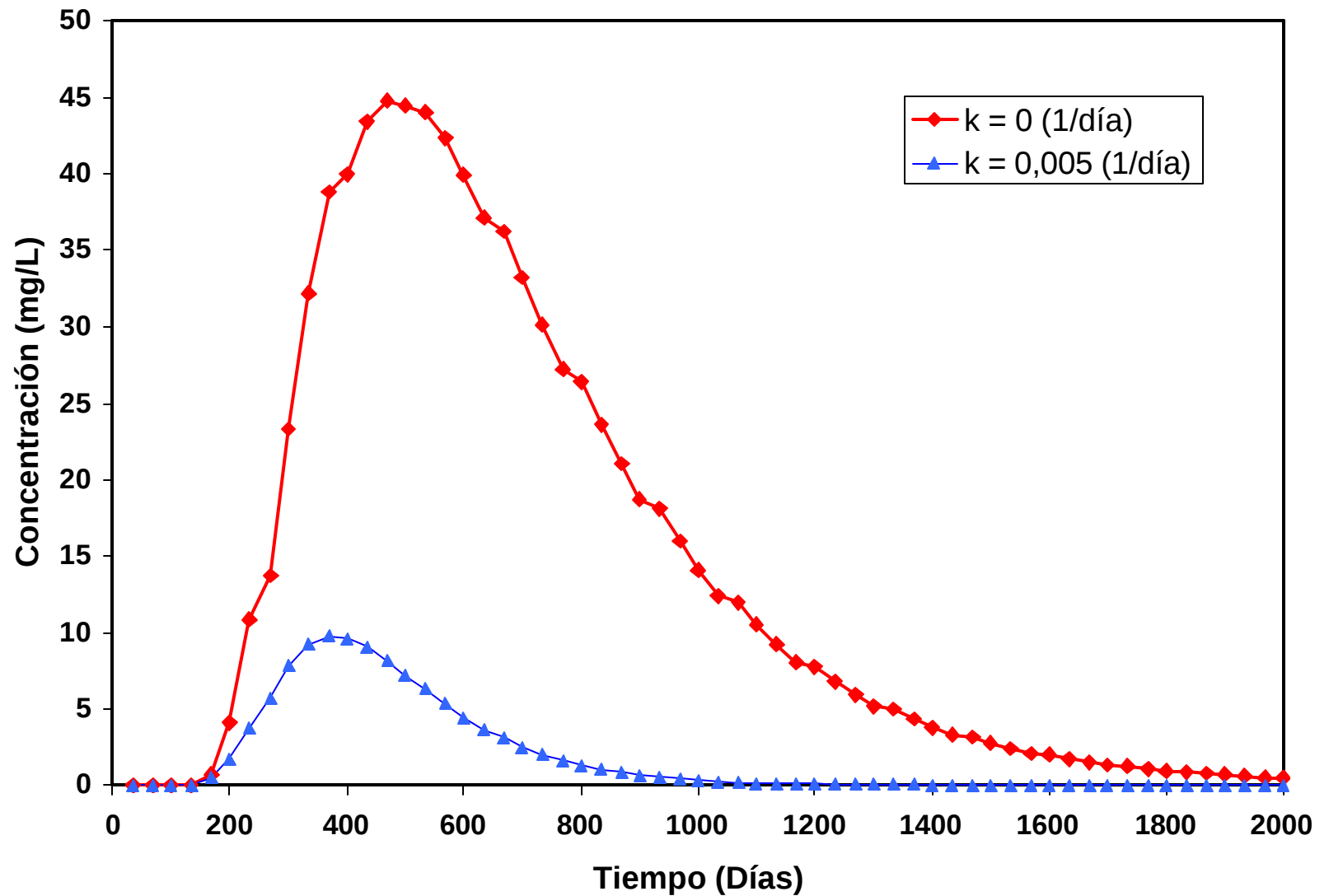
$$r = \frac{d(n \cdot C)}{dt} = -l \cdot n \cdot C$$



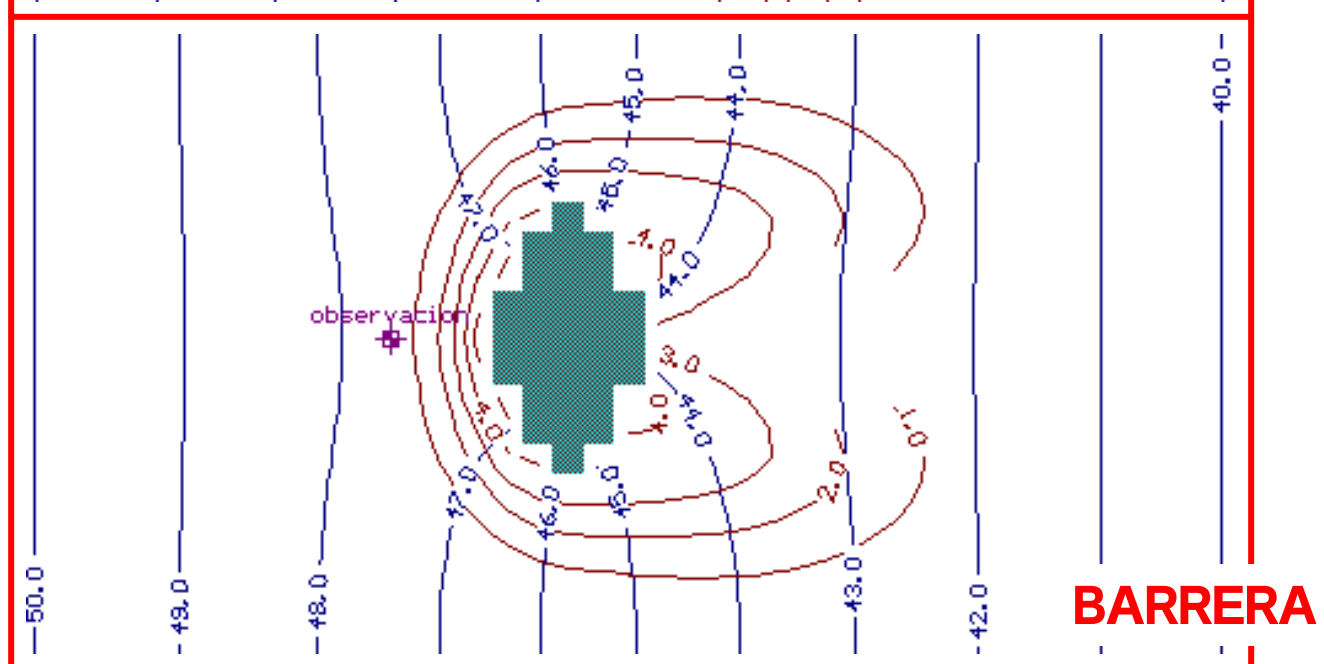
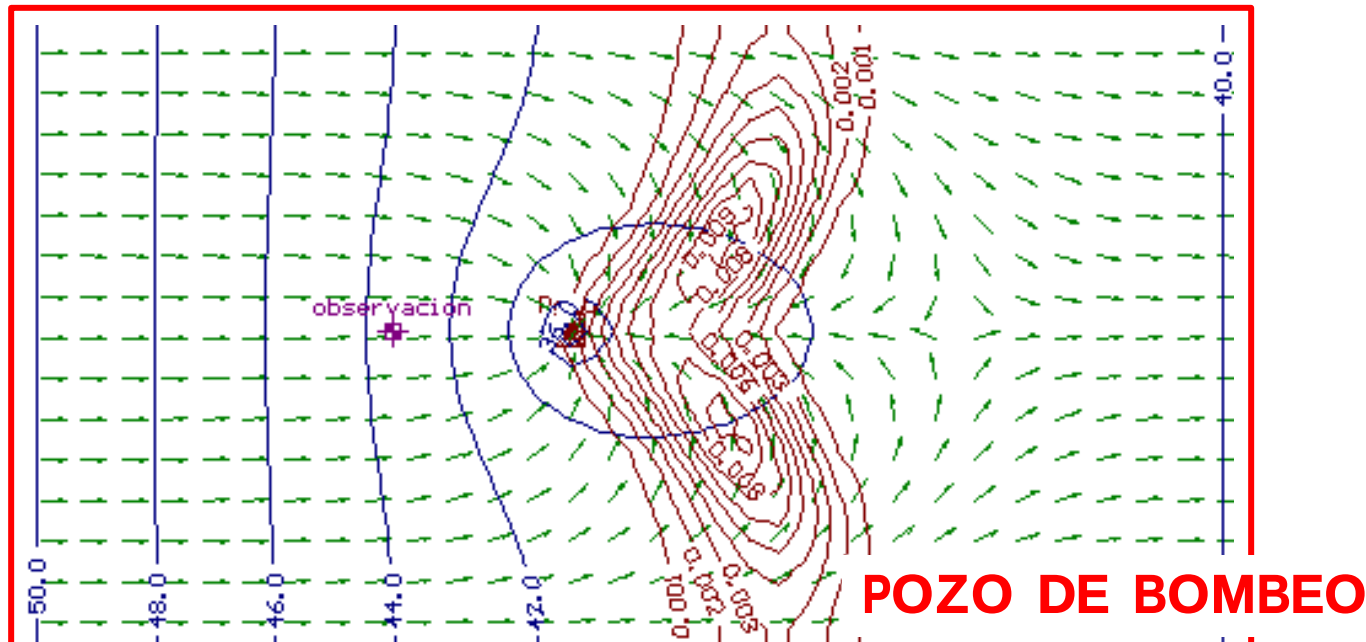
PLUMA PARA INYECCION INSTANTANEA



POZO DE OBSERVACION



CI66J



Diploma de Postítulo: Hidrogeología Aplicada a la Minería y Medio Ambiente