

2009

Modelación matemática y experimental de los efectos gravitatorios en el desarrollo de un penacho de contaminante en medio poroso saturado

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA
DEPARTAMENTO DE HIDRÁULICA Y MEDIO AMBIENTE
MASTER EN INGENIERÍA HIDRAULICA Y MEDIO
AMBIENTE

Valencia, Diciembre 2009



Modelación matemática y experimental de los efectos gravitatorios en el desarrollo de un penacho de contaminante en medio poroso saturado



Instituto de Ingeniería del Agua y medio Ambiente
Universidad Politécnica de Valencia

Tesina de maestría presentada por:
Claudia Lorena Garzón Morales

Director:
Dr. D. José Esteban Capilla Roma

Programa de máster:
Máster en Ingeniería del agua y medio ambiente

Departamento:
Ingeniería hidráulica y medio ambiente

Valencia, Diciembre 2009

Resumen

Las diferencias de densidades entre las sustancias contaminantes y el agua subterránea generan una estratificación, la cual puede favorecer, dependiendo de las características hidráulicas del acuífero, el desarrollo de efectos gravitatorios tales como el movimiento vertical del soluto y/o la formación de inestabilidades gravitatorias en los límites del penacho. Este tipo de fenómenos, ha sido muy estudiado por la hidrogeología durante las últimas dos décadas. En general, los trabajos de investigación se han enfocado en desarrollar marcos numéricos para la modelación cuidadosa de estos fenómenos apoyados en estudios experimentales. Sin embargo, la representación numérica de estos sistemas es compleja y requiere de estudios que permitan tener un detallado conocimiento del medio, además de suficientes mediciones con adecuada cobertura espacial y temporal. Por ello, los trabajos experimentales resultan ser una herramienta fundamental para lograr el estudio y comprensión de estos procesos.

Bajo este enfoque, el trabajo desarrollado se basa en la modelación numérica de un ensayo experimental del movimiento de un trazador de densidad mayor (1088 kg/m^3) que el agua del medio (1000 kg/m^3), el cual ha sido monitoreado durante 2.64 días y fue ejecutado en un tanque experimental de análisis bidimensional ubicado en la Universidad Politécnica de Valencia. De este ensayo se cuenta con información detallada de la distribución espacial y temporal del trazador en el medio obtenida a través de técnicas de análisis de imágenes digitales y un amplio conocimiento de las características del medio. Con base en esta información, se modeló matemáticamente el movimiento del trazador empleando dos programas: uno con enfoque de flujo de densidad variable (SEAWAT 2000) y otro con enfoque clásico de flujo y transporte de aguas subterráneas (MODFLOW/MT3DMS). Adicionalmente la ecuación de transporte de la componente advectiva fue resuelta a través de los métodos de las características – MOC – (enfoque lagrangiano) y el método TVD (enfoque euleriano).

Los resultados obtenidos indican que el movimiento vertical del trazador en los tiempos iniciales de la experimentación, determina la forma y el área de desarrollo del penacho en los tiempos posteriores a la inyección. El éxito de la simulación se basa en poder

reproducir el hundimiento observado, ya que la distribución de la masa del trazador en el medio está íntimamente ligada a los patrones de flujo y campos de conductividad existente afectada por el grado de heterogeneidad del medio. Para lo anterior resulta importante conocer la función de la variación de la densidad con respecto a la concentración cuando se emplea un trazador con composición o características diferentes a las del agua del mar.

Se observó que el uso de una ecuación estándar, para describir dicha relación, puede influenciar los resultados en la modelación de los efectos gravitatorios. En el caso del uso de los modelos MODFLOW/MT3DMS, no se logro reproducir el movimiento vertical del penacho observado en los tiempos iniciales del ensayo. En consecuencia, existen discrepancias entre los resultados numéricos y experimentales. Por otra parte, el considerar los efectos de las diferencias de la densidad entre fluidos, permitió simular con el programa SEAWAT 2000 el hundimiento del penacho y modelar con aproximación los patrones de flujo observados.

Summary

The differences of densities between the polluting substances and the groundwater generate a stratification, which can help, depending on the hydraulic characteristics of the aquifer, the development of gravitational effects such as the vertical movement heave of the solute and/or the formation of gravitational instabilities in the limits of plume. This kind of phenomena has been very studied by the hydrogeology during the last two decades. In general, the works of investigation have focused in develop numerical marks for the careful modeling of these phenomena, supported in experimental studies. Nevertheless, the numerical representation of these systems is complex and requires of studies that allow us to have a detailed knowledge of means, in addition to enough measurements with suitable space and temporary cover. For that reason, the experimental works become in a fundamental tool for the study and understanding of these processes.

Under this approach, the developed work is based on the numerical modeling of an experimental test of the movement of a tracer of higher density (1088 kg/m^3) than the water of the means (1000 kg/m^3), which have been observed during 2.64 days and were realize in an experimental tank of bidimensional analysis, located in the Polytechnical University of Valencia. In this test we have exhaustive information of the spatial and temporary distribution of the tracer in means, obtained through analytics techniques of digital images and an elevated knowledge of the mean. With base in this information, has modeled mathematically the tracer movement, using two programs: one with flow approach of variable density (SEAWAT 2000) and another one with classic approach of flow and groundwater transport (MODFLOW/MT3DMS). Additionally the transport equation of the advectiva component was solved through the methods of the characteristics - MOC - (lagrangiano approach) and method TVD (eulerian approach).

The obtained results indicate that the heave of the tracer in the experimentation initial times, determines the shape and area of the plume development in the injection later times. The success of the simulation is based on being able to reproduce the observed collapse, because the mass distribution of the tracer in the mean, intimately is bound to the flow patterns and the conductivity fields, affected by the heterogeneity degree of the means. For the previous thing it is important to know the density variation function

respect to the concentration when is used a tracer with different composition or characteristics than the seawater.

It was observed that the use of a standard equation, to describe this relation, could influence the results in the modeling of the gravitational effects. In the case of the use of the models MODFLOW/MT3DMS, could not been reproduced the heave of plume observed in the test initial times. Consequently, discrepancies between the numerical and experimental results exist. On the other hand, considering the effects of the density differences between fluids, allowed to simulate with program SEAWAT 2000 the collapse of plume and to model with approach the observed patterns of flow.

Resum

Les diferències de densitats entre les substàncies contaminants i l'aigua subterrània generen una estratificació, la qual pot afavorir, depenent de les característiques hidràuliques de l'aqüífer, el desenrotllament d'efectes gravitatoris tals com el moviment vertical del soluto i/o la formació d'instabilitats gravitatòries en els límits del plomall. Este tipus de fenòmens, ha sigut molt estudiat per la hidrogeologia durant les últimes dos dècades. En general, els treballs d'investigació s'han enfocat a desenrotllar marcs numèrics per a la modelació acurada d'estos fenòmens recolzats en estudis experimentals. No obstant, la representació numèrica d'estos sistemes és complexa i requereix d'estudis que permeten tindre un detallat coneixement del medi, a més de suficients mesuraments amb adequada cobertura espacial i temporal. Per això, els treballs experimentals resulten ser una ferramenta fonamental per a aconseguir l'estudi i comprensió d'estos procesos

Baix este enfocament, el treball desenrotllat es basa en la modelació numèrica d'un assaig experimental del moviment d'un traçador de densitat major (1088 kg/m^3) que l'aigua del medi (1000 kg/m^3), el qual ha sigut monitoreado durant 2.64 dies i va ser executat en un tanc experimental d'anàlisi bidimensional ubicada en la Universitat Politècnica de València. D'este assaig es compta amb informació detallada de la distribució espacial i temporal del traçador en el medi obtinguda a través de tècniques d'anàlisi d'imatges digitals i un ampli coneixement de les característiques del medi. Amb base en esta informació, es va modelar matemàticament el moviment del traçador emprant dos programes: un amb enfocament de flux de densitat variable (SEAWAT 2000) i un altre amb enfocament clàssic de flux i transport d'aigües subterrànies (MODFLOW/MT3DMS). Adicionalment l'equació de transport de la component advection va ser resolta a través dels mètodes de les característiques – MOC – (enfocament lagrangiano) i el mètode TVD (enfocament euleriano).

Els resultats obtinguts indiquen que el moviment vertical del traçador en els temps inicials de l'experimentació, determina la forma i l'àrea de desenrotllament del plomall en els temps posteriors a la injecció. L'èxit de la simulació es basa a poder reproduir l'afonament observat, ja que la distribució de la massa del traçador en el mig està íntimament lligada als patrons de flux i camps de conductivitat existent afectada pel

grau d'heterogeneïtat del mig. Per a l'anterior resulta important conèixer la funció de la variació de la densitat respecte a la concentració quan s'empra un traçador amb composició o característiques diferents a les de l'aigua del mar.

Es va observar que l'ús d'una equació estàndard, per a descriure la dita relació, pot influenciar els resultats en la modelació dels efectes gravitatoris. En el cas de l'ús dels models MODFLOW/MT3DMS, no se aconseguisc reproduir el moviment vertical del plomall observat en els temps inicials de l'assaig. En conseqüència, hi ha discrepàncies entre els resultats numèrics i experimentals. D'altra banda, el considerar els efectes de les diferències de la densitat entre fluids, va permetre simular amb el programa SEAWAT 2000 l'afonament del plomall i modelar amb aproximació els patrons de flux observats.

Agradecimientos

Este agradecimiento va dirigido a todas aquellas personas que han participado de maneras innumerables en el inicio, desarrollo y culminación de etapa en mi vida, y que por cuestiones de espacio no mencionare, pero que siempre han estado presentes desde el recuerdo y la memoria en mi paso por España. Agradezco de corazón todo el apoyo recibido por toda mi familia, en especial a mis queridos: papa, mama y hermanas, que desde la distancia me han acompañado y me han dado fuerzas para continuar cuando lo he necesitado.

Al director de mi tesina, José E. Capilla, por brindarme la oportunidad de trabajar bajo su tutoría, facilitándome todas las condiciones necesarias para desarrollar el trabajo y por su confianza, apoyo, colaboración y disposición durante todo este tiempo ☺.

A mis compañeros de oficina: Lorena Sánchez e Israel Sánchez, por la colaboración prestada y por las dudas resueltas ☺.

A mis compañeros del máster, por dejar un grato recuerdo en mi memoria, por los buenos momentos, los buenos ratos ☺.

Y en especial...

A Camilo Vélez ☺ por su apoyo, sus aportes, correcciones, intervenciones, y en todo lo innumerable cuanto ha participado para ayudarme a finalizar a tiempo. Al parcero Oscar Álvarez ☺, por el tiempo, la compañía, el apoyo, la amistad, por aguantarme en mis días de mayor atasco, por los almuerzos, por el desestres. Y a personas como Yoly, Edith, Andrés, por su interés, buenos deseos y buena vibra enviada en los días críticos.

A todos y cada uno,

Gracias totales!

Índice General

1	Introducción.....	1
1.1	Objetivos	4
1.2	Estructura del documento	5
2	Estado del arte	7
2.1	Antecedentes del flujo de densidad variable y transporte en medios porosos	7
2.1.1	Flujos advectivos mixtos e inestabilidades gravitatorias	8
2.1.2	Experimentación física y modelación numérica de inestabilidades gravitatorias	9
2.1.3	Procesos de flujo dependientes de la densidad	13
2.2	Fundamentos matemáticos del flujo de densidad variable y el transporte de contaminantes en aguas subterráneas	14
2.2.1	Ecuaciones gobernantes del flujo de densidad variable	14
2.2.1.1	Flujo másico en medios porosos	14
2.2.1.2	Ley general de Darcy	17
2.2.1.3	Ecuación de estado de la densidad	19
2.2.1.4	Ecuación de flujo en términos de agua dulce equivalente	21
2.2.2	Ecuaciones gobernantes del transporte	22
2.2.2.1	Transporte por advección	22
2.2.2.2	Transporte por dispersión hidrodinámica	27
2.2.2.3	Ecuación de advección – dispersión del transporte	31
2.3	Métodos numéricos para resolver las ecuaciones de flujo y transporte	33
2.3.1	Métodos eulerianos	33
2.3.2	Métodos lagrangianos	35
2.3.3	Métodos mixtos: eulerianos - lagrangianos.....	35
2.3.4	Comparación entre métodos.....	37
2.4	Modelo numérico SEAWAT	37
2.4.1	Estructura del programa	38
2.4.2	Modelo matemático y aproximaciones empleadas	40
2.4.3	Limitaciones	41
2.5	Resumen y conclusiones	41
3	Modelo físico experimental.....	43
3.1	Medio poroso.....	44
3.1.1	Medidas físicas	44

3.1.2	Distribución espacial.....	44
3.2	Instrumentación y toma de datos.....	45
3.2.1	Medidas piezométricas	45
3.2.2	Medidas de concentración	46
3.3	Experimentación realizada	48
3.3.1	Gradiente hidráulico	48
3.3.2	Datos piezométricos	48
3.3.3	Datos concentraciones	49
4	Modelación matemática de los resultados experimentales.....	51
4.1	Modelo informático.....	52
4.1.1	Conceptualización	52
4.1.2	Discretización espacial y temporal	53
4.1.3	Parámetros básicos.....	54
4.2	Caso 1: modelo de densidad constante	55
4.2.1	Modelación de datos iniciales.....	56
4.2.2	Calibración de parámetros físicos del tanque.....	59
4.2.2.1	Porosidad	59
4.2.2.2	Conductividad	60
4.2.3	Simulaciones de flujo y transporte.....	63
4.2.4	Balance de masa y curvas de evolución local de la concentración	67
4.3	Caso 2: modelo de densidad variable	70
4.3.1	Definición de parámetros característicos del modelo (componente VDF)	71
4.3.1.1	Densidades mínimas y máximas	71
4.3.1.2	Ecuación de estado de la densidad característica del trazador empleado	71
4.3.1.3	Esquema de acoplamiento de procesos transporte y densidad ..	75
4.3.2	Modelación con datos de calibración inicial	76
4.3.3	Modelación con ajustes a la calibración inicial	80
4.3.4	Balances de masa y curvas de evolución local de la concentración	86
5	Conclusiones	89
6	Referencias bibliográficas.....	94
7	Anexo 1. Resultados calibración PEST.....	100

Índice de tablas

Tabla 1. Relación entre densidad y concentración.....	20
Tabla 2. Comparación de los diferentes métodos numéricos.....	37
Tabla 3. Métodos numéricos recomendados a usar en casos de aplicación específicos.....	37
Tabla 4. Características físicas del medio poroso.....	44
Tabla 5. Análisis químico de la forma comercial del colorante Brilliant Blue FCF.....	47
Tabla 6. Niveles piezométricos al interior del tanque experimental.....	48
Tabla 7. Parámetros físicos generales para los modelos planteados.....	54
Tabla 8. Parámetros definidos para los componentes del flujo y transporte.....	55
Tabla 9. Valores de porosidad ajustados a observaciones experimentales de concentración.....	60
Tabla 10. Límites de variación para la conductividad PEST.....	61
Tabla 11. Resultados de los niveles piezométricos calibrados.....	62
Tabla 12. Ubicación de puntos de observación de concentraciones.....	68
Tabla 13. Resumen de parámetros definidos para la componente VDF.....	76

Índice de figuras

Figura 1. Volumen elemental representativo (VER) en un medio poroso	15
Figura 2. Relación entre un sistema de coordenadas alineado con el eje principal de permeabilidad	17
Figura 3. Balance de masa en un Volumen elemental representativo (VER)	23
Figura 4. Volumen elemental para desarrollar del transporte advectivo ecuación en coordenadas cartesianas	24
Figura 5. Errores numéricos típicos en la modelación de transporte de contaminantes (Zheng, Chunmiao; Wang, Patrick, 1999).....	26
Figura 6. (a) Factores que causan la dispersión longitudinal a escala de poros individuales. (b) Trayectorias de flujo en un medio poroso que causa dispersión hidrodinámica lateral (Fetter, 1999)	29
Figura 7. Dispersión longitudinal y transversal vistas a escala microscópica (Oyarzún L., 2007).....	29
Figura 8. Efecto de la dispersión sobre la curva de llegada (Fetter, 1999)	30
Figura 9. VER alineado con el flujo	31
Figura 10. Cuadro de flujo generalizado del programa SEAWAT. Fuente: (Guo & Langevin, 2002)	38
Figura 11. Modos de simulación disponibles con el programa SEAWAT 2000. Fuente: (Langevin y col., 2003)	39
Figura 12. Tanque experimental Universidad Politécnica de Valencia.....	43
Figura 13. Distribución espacial del campo de conductividades y porosidades (M_{ax} : conductividad/porosidad arena tipo)	45
Figura 14. Configuración del medio poroso construido.....	45
Figura 15. Ubicación de los transductores de presión en el tanque de experimentación (para su identificación, se enumeraron de derecha izquierda en orden descendente)	46
Figura 16. Comparación de imágenes digitales tomadas en diferentes tiempos de experimentación vs. Mapas de concentración correspondientes calculados	50
Figura 17. Condiciones iniciales y de contorno considerados en el modelo numérico	52
Figura 18. Discretización por bloque de medio poroso	53

Figura 19. Discretización modelo numérico. (a) Vista longitudinal de 40 capas y 190 columnas (b) vista superior de 5 filas y 190 columnas, indicando además la posición de los piezómetros	54
Figura 20. Comparación de mapas de concentraciones experimentales y simulados, obtenidos con la información básica para los tiempos de simulación de 0.11, 0.25, 0.46, 0.81, 1.54 y 2.64 días.	56
Figura 21. Curva de masa aplicada obtenida con datos básicos de porosidad y mapa de concentraciones experimentales.....	57
Figura 22. Mapa de velocidades totales obtenidos con la información básica (m/d).....	58
Figura 23. Comparación de las alturas de agua observadas vs calculadas, resultado de simulaciones con la información básica.	58
Figura 24. Distribución de parámetros de porosidad a calibrar	59
Figura 25. Comparación entre curvas de masa obtenidas con la información general y los valores calibrados para la porosidad	60
Figura 26. Parametrización de las zonas de conductividad para calibración ..	61
Figura 27. Distribución espacial de las conductividades calibradas (m/d).....	62
Figura 28. Representación grafica de residuos	62
Figura 29. Campo de flujo calibrado y alturas de agua calculadas con medio calibrado.....	63
Figura 30. Trayectorias preferentes de las partículas para el medio calibrado .	63
Figura 31. Campo de velocidades resultantes (a) Velocidades eje X, (b) Velocidades eje Z, (c) Velocidades totales (unidad: m/d).....	64
Figura 32. Comparación de los mapas de concentraciones experimentales y simulados para modelo calibrado, bajo esquemas de transporte advectivo simulado por MOC y TVD para los tiempos definidos.	65
Figura 33. Ubicación de puntos de observación para las concentraciones simuladas. Imagen correspondiente a 1.51 días de experimentación.	68
Figura 34. (a) Curva de masa relativa para condiciones experimentales y simuladas. (b, c, d) Comparación entre curvas de llegada para modelos simulados con MOC, TVD y obtenidas con datos experimentales para los puntos de observación 2, 4 y 6. (Sim: simulación, exp: experimental).	69
Figura 35. Concentraciones observadas experimentalmente en los puntos de observación 6 y 7. (Exp: experimental).....	70
Figura 36. Variaciones relativas de densidad como función de la concentración del trazador Brilliant Blue, obtenidas experimentalmente.	72

Figura 37. Comparación de las variaciones relativas de densidad como función de la concentración del trazador Brilliant Blue, obtenidas teórica y experimentalmente	73
Figura 38. Mapas de concentraciones para el medio con conductividades y porosidades base, para 0.11, 0.3, 0.46, 0.81, 1.54 y 2.64 días de experimentación, obtenidos con el programa SEAWAT 2000, para diferentes valores de F (0.2, 0.53 y 0.7).....	74
Figura 39. Comparación de mapas de concentraciones simuladas con el programa SEAWAT vrs experimentales, para el medio con conductividades y porosidades calibradas en el Caso 1.	77
Figura 40. Campo de velocidades totales simuladas con el programa SEAWAT	78
Figura 41. Comparación de curvas de llegada simuladas y experimentales, para los puntos de observación 1 (a) y 5 (b)	79
Figura 42. Inestabilidades gravitatorias observadas en el ensayo experimental posterior a la inyección del trazador para 55 min, 58 min, 1.82 h y 2.92 h respectivamente.....	80
Figura 43. Área de modificación de conductividades hidráulicas.....	81
Figura 44. Comparación del desarrollo del penacho en la fila 5, para los tiempos cercanos a la inyección del trazador, en diferentes medios de conductividad modificados.....	81
Figura 45. Campo de conductividades ajustadas	84
Figura 46. Campo de velocidades totales del medio ajustado.....	84
Figura 47. Comparación de mapas de concentraciones simuladas para el campo de conductividades ajustado MOC vrs TVD	84
Figura 48. Curva de masa relativa para condiciones experimentales y simuladas con campo de conductividades modificadas para MOC y TVD.....	86
Figura 49. Comparación de la curva de concentraciones entre las filas discretizadas para el medio en el punto de observación 1. (a) Simulación del modelo de conductividades modificadas – método MOC. (b) Simulación del modelo de conductividades modificadas – método TVD. (Obs 1 corresponde a la fila 5)	86
Figura 50. Comparación entre curvas de llegada para modelos simulados con MOC, TVD y obtenidas con datos experimentales para los puntos de observación 1 hasta 7. (Sim: simulación, exp: experimental).	87



Introducción

Históricamente la gran mayoría de los estudios hidrogeológicos han considerado que el flujo subterráneo era gobernado exclusivamente por diferencias de presiones, al suponer la densidad del fluido como constante en el dominio estudiado. Ello se podía asumir debido a que en la mayor parte de los sistemas hidrogeológicos tratados la variación de la densidad del agua en el espacio y el tiempo era tan pequeña que podía despreciarse (Heredia & Murillo Díaz, 2007).

Por otro lado, asumir que la densidad era constante – válida en muchos casos – simplificaba la derivación matemática del problema, introducía el concepto de un potencial de campo que gobierna el flujo y el uso de superficies potenciométricas como herramienta para analizar, representar y simular diversos procesos y fenómenos hidrogeológicos (Bachu, 1995).

Sin embargo se han abordado estudios de sistemas hidrogeológicos sumamente complejos. Por ejemplo, en términos medioambientales el deterioro progresivo de los acuíferos debido a la contaminación natural o la ocasionada por acciones del hombre, ha generado el interés en estudiar el movimiento de los contaminantes en medios porosos.

Los problemas ambientales ocasionados por aquellos contaminantes que presentan características diferentes a las del agua del medio natural, tales como densidad, viscosidad, y/o temperatura variable, son unas de las principales problemáticas ambientales en la actualidad. En particular, es normal olvidar los efectos de la densidad variable en los problemas habituales de transporte de contaminantes, porque éstos, solo son considerados cuando las diferencias de densidades son grandes. Autores como Molen y Ommen (1988) han concluido que estos efectos son más comunes de lo que usualmente es asumido.

Por ejemplo, la inyección profunda de salmueras, aguas residuales urbanas o industriales, se ha vuelto una alternativa de gestión de residuos ampliamente difundida aunque compleja y relativamente reciente. Otros casos de contaminación en los acuíferos son de gran interés como: la intrusión de agua salina en acuíferos costeros, infiltración de lixiviados provenientes de vertederos de residuos, transporte de sales debido a prácticas de agricultura, flujo de aguas subterráneas a través de formaciones de sal en conexión con la disposición de desechos radiactivos de alto nivel, entre otros.

Los fenómenos del flujo de densidad variable en la hidrología de las aguas subterráneas, han sido ampliamente revisados y presentados en artículos recientes por Diersch y Kolditz (2002) y Simmons (2001, 2005), donde ilustran la importancia y el interés generado sobre este campo en las últimas dos décadas. Además indican la diversidad de estudios desarrollados en campos como la intrusión marina, la interfaz de agua dulce/salada, la migración de penachos de contaminantes densos, estudios de DNAPL, entre muchos otros campos, mediante una vasta referencia bibliográfica al respecto.

Los estudios de flujo de densidad variable y transporte de contaminantes en aguas subterráneas, se han referido especialmente al transporte debido a las fuerzas advectivas. Los trabajos desarrollados en el área de flujos mezclados por advección dependientes de la densidad se han centrado en las interacciones del agua dulce/agua salada, las cuales han sido analizados exhaustivamente. Algunos ejemplos de ello son los trabajos realizados por Segol y col. (1975), Segol y Pinder (1976), Huyakorn y Taylor (1976), Huyakorn y col. (1987), Volker y Rushton (1982), Frind (1982), Voss (1984, 1999), Voss y Souza (1987), Putti y Paniconi (1995), Diersch (1988), Galeati y col. (1992), Gambolati y col. (1999), Kolditz y col. (1998), Bues y Oltean (2000) (citado por (Diersch & Kolditz, 2002)). En otros campos como la contaminación de acuíferos por disposición de desechos radioactivos, Capilla y col. (1998) han empleado un modelo de flujo de densidad variable para un análisis estocástico del movimiento advectivo de partículas en un medio fracturado natural.

Las posibles diferencias de densidades entre las sustancias contaminantes y el agua subterránea generan una estratificación, la cual puede favorecer dependiendo de las características hidráulicas del acuífero, el desarrollo de efectos gravitatorios tales como el movimiento vertical del soluto y/o la formación de inestabilidades gravitatorias en los bordes del penacho. Este último fenómeno, ha sido investigado en menor proporción y se ha desarrollado principalmente estudios con modelos físicos orientados a reproducir datos experimentales mediante modelos numéricos. El objetivo ha sido determinar sus efectos en medios porosos homogéneos y heterogéneos. Autores como Schincariol, Schwartz, Oostrom, Wooding, Dane, entre otros, son los más destacados en este campo.

En el área del movimiento de penachos de contaminantes densos y los efectos e inestabilidades gravitacionales asociadas a este fenómeno, constituye un tema de interés particular el cual se ha estado investigando en las últimas décadas, debido a la dinámica no lineal de este tipo de sistemas, haciendo compleja la predicción de donde se puede

producir y como puede desarrollarse este tipo de inestabilidades (Schincariol & Schwartz, 1990).

La modelación matemática de resultados experimentales en el campo del flujo de densidad variable, se presenta como una herramienta muy atractiva para tratar de representar este tipo de procesos. Sin embargo, la representación numérica de estos sistemas de flujo es compleja y no se halla exenta de limitaciones. Dicha representación se puede abordar con diversos códigos numéricos en la actualidad, desarrollados bajo distintos métodos de resolución de los problemas directos de flujo y de transporte. La selección de la herramienta a utilizar dependerá como en muchos problemas de modelación del objetivo del estudio, las simplificaciones que se adopten, el conocimiento, los datos disponibles y el presupuesto, entre otros.

En particular, la modelación de los sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable requiere un elevado conocimiento del medio. De igual manera la información debe tener una adecuada cobertura espacial y temporal, aunque la variación de algunos de los parámetros ejerce una influencia sobre los resultados del modelo que queda enmascarada por las incertidumbres físicas y numéricas del mismo (Heredia & Murillo Díaz, 2007).

El uso de modelos físicos para el estudio de fenómenos de flujo y transporte han sido utilizados en numerosas ocasiones para el desarrollo y validación de teorías en el campo de la densidad variable. Generalmente las investigaciones realizadas tratan de desarrollar modelos matemáticos de los fenómenos no bien caracterizados y estos elementos resultan ser una única fuente capaz de proporcionar la gran cantidad de información real con el detalle y la precisión necesaria.

Bajo esta línea de investigación, se ha considerado el desarrollo del presente proyecto. En las instalaciones de la Universidad Politécnica de Valencia, se cuenta con un tanque experimental el cual presenta una configuración de medio poroso heterogéneo acorde a lo que se puede encontrar en formaciones naturales. En él se han realizado una serie de ensayos de trazadores con el objeto ayudar al estudio del comportamiento de los parámetros efectivos en este tipo de medio y a la experimentación sobre cómo pueden verse afectados cuando en zonas reducidas el flujo adopta características no-darcianas (Sanchez, 2007). Mediante el uso de diversos modelos matemáticos, se ha tratado de reproducir el comportamiento del flujo y transporte observado.

En diversos ensayos realizados se observó el hundimiento del penacho en los tiempos iniciales, una vez realizada la inyección del trazador. Esta condición, fue atribuida a las diferencias de densidades existentes entre el trazador empleado y el agua del medio, de ahí la generación de efectos gravitatorios. Dado que este tipo de fenómeno es modelado por los procesos de flujo de densidad variable, el interés del presente proyecto está enfocado en tratar de reproducir dicho comportamiento a través de la modelación matemática haciendo uso de un modelo que contemple tal condición.

Gracias al desarrollo informático en esta área de trabajo, actualmente existe una gran difusión de códigos numéricos de modelización hidrogeológica para flujos de densidad variable. Entre los códigos numéricos más ampliamente utilizados se encuentra el FEFLOW, MOCDENSE, SUTRA y SEAWAT, todos desarrollados por la USGS excepto FEFLOW desarrollado por J. Diersh (1997). En nuestro caso, después de analizar las posibles alternativas, se decidió emplear el modelo SEAWAT 2000 debido a su estructura modular, y a que es un código en el cual se acopla una versión modificada del código MODFLOW y el MT3DMS (Guo y Langevin, 2002).

1.1 Objetivos

El presente proyecto se plantea para estudiar la importancia de la modelación del flujo de densidad variable en el transporte de contaminantes en acuíferos, donde los efectos de las diferencias de densidades entre las sustancias contaminantes y el agua subterránea, pueden afectar la migración del penacho del contaminante, favoreciendo la formación de efectos e inestabilidades gravitatorias en él, que pueden modificar el área de afectación de la contaminación. En esta situación la clásica hipótesis de trazador ideal puede dejar de ser válida especialmente en los momentos iniciales en que se tienen las concentraciones máximas de contaminante.

Dado que la modelación de los sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable requiere un elevado conocimiento del medio y la información debe tener una adecuada cobertura espacial y temporal, el contar con estudios experimentales controlados que tengan en detalle este tipo de información favorece la investigación de este fenómeno. Por lo tanto, la experimentación física contribuye al conocimiento y entendimiento del comportamiento de los efectos de variación de densidad en el movimiento de penachos densos. Y la modelación de este comportamiento a través de modelos numéricos beneficia el entendimiento de los factores que influyen en la representación de estos casos y con ello poder generar un marco de referencia para la aplicación en casos reales.

Considerando lo expuesto anteriormente, como objetivo principal del proyecto se busca reproducir el fenómeno de flujo y transporte de masa observado en ensayos de trazadores realizados previamente sobre un tanque experimental a escala laboratorio. Basándose en datos experimentales donde se observa la generación de efectos gravitatorios y haciendo uso de modelos numéricos ampliamente utilizados en la actualidad, se busca evaluar la influencia de la densidad del trazador en dicho comportamiento.

Para ello se pretende reproducir con un modelo de flujo de densidad variable las condiciones en las cuales las diferencias de densidad se hacen significativas y afectan el sistema, realizando la calibración correspondiente de los parámetros efectivos del modelo empleado. Para alcanzar el objetivo general, se han planteado las siguientes tareas específicas:

- a. Procesar datos experimentales provenientes de ensayos de trazadores realizados sobre un taque experimental de laboratorio, para la construcción e implementación de un modelo informático de flujo y transporte.
- b. Emplear un modelo de flujo de densidad constante y otro de densidad variable con diferentes modelos de transporte de tipo euleriano y euleriano-lagrangiano, para reproducir los fenómenos observados.
- c. Calibrar los parámetros efectivos de cada uno de los modelos de flujo utilizados para lograr reproducir los experimentos realizados.
- d. Comparar los datos experimentales y simulaciones numéricas obtenidas, para determinar si los modelos utilizados reproducen las inestabilidades gravitatorias observadas en los ensayos preliminares sobre el tanque experimental.
- e. Establecer conclusiones o recomendaciones generales a considerar en casos reales.

1.2 Estructura del documento

Para alcanzar los objetivos propuestos anteriormente, se realizó una revisión del estado del arte que se presenta en el CAPITULO 2, enfocada en los diversos estudios del flujo de densidad variable en aguas subterráneas y de la generación de inestabilidades gravitatorias debido a las diferencias de densidad entre los solutos contaminantes y el medio natural de recepción.

En dicho estado de arte, se muestra el desarrollo en la aplicación de tanques experimentales de diversas escalas para la aplicación y estudio de los fenómenos de flujo y transporte en medios tanto homogéneos como heterogéneos, haciendo principal énfasis en los últimos; además, los diversos trabajos de investigación en torno a conocer, modelar y reproducir los fenómenos de transporte de densidad variable.

Adicionalmente se presenta una revisión de los fundamentos teóricos sobre el tema, haciendo énfasis en los fundamentos matemáticos del flujo de densidad variable indicando la diferencia conceptual con el modelo clásico de flujo y la relación existente entre este planteamiento y la ecuación del transporte de contaminantes.

Considerando que es importante conocer los diferentes enfoques y métodos numéricos empleados para la solución de las ecuaciones gobernantes de los procesos de flujo y transporte de aguas subterráneas, se realizó una descripción de los métodos empleados en los modelos numéricos utilizados, indicando las características más relevantes, ventajas y desventajas de uso.

En el CAPITULO 3, se hace una descripción detallada del experimento base para el desarrollo del presente trabajo, indicando las características del tanque experimental construido en la Universidad Politécnica de Valencia por Israel Sánchez en marco del proyecto de investigación de desarrollo de modelos físicos a escala intermedia (2007), las condiciones iniciales del experimento, el tipo de información tomada y los instrumentos empleados para tal fin.

Una vez descrito las condiciones del experimento, en el CAPITULO 4 se presentan los resultados de la modelación matemática de los datos experimentales del ensayo. Inicialmente se indica la conceptualización del ensayo experimental y se describe las características del modelo informático planteado. Posteriormente, se describen uno a uno los modelos elaborados para la reproducción del ensayo, empezando por el modelo básico con la información inicial y posteriormente la descripción y análisis de los dos casos de estudios planteados.

Acorde a los resultados obtenidos, se definen una serie de conclusiones finales presentadas en el CAPITULO 5 y las referencias bibliográficas consultadas, se indican en el CAPITULO 6.

2

Estado del arte

En el presente capítulo se realiza una revisión del estado del arte de los procesos de flujo y transporte de densidad variable. Para ello se hizo una breve descripción de los antecedentes sobre el tema y los fundamentos teóricos de las ecuaciones gobernantes de estos procesos, los métodos numéricos empleados para su solución y la descripción del modelo numérico empleado para el desarrollo del presente trabajo.

2.1 Antecedentes del flujo de densidad variable y transporte en medios porosos

Las aguas subterráneas están expuestas a fuentes de contaminación puntual o permanente, derivadas principalmente de las actividades del hombre. Se suele distinguir dos tipos de procesos contaminantes: los "puntuales" que afectan a zonas localizadas y los "difusos" que provocan una contaminación dispersa en zonas amplias, en las que no es fácil identificar el foco principal. Generalmente en estos procesos de contaminación las variaciones de la densidad de los fluidos no son lo suficientemente grandes para requerir el uso de modelos de densidad variable. Son resueltos con modelos en los cuales la densidad se aproxima como constante. Sin embargo, autores como Molen y Ommen (1988) han concluido que los efectos de densidad en el transporte de contaminantes miscibles en aguas subterráneas es probablemente más común de lo que es usualmente asumido.

Las variaciones espaciales de la densidad del fluido pueden afectar los patrones de flujo del agua subterránea. Tal es el caso del flujo de las aguas subterráneas cerca de la costa, o problemas que involucren el almacenaje y recuperación del acuífero, pozos de inyección muy profundos, transporte de salmueras, flujo de agua subterránea cerca de bóvedas de la sal, o procesos de contaminación bastante frecuentes como la intrusión de

agua salina en acuíferos costeros, infiltración de lixiviados provenientes de vertederos de basuras, el transporte de sales debido a prácticas de agricultura, flujo de aguas subterráneas a través de formaciones de sal en conexión con la disposición de desechos radiactivos de alto nivel, entre otros.

Debido al interés generado en los procesos de contaminación, su modelación y descripción en sistemas de aguas subterráneas, los procesos de flujo dependientes de la densidad del fluido en medios porosos, ha sido un tema de particular interés en el campo de la hidrogeología. Existen trabajos que datan de hace más de medio siglo, pero con una importante actividad investigativa durante los últimos 30 años, como lo reporta (Diersch & Kolditz, 2002) y Simmons (2001, 2005) en la revisión del estado de arte realizado sobre este tema con una vasta referencia bibliográfica al respecto. El interés científico durante los últimos años ha estado alrededor del transporte de solutos en el agua subterránea, principalmente y de manera más activa en el área de la advección en medios porosos continuos como lo resaltan Nield y Bejan (1999) (citado por Simmons y col., 2001) quienes reportaron una tasa de publicación sobre este tema de aproximadamente 100 artículos/año.

2.1.1 Flujos advectivos mixtos e inestabilidades gravitatorias

Los estudios de campo y/o laboratorio han mostrado que los gradientes de densidad de fluidos causados por las variaciones en concentración y/o temperatura, pueden jugar un papel importante en el transporte de solutos en sistemas de agua subterránea. Cuando las diferencias de densidad son significativas entre el penacho contaminante y el ambiente, el transporte del soluto no solo es el resultado de las fuerzas advectivas y de dispersión/ difusión, sino también de la libre convección, denominado flujos convectivos mixtos (Simmons y col., 2001).

El proceso libre de la convección mejora la mezcla hidrodinámica del soluto denso con el ambiente menos denso del agua subterránea y es significativo por tres razones principales: (a) la cantidad total de soluto transportado involucrado en el proceso de mezcla convectiva es típicamente mayor que el transporte difusivo, (b) las escalas de tiempo asociadas con los procesos de mezcla son significativamente reducidos y por último, (c) las dimensiones de la zona de mezcla son generalmente más grandes y por lo tanto, permite que los solutos puedan extenderse en distancia mucho mayores (Simmons y col., 2001).

Los regímenes de flujos convectivos mixtos ocurren cuando la fuerza convectiva (p.e, el transporte dirigido hidráulicamente) y la libre convección (p.e, transporte dirigido por flotabilidad), operan juntas para controlar la concentración del soluto y/o la distribución de temperaturas (Gebhart y col., 1988; citado por (Schincariol & Schwartz, 1990)). Algunos de estos sistemas mixtos son caracterizados por el desarrollo de inestabilidades las cuales se presentan en forma de lóbulos o dedos (fingers), que superponen perturbaciones en las distribuciones de concentraciones en el flujo mixto.

La principal causa de las inestabilidades es la estratificación de la densidad, que se produce cuando un fluido más denso se superpone a uno menos denso. El desarrollo del proceso de inestabilidad hace que los fluidos se mezclen para alcanzar un gradiente de densidad estable, este proceso es conocido como dispersión convectiva (Schincariol & Schwartz, 1990). La heterogeneidad en características hidráulicas puede perturbar el flujo sobre muchas escalas de longitud, extendiéndose desde diferencias leves en la geometría del poro a heterogeneidades más grandes en la escala formativa o regional, para generar inestabilidades (Simmons y col., 2001).

Históricamente los investigadores en el campo de flujos advectivos inestables han clasificado estos flujos en amplias categorías. Por ejemplo, las inestabilidades o los flujos advectivos dentro de una región limitada o capa, han sido llamados Benard, Rayleigh, o inestabilidades térmicas (Ghebart y col., 1988); las variaciones en este problema teórico se han estudiado con los trabajos pioneros desarrollados por Horton y Rogers (1945) y posteriormente Lapwood (1948) sobre la analogía de la convección en medios porosos de Rayleigh – Bernard con respecto a la inestabilidad térmica en una capa porosa saturada de flujo horizontal infinita. Wooding (1958) amplió estos estudios y Elder (1957) y Schneider (1963) realizaron experimentos del laboratorio con células de Hele-Shaw. Desde entonces el número de artículos en este tema han ido en aumento, aunque la mayor parte de las investigaciones realizadas en la década de los 60 y anteriores se enfocaron en fenómenos geofísicos y geotérmicos.

Algunos de los trabajos iniciales en inestabilidades advectivas fueron desarrollados por Wooding (1959, 1962, 1963, 1969) y Bachmat and Elrick (1970), quienes estudiaron teórica y experimentalmente en columnas saturadas, la hidrodinámica y la advección vertical entre dos fluidos miscibles de densidad variable en medios porosos, usando el número de Rayleigh para predecir el desarrollo de corrientes convectivas libres. Sanfman y Taylor (1958) examinaron la estabilidad de la interface entre fluidos no miscibles moviéndose verticalmente a través de medios porosos.

Este concepto de inestabilidades en interfaces fue generalizado a sistemas miscibles por Wooding (1962) quien examinó los efectos de la dispersión longitudinal a través de la interface de dos fluidos miscibles. Biggar y Nielsen (1964), Krupp y Elrick (1969), y Rose y Passioura (1971) desarrollaron estudios de desplazamiento en columnas con soluciones de sal de densidad variable. Estos estudios confirmaron que la ocurrencia de las inestabilidades estaban relacionada con las diferencias de densidad y las velocidades medias del agua en los poros (Simmons y col., 2001).

2.1.2 Experimentación física y modelación numérica de inestabilidades gravitatorias

Las inestabilidades gravitacionales constituyen un tema de interés particular debido a la dinámica no lineal de este tipo de sistemas, lo que dificulta la predicción de donde se puede producir y como puede desarrollarse (Schincariol & Schwartz, 1990). Teniendo en cuenta que la formación de lóbulos o dedos de las inestabilidades crea patrones

complejos en el transporte de penachos densos, los trabajos de investigación en la última década se han enfocado en desarrollar marcos numéricos para realizar una modelación cuidadosa de este fenómeno apoyado en estudios experimentales, con el objetivo de lograr reproducir tal comportamiento. Tal es el caso de los trabajos realizados por (Schincariol & Schwartz, 1990), Oostrom y col., (1992), (Koch & Zhang, 1992), Fan y col., (1994), Schincariol y col., (1994 y 1997), Zhang y Schwartz (1995), (Liu & Dane, 1996), entre otros.

Otro aspecto importante, es el papel de la heterogeneidad del medio poroso. Los trabajos desarrollados en este campo, señalan que el inicio de las inestabilidades, el subsecuente crecimiento y el decaimiento, están relacionados íntimamente con la estructura de los medios porosos heterogéneos que se emplean y la variación del campo de la permeabilidad, por ello las investigaciones en este campo se han orientado a considerar diversos estilos de heterogeneidad y medios geológicos.

Por ello, los experimentos en medios porosos heterogéneos de escala laboratorio han sido usados extensivamente de forma reciente, para estudiar los procesos de flujo y transporte de contaminantes miscibles y no miscibles en sistemas de agua subterránea saturada, tal es el caso de Silliman y Simpson (1987), Kueper y col. (1989), Schincariol y Schwartz (1990), Dullien y Dong (1996), Swartz y Schwartz (1998), Chao y col., (2000), Simmons y col., (2001). Y en medios no saturados, como Wildenschild y Jensen (1999), Ursino y col. (2001), Oostrom y col. (2003) (Citados por McNeil y col., 2006).

A continuación se presenta los estudios más relevantes en el campo de las inestabilidades gravitatorias basadas en trabajos experimentales y modelación numérica.

Modelos 2D

Uno de los trabajos pioneros en el tema fue realizado por Schincariol y Schwartz (1990). Utilizan un tanque experimental (dimensiones: 116.8 cm de largo, 71 cm de alto y 5 cm de espesor) para determinar la influencia de penachos densos y las heterogeneidades al interior de medios porosos en el patrón de propagación y las condiciones bajo las cuales las diferencias de densidad son significativas. De esta manera evaluaron el flujo dependiente de la densidad en medios homogéneos, por capas y lenticulares.

Sus resultados indican que en un medio por capas, las reducciones en la conductividad hidráulica del orden de la mitad de la magnitud o menos, influencia el flujo del penacho denso. Observaron además que las diferencias de densidad bajas menores a 0.0008 gr/cm^3 eran suficientes para producir inestabilidades gravitatorias en un medio lenticular. Y que la combinación de la dispersión convectiva y el flujo no uniforme, tienden a disipar las inestabilidades debido a heterogeneidades causadas por una dispersión relativamente mayor.

Oostrom y col. (1992) estudiaron el comportamiento de penachos de lixiviados inyectados en medios porosos homogéneos. Sus resultados mostraron que para un

medio poroso dado, la magnitud de la velocidad horizontal, la tasa de inyección del lixiviado contaminante y la diferencia de densidad entre la solución contaminante y el agua subterránea influenciaba la estabilidad del penacho. Adicionalmente los resultados experimentales sugirieron que el comportamiento de los penachos densos del contaminante que cubren una corriente menos densa del agua subterránea en un médium poroso homogéneo depende de la magnitud de ciertos parámetros no dimensionales y que las inestabilidades gravitacionales comienzan a desarrollarse cuando los valores de estos parámetros exceden ciertos valores críticos.

Koch y Zhang, (1992) investigaron cuantitativamente los efectos del movimiento en el tiempo y espacio de un penacho de un contaminante denso a través de simulaciones numéricas empleando un modelo 2D de diferencias finitas. Los resultados indicaron que para una evaluación práctica de los efectos de densidad, la escala de tiempo considerada juega un papel significativo. Se encontró evidencia que los efectos de la densidad sobre los parámetros hidráulicos dependen extremadamente de si el penacho todavía está en cercanías de la fuente o si se ha extendido en una región lejana de la fuente.

Además la dispersión hidrodinámica tiene un impacto grande en los efectos de la densidad. Una dispersividad mayor incrementa la propagación del penacho y una reducción total de la influencia de las variaciones de la densidad. Para valores suficientemente pequeños de la dispersividad, las inestabilidades convectivas y el fenómeno de lóbulos ocurre en el límite horizontal del penacho, que conducen a la mezcla vertical realizada del contaminante.

Posteriormente, Fan y Kahawita (1994) realizaron un estudio numérico empleando el método de diferencias finitas en un modelo 2D, para analizar la flotabilidad negativa de un penacho introducido en un medio poroso neutral estratificado, basados en el trabajo experimental desarrollado por Schincariol y Schwartz (1990). De los resultados obtenidos encontraron que el modelo empleado, reprodujo fielmente el flujo principal tan bien como las inestabilidades gravitacionales en el penacho introducido. Un análisis lineal de la estabilidad confirmó el hecho de que el penacho negativamente boyante es de hecho gravitacionalmente inestable y que la estabilidad depende de dos parámetros: un número de Rayleigh de la concentración y una escala de longitud característica que es dependiente de la dispersividad transversal.

Así mismo Schincariol y col. (1994) emplearon un código de flujo y transporte de densidad variable 2D basado en elementos finitos, para estudiar como el tipo de perturbaciones interfaciales controlaban el patrón de desarrollo de las inestabilidades, reproduciendo los resultados experimentales de Schincariol y col. (1990). El estudio demostró como los errores numéricos en los códigos de transporte de masa pueden servir como función de perturbación y conllevar al desarrollo de inestabilidades que físicamente no son realistas. Conclusiones a las que llegaron en trabajos similares Wooding y col. (1997) y Simmons y col. (1999).

Schincariol y col. (1997) evaluaron los criterios que distinguen los flujos estables e inestables para comprender los fenómenos de la inestabilidad en sistemas de densidad variable. Utilizaron el modelo numérico del trabajo realizado en 1994, como base para un análisis de estabilidad y sensibilidad en sistemas de dos dimensiones, homogéneos, y heterogéneos. Mediante el desarrollo de simulaciones numéricas incorporando los efectos de la heterogeneidad en el campo de la conductividad hidráulica, encontraron que las características estadísticas del campo de la permeabilidad (variación, correlación de escalas de longitud) jugaban un papel crítico en el inicio y el crecimiento subsecuente o el decaimiento de inestabilidades, lo cual consideran debe ser incorporado en los criterios de la estabilidad.

El análisis paramétrico realizado por Schincariol y col. (1997) confirmó que el crecimiento de las inestabilidades es promovido por el medio con valores grandes de permeabilidad y sistemas caracterizados por grandes contrastes de densidad. También confirmaron una característica del análisis de List (1965): el crecimiento de las inestabilidades está gobernado por tres parámetros dimensionales. Estos son: el número transversal de Raleygh, el radio de la transversal longitudinal del número de Raleygh y el número de onda adimensional.

Mientras que las heterogeneidades en todas las escalas probablemente reducen crecimiento de las inestabilidades una vez se ha propagado una perturbación inestable, las heterogeneidades en el medio poroso proporcionan la fuente más probable de perturbaciones iniciales al penacho. También parece que la longitud de la correlación y la varianza del campo serán cercanamente vinculadas a la capacidad de un medio poroso de propagar una perturbación inestable. Por lo tanto, con base en la relación íntima entre el crecimiento de la inestabilidad, decaimiento y la naturaleza heterogénea del campo de la permeabilidad, los criterios de la estabilidad que no incorporan las características del campo de la permeabilidad no son muy aplicables a los medios porosos naturales.

Modelos 3D

Los estudios del comportamiento inestable de penachos densos en medios porosos tridimensionales no son comunes en la literatura. Existen pocos estudios como los reportados por Hayworth (1993) y Dane y col. (1994). En este último encontraron que las inestabilidades gravitacionales simuladas en los penachos densos, introducidos desde la parte superior del medio poroso, eran reducidas mientras que aumentaba el ancho del medio poroso y se mantenían sin cambios todos los otros valores de parámetros relevantes, las condiciones iniciales y de contorno (Liu HH, Dane JH, 1997).

Posteriormente Liu y Dane (1997) evaluaron la utilidad y las limitaciones de un modelo numérico tridimensional para el estudio del comportamiento inestable en penachos densos. Las distribuciones de concentraciones de solutos simuladas fueron comparadas con los datos experimentales de Schincariol y Schwartz (1990) obtenidos para medios porosos homogéneos y por capas, empleando valores de parámetros empleados en

simulaciones 2D realizadas por Schincariol y col. (1994). Los resultados obtenidos demostraron que las inestabilidades que se observaron físicamente en penachos densos, se pueden generar numéricamente por pequeñas perturbaciones aleatorias, incluyendo truncamiento y errores round-off, dado que los valores de dispersividad empleados fueron suficientemente pequeños.

Encontraron además que para un tamaño dado de la fuente del contaminante, el ancho del medio poroso tiene un efecto significativo en la ocurrencia y el desarrollo de inestabilidades gravitacionales, ya que los penachos densos son más inestables en la dirección transversal que en la dirección longitudinal del dominio del flujo. Finalmente consideraron que las inestabilidades gravitacionales en un medio poroso tridimensional son reducidas por valores crecientes de la dispersividad, el incremento de la densidad del flujo horizontal de Darcy y el decrecimiento de la concentración del soluto en la fuente.

2.1.3 Procesos de flujo dependientes de la densidad

Por otra parte, los procesos de flujo dependientes de la densidad en medios porosos, son cruciales en una amplia gama de los problemas de transporte térmicos y salinos, en muchos las disciplinas de la investigación y diversos campos del uso (Diersch HJG, Kolditz O, 2002). Los trabajos que se han desarrollado en los flujos de mezcla advectiva se han enfocado en la interacción del agua dulce/salada en los acuíferos costeros. La formulación más simple del problema, donde el agua fresca o la menos densa cubre el agua de mar en un patrón estable de la estratificación, se ha analizado exhaustivamente. Es así como en el campo de la intrusión marina en acuíferos y el efecto de la variación de la densidad en los patrones de flujo, son temas de preocupación y estudio específico.

La aproximación de tratar el agua salada y el agua dulce como dos fluidos miscibles ha sido aplicada y mejorada en numerosos trabajos, por ejemplo Reilly y Goodman (1985), Bear (1999), Cheng y Quazar (1999). Sin embargo, al evaluar las concentraciones de sal en sistemas de flujos regionales y locales, es deseable contar con una aproximación más rigurosa de los fluidos miscibles. La primera aproximación al modelo de sistemas agua dulce/salada miscible dependiente de la densidad aplicado a problemas costeros fue hecho por Henry (1964) y Pinder y Cooper (1970).

Debido a su importancia práctica, los modelos numéricos de la intrusión de la agua salada ha recibido la atención creciente en la literatura de los recursos de agua durante los últimos 20 años, dando como resultado mejores maneras de modelar los mecanismos advectivos y dispersivos con los efectos de la densidad y viscosidad del fluido. Algunos ejemplos de ello son los trabajos realizados por Segol y col. (1975), Segol y Pinder (1976), Huyakorn y Taylor (1976), Huyakorn y col. (1987), Volker y Rushton (1982), Frind (1982), Voss (1984, 1999), Voss y Souza (1987), Putti y Paniconi (1995), Diersch (1988), Galeati y col. (1992), Gambolati y col. (1999), Kolditz y col. (1998), Bues y Oltean (2000) (citado por (Diersch HJG, Kolditz O, 2002)).

Estudios recientes indican la importancia de emplear modelos de flujo de densidad variable para la determinación del transporte de solutos en la intrusión de agua de mar en acuíferos costeros ya que dicho modelo ofrece resultados más realistas en comparación con los modelos de densidad constante (Arlai P., Koch M., 2009),

2.2 Fundamentos matemáticos del flujo de densidad variable y el transporte de contaminantes en aguas subterráneas

El desarrollo de ecuaciones matemáticas que describen los procesos de flujo y transporte subterráneo se pueden determinar a partir del principio fundamental de la conservación de la masa de un fluido o de un soluto. El proceso de flujo subterráneo está regido por las relaciones expresadas mediante la ley de Darcy, mientras el transporte contempla los cambios de la concentración de una especie química disuelta en un acuífero en cada instante de tiempo y en cada punto, debido a los procesos tales como la advección, dispersión hidrodinámica, la mezcla con un fluido fuente y reacciones químicas que se puedan dar a lugar.

El agua subterránea puede presentar compuestos disueltos que en concentraciones relativamente bajas, generan variaciones espaciales en la densidad del fluido mínimas; bajo esta condición los métodos matemáticos para cuantificar índices y patrones del flujo del agua subterránea son relativamente directos. Cuando la concentración de compuestos disueltos es significativa, ciertas propiedades como la densidad puede variar en el espacio o tiempo, además si las propiedades del agua son heterogéneas y/o transitorias, las relaciones entre los niveles de agua, las presiones del fluido y las velocidades del flujo no son ni simples ni directas. En dichos casos la ecuación de flujo se escribe y se resuelve en función de la presión y las densidades del fluido y la permeabilidad intrínseca del medio poroso (Konikow, 2002). De esta manera, la variación de las concentraciones del soluto representadas en los cambios de densidad en el medio afecta directamente tanto las ecuaciones de transporte como flujo.

Bajo las consideraciones anteriores, en esta sección se presenta las ecuaciones gobernantes para el flujo y transporte, y las ecuaciones de estado usadas para representar la densidad del fluido como una función de variables de estado.

2.2.1 Ecuaciones gobernantes del flujo de densidad variable

2.2.1.1 Flujo másico en medios porosos

Si se considera un volumen elemental representativo en un medio poroso como se muestra en la Figura 1 y basados en el principio de conservación de masa del fluido y el soluto, la tasa de acumulación de masa almacenada en el volumen es igual a la suma

algebraica de los flujos de masa a través de las caras del elemento y el intercambio de masa debido a la presencia de fuentes/sumideros. La expresión matemática para la conservación de masa es igual a:

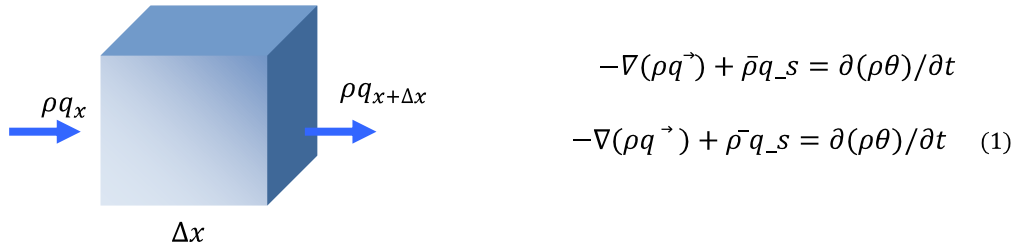


Figura 1. Volumen elemental representativo (VER) en un medio poroso

- Donde
- ∇ : es el operador gradiente $\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$
 - ρ : es la densidad del fluido en (M/L³)
 - \vec{q} : es el vector de descarga específica (L/T)
 - $\bar{\rho}$: es la densidad del fluido entrante desde una fuente o saliente a través de un sumidero (M/ L³)
 - q_s : es la tasa de flujo volumétrico por unidad de volumen del acuífero representando fuentes/sumideros (1/T)
 - θ : Porosidad
 - t : Tiempo

Los términos de la izquierda en la ecuación 1, representan el flujo másico a través de las caras del VER y el término de la derecha representa la tasa de cambio en la masa almacenada en el mismo en un periodo de tiempo dado. La tasa de cambio en la masa almacenada puede ser expandida empleando la regla de la cadena tal como se presenta en la ecuación 2.

$$\partial(\rho\theta)/\partial t = \rho \partial\theta/\partial t + \theta \partial\rho/\partial t \quad (2)$$

Si solo se considera que los cambios en la porosidad son asociados al cambio de presión en el fluido, dicho cambio es expresado en la ecuación 3 como:

$$\partial\theta/\partial t = \partial\theta/\partial P \partial P/\partial t \quad (3)$$

Bajo condiciones isotérmicas, la densidad es función de la presión del fluido en el poro y la concentración del soluto. Por lo tanto, la ecuación de estado de la densidad es:

$$\rho = f(P, C) \quad (4)$$

Al diferenciar la ecuación 4 con respecto a un tiempo dado se tiene

$$\partial\rho/\partial t = (\partial\rho/\partial P \partial P/\partial t) + (\partial\rho/\partial C \partial C/\partial t) \quad (5)$$

Reemplazando las ecuaciones 3 y 5 en 2, el almacenamiento en el VER corresponde a:

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} = \rho \underbrace{\left(\frac{\partial\theta}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t}\right)}_{(1)} + \theta \left[\underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t}\right)}_{(2)} + \underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t}\right)}_{(3)} \right] \quad (6)$$

Los términos 1 y 2 en la ecuación 6, representan la tasa de acumulación de la masa del fluido debido a los efectos de almacenamiento del agua subterránea (por ejemplo, debido a la compresibilidad del material poroso y la compresibilidad del fluido). El tercer término, representa la tasa de acumulación de la masa del fluido debido a los cambios de la concentración del soluto (Guo & Langevin, 2002).

Bear (1979) planteo la relación entre porosidad, presión y la compresibilidad de material poroso a través de la compresibilidad del material poroso (ζ) y el coeficiente de la compresibilidad del agua (ξ); los cuales son definidos de la siguiente manera:

$$\xi = 1/(1 - \theta) * \partial\theta/\partial P \quad (M^{-1}LT^2) \quad \zeta = 1/\rho * \partial\rho/\partial P \quad (M^{-1}LT^2) \quad (7)$$

Al reemplazar la ecuación 7 en 6, reordenando la ecuación se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho\theta}{\partial t} &= \rho\xi(1 - \theta) \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) + \theta\rho\zeta \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) + \theta \left(\frac{\partial\rho}{\partial C}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) \quad (a) \\ \frac{\partial\rho\theta}{\partial t} &= [\xi(1 - \theta) + \theta\zeta] \left(\rho \frac{\partial P}{\partial t}\right) + \theta \left(\frac{\partial\rho}{\partial C}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) \quad (b) \end{aligned} \quad (8)$$

El almacenamiento específico en términos de presión (S_p) representa el volumen de agua liberada desde el almacenamiento por unidad de volumen de un acuífero confinado elástico por cambio de unidad de la presión; la expresión matemática corresponde a:

$$S_p = [\xi(1 - \theta) + \theta\zeta] \quad (9)$$

Al sustituir la ecuación 9 en 8, el almacenamiento en VER es definido como:

$$\frac{\partial\rho\theta}{\partial t} = \rho S_p \underbrace{\frac{\partial P}{\partial t}}_{(a)} + \theta \underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial C}\right)}_{(b)} \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) \quad (10)$$

De esta manera se obtiene que los cambios de masa en el almacenamiento son debidos a los cambios de presión en el poro (termino a) y a los cambios en la concentración del soluto (termino b). Al sustituir la ecuación 10 en 1, se obtiene la forma general de la ecuación de flujo de densidad variable de agua subterránea en términos de derivadas parciales:

$$-\nabla(\rho\vec{q}) + \bar{\rho}q_s = \rho S_p \frac{\partial P}{\partial t} + \theta \frac{\partial\rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (11)$$

Al considerar la densidad constante, el término $\partial\rho/\partial C$ en la ecuación 11 se hace cero y los términos de densidad restantes se cancelan, de esta manera, se obtiene la ecuación

de flujo basada en la conservación del volumen del fluido comúnmente usada para casos de densidad uniforme (Guo & Langevin, 2002).

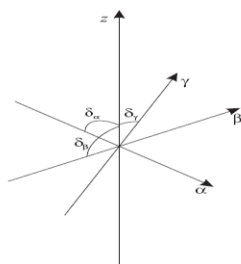
2.2.1.2 Ley general de Darcy

La ecuación gobernante del flujo de agua subterránea para densidad variable incluye el término de descarga específica (\bar{q}) el cual es calculado con la ley de Darcy, mediante la siguiente expresión general (Bear, 1979):

$$q = -\frac{k}{\mu}(\nabla P + \rho g \nabla z) \quad (12)$$

Donde k : es el tensor de la permeabilidad del medio (L^2)
 μ : viscosidad dinámica del fluido (M/LT)
 g : gravedad (L/T^2)
 P : presión (M/LT²)
 z : es la dirección de la coordenada alineada con la gravedad (positiva hacia arriba)

Considerando que los ejes principales de permeabilidad no coincidan con los ejes coordinados x, y, z ; la ley de Darcy puede ser expresada de forma general, asumiendo un sistema coordenadas alineadas a las direcciones principales de la permeabilidad tal como se muestra en la Figura 2. Donde γ representa la dirección normal al lecho, α y β representan las direcciones principales paralelas a la permeabilidad del lecho; los gradientes de presión que actúan en las direcciones α, β y γ se pueden formular por separado considerando la componente de la fuerza gravitacional q se aplica en cada dirección de la coordenada, ya que ninguna de las direcciones del sistema empleado es horizontal, por lo tanto:



$$q_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial \alpha} + \rho g \cos \delta_\alpha \right) \quad (13)$$

$$q_\beta = -\frac{k_\beta}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial \beta} + \rho g \cos \delta_\beta \right) \quad (14)$$

$$q_\gamma = -\frac{k_\gamma}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial \gamma} + \rho g \cos \delta_\gamma \right) \quad (15)$$

Figura 2. Relación entre un sistema de coordenadas alineado con el eje principal de permeabilidad

Siendo

- $q_\alpha, q_\beta, q_\gamma$ Los componentes de la descarga específica en los ejes coordinados (LT^{-1})
- $k_\alpha, k_\beta, k_\gamma$ Las permeabilidades en las direcciones (L^2)
- $\delta_\alpha, \delta_\beta, \delta_\gamma$ Los ángulos entre las coordenadas respectivas y las direcciones

Para los casos en que la densidad del fluido es variable espacialmente, generalmente se recurre al concepto de altura de agua dulce equivalente, cuya relación con la presión es:

$$h_f = \frac{P}{\rho_f g} + z \quad P = \rho_f g(h_f - z) \quad (16)$$

Donde h_f : Altura de agua dulce equivalente
 ρ_f : Densidad de agua dulce
 P : Presión en el punto de medición
 z : Elevación del punto de medida con respecto al eje de referencia

Al diferenciar la ecuación 16 con respecto a la dirección α del sistema de coordenadas considerado, se tiene:

$$\frac{\partial P}{\partial \alpha} = g\rho_f \frac{\partial h_f}{\partial \alpha} - g\rho_f \frac{\partial z}{\partial \alpha} \quad (17)$$

Remplazando la ecuación 17 en 13 y teniendo en cuenta que $\cos \delta_\alpha = \partial z / \partial \alpha$, se obtiene la siguiente relación:

$$q_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu} \left(\rho_f g \frac{\partial h_f}{\partial \alpha} - \rho_f g \frac{\partial z}{\partial \alpha} + \rho g \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right) \quad (18)$$

Siendo ρ_f la densidad del agua equivalente y ρ la densidad del agua en el punto de cálculo de la velocidad. Dado que se plantea la ecuación en términos de agua dulce equivalente, la conductividad hidráulica correspondiente a esta condición es definida por la ecuación 19 (Senger & Fogg, 1990) *citado por* (Langevin & Guo, 2006).

$$K_{fi} = -\frac{k_i \rho_f g}{\mu_f} \quad \text{Para } i = \alpha, \beta, \gamma \quad (19)$$

Donde
 k_i Permeabilidad del medio en el eje coordenado correspondiente.
 K_{fi} Conductividad hidráulica del agua dulce equivalente en el eje coordenado correspondiente.
 μ_f Viscosidad del agua dulce equivalente bajo condiciones estándar (p.e. 20 grados centígrados y 1 atm de presión)

Utilizando este término, la ley de Darcy es reescrita para cada eje coordenado correspondiente a:

$$q_\alpha = -K_{f\alpha} \frac{\mu_f}{\mu} \left[\frac{\partial h_f}{\partial \alpha} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right] \quad (20)$$

$$q_\beta = -K_{f\beta} \frac{\mu_f}{\mu} \left[\frac{\partial h_f}{\partial \beta} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \beta} \right] \quad (21)$$

$$q_\gamma = -K_{f\gamma} \frac{\mu_f}{\mu} \left[\frac{\partial h_f}{\partial \gamma} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \gamma} \right] \quad (22)$$

Generalmente en muchas aplicaciones, el termino μ_f/μ puede ser considerado igual a 1, ya que para aplicaciones prácticas, las variaciones locales en la viscosidad frecuentemente son menores que las variaciones locales no conocidas en la permeabilidad y así los efectos de la viscosidad variable son importantes solo para casos raros ((Holzbecher, 1998) citado por (Langevin & Guo, 2006)).

2.2.1.3 Ecuación de estado de la densidad

Generalmente la densidad de un fluido puede ser considerada como una función de la presión P, la concentración del soluto C, y la temperatura T.

$$\rho = f(P, C, T) \quad (23)$$

Los campos diferenciales totales considerados son:

$$d\rho = (\partial\rho/\partial P) dP + (\partial\rho/\partial C) dC + (\partial\rho/\partial T) dT \quad (24)$$

$$d\rho = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial\rho}{\partial P}\right) \rho dP + \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial\rho}{\partial C}\right) \rho dC + \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial\rho}{\partial T}\right) \rho dT \quad (25)$$

$$d\rho = \bar{\zeta} \rho dP + \frac{\bar{\alpha}}{(C_S - C_0)} \rho dC - \bar{\beta} \rho dT \quad (26)$$

Siendo $\bar{\zeta}$ Comprensibilidad del fluido,
 $\bar{\alpha}$ Es el coeficiente de expansión volumétrico del soluto, normalizado por la diferencia entre la máxima concentración (C_S) y la concentración de referencia (C_0),
 $\bar{\beta}$ Coeficiente de expansión volumétrico térmico del fluido.

La ecuación de estado para la densidad del fluido es frecuentemente aproximada a una forma lineal, integrando la ecuación 25 considerando a $\bar{\zeta}$, $\bar{\alpha}$ y $\bar{\beta}$ como constantes (Diersch & Kolditz, 2002):

$$\rho = \rho_f e^{\left[\bar{\zeta}(P-P_0) + \frac{\bar{\alpha}}{(C_S - C_0)}(C - C_0) - \bar{\beta}(T - T_0)\right]} \quad (27)$$

$$\rho = \rho_f \left[1 + \bar{\zeta}(P - P_0) + \frac{\bar{\alpha}}{(C_S - C_0)}(C - C_0) - \bar{\beta}(T - T_0)\right] \quad (28)$$

P_0 , C_0 y T_0 . corresponden a los valores de referencia respectivos.

Generalmente $\bar{\zeta}$, $\bar{\alpha}$ y $\bar{\beta}$ son considerados constantes, pero para la mayor parte de las aplicaciones esta consideración es válida para $\bar{\zeta}$ $\bar{\gamma}$ y $\bar{\alpha}$, mientras que para $\bar{\beta}$ puede ser inapropiado para aplicaciones geotérmicas donde se consideran grandes rangos de temperaturas y las anomalías térmicas en la densidad también pueden jugar un rol importante (Diersch & Kolditz, 2002).

Aproximaciones generales

La ecuación de estado para la densidad del fluido (ec. 28), bajo condiciones isotérmicas con un fluido incomprensible, se reduce a una función de la fracción de masa de la solución concentrada del soluto C. Generalmente esta función debe ser determinada en condiciones experimentales para cada caso particular, pero para soluciones que presentan una composición similar al agua de mar típica, es decir, densidades hasta 1025 kg/m³, la ecuación de estado puede ser aproximada a una relación lineal en la cual se considera el efecto combinado en la densidad de la solución debido a los factores de: la variación de la masa de sal y la variación del volumen de la solución (Zheng, Chunmiao; Bennett, Gordon D, 2002).

$$\rho = \rho_f + FC \quad (29)$$

Donde ρ_f densidad de referencia
 C concentración volumétrica del soluto o la masa de sal por unidad de volumen de la solución (ML⁻³)
 F Término adimensional

Dependiendo del trabajo experimental de referencia, el término adimensional F puede adoptar diferentes valores, como se observar en la Tabla 1.

Tabla 1. Relación entre densidad y concentración

Autor	Relación ρ y C	Consideración
Baxter and Wallace, 1916	$\rho = \rho_f + EC$	E: Constante adimensional que tiene un valor aproximado a 0.7143 para concentraciones en el rango de 0 hasta el agua del mar. ¹
Koch and Zhang, 1992	$\rho = \rho_f + \gamma C$ $\gamma_{sw} = 7.52 * 10^{-4}$ $\gamma_{nitrate} = 9.30 * 10^{-4}$ $\gamma_{acet} = -1.33 * 10^{-4}$	γ : Constante experimental, definida por Weast (1981) al graficar las pendientes de ρ/C para diferentes soluciones acuosas de sal (agua de mar), nitrato de plomo y acetona. ²
Fan and Kahawita, 1994	$\rho = \rho_f(1 + \varepsilon \tilde{C})$ $\varepsilon = (\rho_{max} - \rho_f)/\rho_f$ $\tilde{C} = C/C_0$	ρ_{max} : Densidad correspondiente a la máxima concentración, \tilde{C} : Concentración adimensional que varía entre 0 y 1. ε : Tiene valores en el rango de 0.025 a 0.030 para la concentración de sal en el agua de mar ³ .

^{1, 3} Las unidades de ρ y C son dadas en M/L³ (M: masa, L= Longitud)

² Las unidades de ρ y C son dadas en lb/ft³ y ppm respectivamente.

Para fluidos con densidades más altas que la densidad normal del agua de mar, la relación lineal no es válida; en este caso debe desarrollarse una relación empírica entre concentración de sal y densidad del fluido, la cual es diferente y particular para cada caso en cuestión (Guo & Langevin, 2002).

Herbert y col. (1988) presentaron un estudio referente al acoplamiento del transporte de solutos y el flujo del agua subterránea con densidades del fluido fuertemente

dependientes de la concentración. Para estos casos describió la ecuación de estado para la densidad, de la forma:

$$\rho^{-1} = (1 - C_m)\rho_f^{-1} + C_m\rho_s^{-1} \quad (30)$$

Donde

- (1-C_m) Masa de agua con densidad ρ_f
- C_m Masa de solución concentrada de sal con densidad ρ_s
- (1- C_m) ρ_f^{-1} Volumen de agua de referencia
- (C_m) ρ_s^{-1} Volumen de agua de solución concentrada de sal

Siendo dicha ecuación, una aproximación razonable en los muchos casos de interés, como el caso 5 de nivel 1 del proyecto internacional HYDROCOIN para la modelación de flujo de agua subterránea, el cual es una idealización del flujo sobre un domo de sal, con una geometría enormemente simplificada de modo que la atención se concentra sobre las complicaciones que provienen de la física. Esta ecuación ha sido empleada por Konikow, y col., (1997), Langevin (2002) y Johannsen y col., (2002), entre otros.

2.2.1.4 Ecuación de flujo en términos de agua dulce equivalente

Teniendo en cuenta la definición de la ley de Darcy en términos de alturas de agua dulce equivalente, la ecuación general del flujo (ecuación 11) es reescrita de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\rho K_{f\alpha} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \alpha} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\rho K_{f\beta} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \beta} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \beta} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\rho K_{f\gamma} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \gamma} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \gamma} \right) \right] = \rho S_p \frac{\partial P}{\partial t} + \theta \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} - \bar{\rho} q_s \end{aligned} \quad (31)$$

(1) (2)

Para escribir los términos de la derecha de la ecuación 31 en términos de agua dulce equivalente, debe considerarse las siguientes relaciones.

La variación de la presión con respecto al tiempo y el almacenamiento específico en términos de presión (termino 1) puede ser escribirse en términos de agua dulce equivalente, considerando la relación existente entre P y h (ecuación 16); que al ser diferenciada con respecto al tiempo se obtiene:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \rho_f g \frac{\partial h_f}{\partial t} \quad (32)$$

Adicionalmente, el almacenamiento específico en términos de alturas de agua dulce equivalente (S_t) corresponde al volumen de agua adicionado al almacenamiento o expulsado desde él, en una unidad de volumen del medio poroso por unidad de incremento o detrimento de la altura piezométrica; el cual es definido por Bear (1979) como:

$$S_f = \rho_f g [\xi(1 - \theta) + \theta \zeta_f] \quad S_f = \rho_f g S_p \text{ (ver ecuac. 9)} \quad (33)$$

Donde $\zeta_f = \zeta$, ya que la diferencia entre el coeficiente de compresibilidad del agua dulce y el agua el mar puede ser ignorado. Así, el término (1) es reescrito como:

$$\rho S_p \frac{\partial P}{\partial t} = \rho S_f \frac{\partial h_f}{\partial t} \quad (34)$$

Como se indica en el numeral 2.3.1.3, la variación de la densidad con respecto a la concentración, es aproximada generalmente a la relación lineal mostrada en la ecuación 29. Al derivar dicha relación se obtiene:

$$\rho = \rho_0 + FC \quad \frac{\partial \rho}{\partial C} = F \quad (35)$$

Por lo tanto, el termino (2) es reescrito de la siguiente manera

$$\theta \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} = \theta F \frac{\partial C}{\partial t} \quad (36)$$

Finalmente la ecuación de flujo para densidad variable en términos de alturas de agua es escrita de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\rho K_{f\alpha} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \alpha} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\rho K_{f\beta} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \beta} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \beta} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\rho K_{f\gamma} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \gamma} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \gamma} \right) \right] = \rho S_f \frac{\partial h_f}{\partial t} + \theta F \frac{\partial C}{\partial t} - \bar{\rho} q_s \end{aligned} \quad (37)$$

2.2.2 Ecuaciones gobernantes del transporte

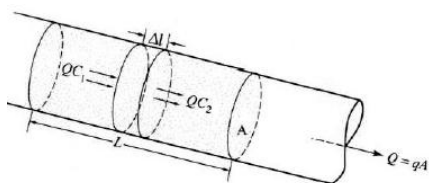
El transporte de solutos en un medio poroso puede darse por procesos de advección, dispersión mecánica y difusión. Los procesos de dispersión mecánica y difusión son englobados bajo el nombre de dispersión hidrodinámica. A continuación se hace una descripción acerca de las ecuaciones que describen cada uno de estos componentes.

2.2.2.1 Transporte por advección

El transporte advectivo o convección es el proceso por el cual los contaminantes miscibles viajan a través del medio poroso a la misma velocidad que el agua subterránea. Para muchos problemas de transporte de escala de campo, el fenómeno de la advección predomina sobre los otros procesos de transporte. El movimiento advectivo es descrito matemáticamente por la dirección y la magnitud de su velocidad, dado que a pesar de la ocurrencia de dispersión, el centro de masa del elemento

químico que es transportado por advección, se mueve a la velocidad promedio del fluido, siempre y cuando no se produzca adsorción y retardo.

La ecuación para el transporte advectivo puede ser descrita a través del balance de masa. Si se considera un VER definido por dos secciones de una columna de área transversal separadas una distancia Δl (ver Figura 3), la masa Q_m de soluto transportada a través del área transversal A será la correspondiente a la que viene en el caudal que la atraviesa disuelta a una concentración C . Si se emplea el vector de velocidad de Darcy – q –, el vector de flujo másico advectivo puede ser calculado como se presenta en la ecuación 39.



$$Q_m = Q * C \quad (38)$$

$$q_m = q * C \quad (39)$$

Figura 3. Balance de masa en un Volumen elemental representativo (VER)

La tasa a la cual la masa del soluto entra al volumen $A\Delta L$ es igual a $Q_{m1} * C_1$ y la tasa a la cual la masa sale corresponde a $Q_{m2} * C_2$. Si se considera que el flujo es estacionario, la diferencia entre la tasa de entrada y salida, representa la masa del soluto acumulada por unidad de tiempo (M) en el volumen $A\Delta L$ (Zheng & Bennett, 2002), es decir:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = QC_1 - QC_2 = qA(C_1 - C_2) \quad (40)$$

Siendo q la magnitud del escalar de la velocidad de Darcy.

Asumiendo que no hay transporte de masa desde o hacia columnas de arena vecinas debido a otras componentes del transporte como la dispersión y que la difusión del soluto puede ser despreciada; el volumen de agua contenido en el diferencial $A\Delta L$ es $A\theta\Delta L$, donde θ es la porosidad efectiva y C representa la concentración media en este volumen. Así, la tasa de cambio de la masa del soluto con respecto al tiempo puede ser expresada en términos de la tasa de cambio de la concentración con respecto al tiempo:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \theta A \Delta l \frac{\partial C}{\partial t} \quad (41)$$

Igualando las ecuaciones 40 y 41, se tiene:

$$qA(C_1 - C_2) = \theta A \Delta l \frac{\partial C}{\partial t} \quad (42)$$

Por otra parte, el término $(C_1 - C_2)$ puede ser expresado en términos del gradiente de la concentración a lo largo de la columna, por lo tanto:

$$(C_1 - C_2) = -\frac{\partial C}{\partial l} \Delta l \quad (43)$$

Reemplazando la ecuación 43 en la 42, se obtiene:

$$-qA \frac{\partial C}{\partial l} \Delta l = \theta A \Delta l \frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow -q \frac{\partial C}{\partial l} = \theta \frac{\partial C}{\partial t} \quad (44)$$

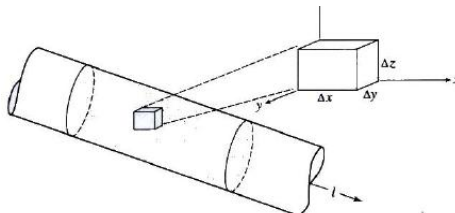
En un caso más general se podría permitir que la velocidad de Darcy variara entre las caras anteriores y posteriores del volumen $A\Delta l$ (Figura 3). Esto implica que la masa de agua dentro del volumen $A\Delta l$ es cambiante, como resultado de los efectos del almacenamiento elástico análogo a lo observado en sistemas de acuíferos confinados.

Se asume por simplificación que estos efectos del almacenamiento no generan cambios apreciables en el volumen $A\Delta l$, así, los efectos del almacenamiento son debidos solamente a los cambios en la densidad del agua en respuesta a los cambios de presión, dentro de una estructura porosa rígida (Zheng & Bennett, 2002). Bajo esta consideración, la ecuación 44 puede ser generalizada como:

$$-\frac{\partial(qC)}{\partial l} = \theta \frac{\partial C}{\partial t} \quad (45)$$

Donde el cambio en el producto qC es el factor de control de la acumulación de soluto entre las caras del volumen elemental.

Suponiendo un volumen elemental que no esté alineado con la dirección de flujo sino con un sistema de coordenadas, puede definirse como el producto de $\Delta x \Delta y \Delta z$ (Figura 4). El área transversal a la componente q_x del flujo corresponde a $\Delta y \Delta z$. Por lo tanto, la diferencia neta entre la entrada y salida de masa de soluto en el elemento en la dirección x es dada por:



$$-\frac{\partial}{\partial x} (q_x C) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (46)$$

Figura 4. Volumen elemental para desarrollar del transporte advectivo ecuación en coordenadas cartesianas

Considerando la ecuación 46 escrita para las direcciones Y y Z, la diferencia neta de la entrada y salida del soluto es:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C)\right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (47)$$

Si el volumen elemental contiene una fuente a través de la cual entra agua al régimen de flujo o un sumidero; Q_s representará la tasa volumétrica a la cual el agua es adicionada o removida y C_s corresponderá a la concentración del soluto en el agua adicionada o removida. Por lo tanto, $Q_s C_s$ es la tasa neta a la cual la masa es adicionada o sustraída del volumen elemental por la fuente/sumidero, expresada en unidades de masa por unidad de tiempo. Considerando este término en la ecuación 47 se tiene:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C)\right] \Delta x \Delta y \Delta z + Q_s C_s \quad (47)$$

La tasa de acumulación de masa del soluto en el volumen elemental es dada por $\theta \Delta x \Delta y \Delta z \partial C / \partial t$. Igualando y simplificando la ecuación 47, se obtiene la ecuación general del transporte advectivo:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C)\right] + q_s C_s = \theta \frac{\partial C}{\partial t} \quad (48)$$

Si en la ecuación 48 se divide por la porosidad, recordando que la velocidad de Darcy es dada por $v = q/\theta$, la ecuación general del transporte advectivo puede ser escrita de las formas:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z C)\right] + \frac{q_s}{\theta} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (49)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C) + \frac{q_s}{\theta} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (50)$$

Las ecuaciones 48 a 50 representan la ecuación general del transporte advectivo, que es usada cuando la velocidad y la concentración varían en tres dimensiones, además de considerar la presencia de fuentes y/o sumideros.

Enfoque euleriano

Cuando la derivada parcial $\partial C / \partial t$ en cualquiera de las tres formas de la ecuación de transporte advectivo (ec. 48 a 50) indica la tasa de cambio de la concentración del soluto (C) en un punto fijo en el espacio, son llamadas expresiones Eulerianas (Zheng & Bennett, 2002).

Las ecuaciones de este tipo pueden ser resueltas directamente por métodos numéricos estándar basados en aproximaciones de balances de masa. Desafortunadamente, la solución directa de la forma euleriana de la ecuación de transporte advectivo presenta serios problemas numéricos, los cuales son clasificados en dos tipos.

El primero tipo es la dispersión numérica, la cual tiene un efecto similar a la dispersión física, pero es causada por un error de truncamiento. Cuando la dispersión física es pequeña o despreciable, la dispersión numérica se convierte en un serio problema debido a que “los frentes de concentración” pueden tener una apariencia como se observa en la Figura 5(a). El segundo tipo de problema numérico es la oscilación artificial – Figura 5(b) – (Zheng, Chunmiao; Wang, Patrick, 1999).

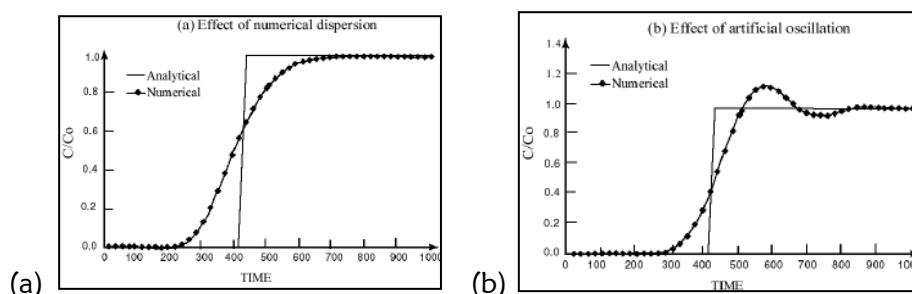


Figura 5. Errores numéricos típicos en la modelación de transporte de contaminantes (Zheng, Chunmiao; Wang, Patrick, 1999)

Enfoque lagrangiano

Una alternativa de evitar los problemas numéricos presentados por el enfoque euleriano, es el método basado en el movimiento de partículas en el fluido (particle tracking). En este método el valor de la concentración es asociado a partículas individuales en el fluido y el avance de estas partículas a través de la región de interés es calculado desde un análisis del campo de flujo. La aproximación del rastreo de partículas es basada en el punto de vista lagrangiano (Zheng & Bennett, 2002), en la cual la concentración no es asociada a un punto fijo o un volumen elemental en el espacio, pero la tasa del movimiento de las partículas o elemento se hace con la velocidad del flujo predominante.

La forma lagrangiana de la ecuación de transporte advectivo puede ser desarrollada de la ecuación general (ec. 50), donde la concentración C se refiere a la concentración asignada a un determinado número de partículas concretas del fluido que se mueven con la dirección y velocidad del flujo. Considerando la expansión del primer término de la derecha de la ecuación 50, usando la regla del producto, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C) = v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (51)$$

Donde, $(\partial v_i)/(\partial x_i)$ es llamado flujo divergente y si se considera el flujo en estado estacionario este término es igual al término de fuente/sumidero (q_s/θ) . Considerando lo anterior y reemplazando la ecuación 51 en la ecuación 50 se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{q_s}{\theta} (C_s - C) \quad (52)$$

(1) (2) (3)

El término 1 de la ecuación 52, representa la tasa de cambio de la concentración asociada a una partícula o elemento del fluido que se mueve a lo largo de una trayectoria de flujo. Para el enfoque lagrangiano la concentración C está asociada a un elemento del fluido, en el caso del transporte puramente advectivo en régimen estacionario la concentración asociada a las partículas procedentes de una fuente es igual a la concentración asociada a la propia fuente y la concentración asociada a los sumideros es igual a la asociada a las partículas que entran en ese sumidero. Lo anterior significa que los términos C y C_s son equivalentes en el caso del transporte advectivo estacionario (Zheng & Bennett, 2002). Por lo tanto:

$$v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (53)$$

La ecuación resultante (ec 53), indica que la concentración asociada a un elemento del fluido según el enfoque lagrangiano, permanece constante a lo largo de todo su recorrido a través de la trayectoria de flujo. Así, la solución al problema del transporte puramente advectivo bajo este enfoque es una cuestión de definir las trayectorias de las partículas individuales en el régimen de flujo.

2.2.2.2 Transporte por dispersión hidrodinámica

El fenómeno de dispersión hidrodinámica propaga la masa de soluto más allá de la región que ocupa si consideramos solo el proceso de transporte advectivo causando la mezcla y dilución del soluto. Este fenómeno, es una combinación de dos procesos físicamente diferentes pero hidráulicamente inseparables: la difusión molecular y la dispersión mecánica, los cuales se explican a continuación.

Difusión molecular

Un soluto en el agua puede moverse de un área de mayor concentración hacia un área donde la concentración es menor. Este proceso es conocido como difusión molecular o difusión (Fetter, 1999). La difusión ocurrirá mientras los gradientes de concentración existan, aun si el fluido no tiene movimiento. La masa del fluido difuso es proporcional al gradiente de concentración, el cual puede ser expresado como la primera ley de Fick, que es escrita para una dimensión como:

$$F = -D_d \left(\frac{dC}{dx} \right) \quad (54)$$

Donde F: es el flujo másico del soluto por una de área por unidad de tiempo
 Dd: coeficiente de difusión (L²/T)
 C: concentración del soluto (M/L³)
 dC/dx: gradiente de concentración (M/L³/L)

El signo negativo indica que el movimiento es de zonas de mayor concentración a zonas de menor concentración. En los sistemas donde las concentraciones varían con el tiempo (estado transitorio), la segunda ley de Fick es aplicada, la cual es expresada para una dimensión como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_d \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad (55)$$

Donde $(\partial^2 C)/(\partial x^2)$: es el cambio de la concentración con el tiempo (M/L³/L)

En medios porosos, la difusión no puede proceder tan rápido como ocurre en el agua porque los iones deben seguir senderos más largos, como los viajes alrededor de granos minerales, además el soluto solo se mueve a través de aquellos poros que permitan su movimiento. Acorde a esto, es necesario el uso de un coeficiente de difusión efectiva D*, el cual es definido como (Fetter, 1999):

$$D^* = \omega * D_d \quad (56)$$

Donde ω : coeficiente empírico (siempre menor a 1), relacionado con la tortuosidad del medio

La tortuosidad es una medida del efecto de la forma del camino de flujo seguido por las moléculas de agua en medios porosos. Si L es la menor distancia entre el comienzo y el final de un camino tortuoso de longitud Le, la tortuosidad T se define como: T = Le/L.

Los valores de ω , el cual siempre es menor a 1, pueden ser hallados a través de experimentos de difusión. Perkins y Johnson (1963) encontraron que ω igual a 0.7 para estudios de columnas de arenas, usando arenas uniformes. Freeze y Cherry (1979) encontraron que ω varia en un rango de 0.5 a 0.01, para estudios de laboratorio usando materiales geológicos (Fetter, 1999).

Dispersión mecánica

El agua subterránea se mueve a tasas que pueden ser menores o mayores que la velocidad lineal media. A escala macroscópica, hay tres causas básicas de este fenómeno

(Figura 6): (a) el fluido se mueve más rápido a través del centro de los poro que en la proximidad del borde del grano, (b) algunas partículas del fluido pueden viajar a lo largo de los caminos de flujo más largos en el medio poroso en comparación que otras partículas que van a la misma distancia lineal y (c) el fluido que se mueve a través de los poros mas grandes viaja más rápido que aquel que se mueve a través de poros pequeños (Fetter, 1999).

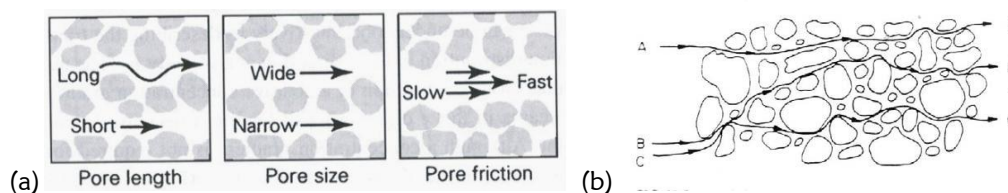


Figura 6. (a) Factores que causan la dispersión longitudinal a escala de poros individuales. (b) Trayectorias de flujo en un medio poroso que causa dispersión hidrodinámica lateral (Fetter, 1999)

Debido a las heterogeneidades de movimiento en el medio poroso, un soluto no viajará a la misma velocidad por los poros, creando una mezcla a lo largo de las trayectorias de flujo. Esta mezcla es llamada dispersión mecánica y causa una dilución del soluto en los bordes con el avance del flujo. La mezcla que ocurre en la dirección del flujo se denomina dispersión longitudinal y la que ocurre en la dirección a la trayectoria del flujo es llamada dispersión transversal (Fetter, C.W., 2001).

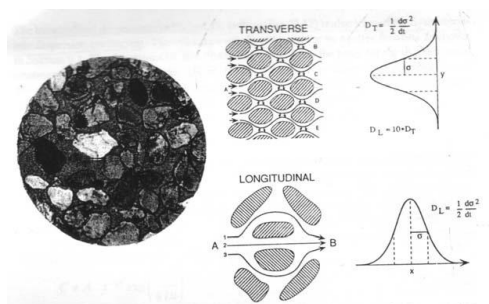


Figura 7. Dispersión longitudinal y transversal vistas a escala microscópica (Oyarzún L., 2007).

Al igual que para la difusión, la dispersión puede ser descrita por la ley de Fick (ecuaciones 54 y 55).

Los estudios a escala microscópica del fenómeno de dispersión mecánica demuestran que tanto la dispersión longitudinal como la transversal son proporcionales a la velocidad media del flujo y que la dispersión longitudinal es más grande que la transversal. Matemáticamente lo anterior se expresa introduciendo el concepto de dispersividad dinámica o simplemente dispersividad (α). Si i es la dirección principal del flujo, las siguientes definiciones son aplicadas:

Coeficiente de dispersión mecánica longitudinal $\alpha_L = \alpha_i * v_i$
 Coeficiente de dispersión mecánica transversal $\alpha_T = \alpha_j * v_j$

Siendo v_i : Velocidad lineal media del flujo de agua subterránea (L/T).
 α_i, α_j : Dispersividad dinámica en las direcciones i y j, respectivamente (L).

Dispersión hidrodinámica

Los procesos de difusión y dispersión son combinados a partir de la definición de un parámetro denominado coeficiente de dispersión hidrodinámica, D, el cual es representado por:

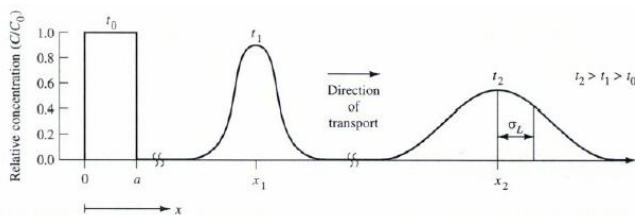
$$D_L = \alpha_L * v_i + D^* \quad (a)$$

$$D_T = \alpha_T * v_j + D^* \quad (b)$$

(57)

Siendo D_L : Coeficiente de dispersión hidrodinámica paralelo al eje de dirección principal del flujo (longitudinal).
 D_T : Coeficiente de dispersión hidrodinámica perpendicular al eje de dirección principal del flujo (transversal).

El proceso de dispersión hidrodinámica puede ser representado gráficamente por la Figura 8. Una masa de soluto es introducida instantáneamente al interior del acuífero en el tiempo t_0 . En el proceso, el soluto de concentración C_0 , se extiende haciendo que la máxima concentración decrezca con el tiempo. El modelo de difusión hidrodinámica predice que las curvas de concentración podrían tener una distribución Gaussiana, que es descrita por la media y la varianza (σ^2). Con esta distribución, los coeficientes de dispersión hidrodinámica pueden definirse como (Fetter, 1999):



$$D_L = \sigma_L^2 / 2t \quad (a)$$

$$D_T = \sigma_T^2 / 2t \quad (b)$$

(58)

Figura 8. Efecto de la dispersión sobre la curva de llegada (Fetter, 1999)

Siendo σ_L^2 Varianza de la extensión longitudinal del penacho
 σ_T^2 Varianza de la extensión transversal del penacho

La dispersión puede ocurrir también a grandes escalas, como por ejemplo el caso de aguas subterráneas que deben desviarse cuando se encuentran con zonas con suelos de relativamente baja permeabilidad o por efecto de depósitos estratificados con

intercalación de materiales de diferentes conductividades hidráulicas. En este caso, ya no es el tamaño de partícula individual si no los tiempos de flujo variables a lo largo de zonas de baja permeabilidad lo que determina la dispersividad. A esta escala, el proceso se denomina macrodispersión (Oyarzún L., 2007).

2.2.2.3 Ecuación de advección – dispersión del transporte

La derivación de la ecuación de advección – dispersión es basada en los trabajos realizados por Freeze y Cherry (1979), Bear (1972) y Ogata (1970) (Citados por Fetter, 1999), la cual es realizada bajo las hipótesis de que el medio poroso es homogéneo, isotrópico y saturado, y que para las condiciones de flujo es válida la ley de Darcy.

La derivación de la ecuación es basada en la conservación de la masa del soluto dentro de un volumen elemental representativo (VER) cuyo volumen es $\Delta l \cdot \Delta m \cdot \Delta n$ (Figura 9). El flujo sigue la dirección l, m y n corresponden a las direcciones normales. Dado que l es la dirección del flujo, solo se considera el transporte advectivo en esta coordenada.

El área transversal que atraviesa el flujo está dada por $\Delta m \Delta n$, por lo tanto, el transporte advectivo a través de ésta área es: $qC \cdot \Delta m \cdot \Delta n$. La diferencia neta entre el flujo advectivo de ambas caras corresponde a la ecuación 59. Por otra parte, la dispersión longitudinal sucederá en el área $\Delta m \Delta n$, siendo la componente dispersiva longitudinal igual a la ecuación 60 y la dispersión transversal ocurrirá en las direcciones m y n. Suponiendo que la dispersividad transversal es igual en ambas direcciones, la tasa de transporte por masa bajo esta consideración en la dirección n es igual a la ecuación 61.

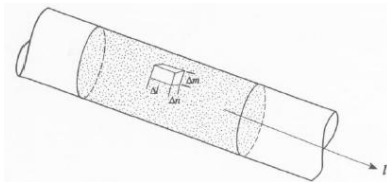


Figura 9. VER alineado con el flujo

$$-\frac{\partial}{\partial t} (qC) \Delta l \Delta m \Delta n \quad (59)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} (\theta D_L \frac{\partial C}{\partial l}) \Delta l \Delta m \Delta n \quad (60)$$

$$-D_n \left(\frac{\partial C}{\partial n} \right) \theta \Delta l \Delta m \quad (61)$$

La diferencia entre la entrada y salida de masa en las direcciones n (a) y m (b), es igual a:

$$-\frac{\partial}{\partial n} \left(\theta D_n \frac{\partial C}{\partial n} \right) \Delta n \Delta l \Delta m \quad (a) \quad -\frac{\partial}{\partial m} \left(\theta D_m \frac{\partial C}{\partial m} \right) \Delta m \Delta l \Delta n \quad (b) \quad (62)$$

Por otra parte, la tasa de acumulación de masa de soluto en el interior del elemento es igual a:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} \Delta l \Delta m \Delta n \quad (63)$$

Considerando todas las componentes, y añadiendo el valor de masa entrante/saliente por fuentes/sumideros (Q_s, C_s), el balance de masa general puede ser escrito como:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial l}(qC) + \frac{\partial}{\partial l}\left(\theta D_L \frac{\partial C}{\partial l}\right) + \frac{\partial}{\partial n}\left(\theta D_n \frac{\partial C}{\partial n}\right) + \frac{\partial}{\partial m}\left(\theta D_m \frac{\partial C}{\partial m}\right) + q_s C_s \quad (64)$$

Generalizando la ecuación 64, para los ejes coordenados x, y, z, el cambio de ejes genera la ecuación general de flujo advectivo-dispersivo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\theta D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \left(\theta D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \left(\theta D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z}\right)\right] - \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) \\ & + \frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\theta D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \left(\theta D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \left(\theta D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z}\right)\right] - \frac{\partial}{\partial z}(q_z C) \\ & + \frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\theta D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \left(\theta D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \left(\theta D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z}\right)\right] + q_s C_s \end{aligned} \quad (65)$$

Siendo, q_x, q_y, q_z los componentes de la velocidad de Darcy y q_s , la tasa volumétrica de flujo de fuentes/sumideros por unidad de volumen del acuífero.

Ecuación general del transporte

La forma general de la ecuación de transporte, considera además de los términos mencionados anteriormente, el término adicional $\sum R_n$ que representa todas las reacciones químicas, geoquímicas y biológicas que provocan la transferencia de masa entre las fases líquida y sólida, o la conversión de las especies químicas disueltas de una forma a otra.

Generalmente la ecuación general del transporte es descrita por la ecuación:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}\right)}_{(1)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta v_i C)}_{(2)} + \underbrace{q_s C}_{(3)} + \underbrace{\sum R_n}_{(4)} \quad (66)$$

Y está constituida por: el primer término de la derecha de la ecuación representa la variación de la concentración debido a la dispersión hidrodinámica. El segundo término representa el transporte advectivo. El tercer término representa los efectos de la mezcla con un fluido fuente que posee una concentración diferente a la del agua subterránea que se encuentra en la zona de recarga o de inyección y por último, el cuarto término representa todas las reacciones químicas del soluto con el medio.

2.3 Métodos numéricos para resolver las ecuaciones de flujo y transporte

Existen dos puntos de vista para describir el movimiento de un fluido en un sistema. El primero en el cual la historia de partículas individuales es descrita, es llamado métodos Lagrangianos; mientras que el segundo, cuyo foco de atención son puntos fijos en el espacio, es llamado método Euleriano. En la aproximación Lagrangiana, las coordenadas del movimiento de una partícula son representadas como una función del tiempo y son variables dependientes (Bear J. , 1972).

En la aproximación Euleriana, se investiga que sucede en puntos específicos que están fijados en el espacio dentro del campo de flujo, mientras que diversas partículas pasan a través de ellos en el curso de tiempo. Por consiguiente, una descripción completa del flujo implica una imagen instantánea de las velocidades en todos los puntos en el campo. Aquí, las velocidades son las variables dependientes, mientras que las coordenadas son independientes (Bear J. , 1972).

En general, la aproximación Euleriana es frecuentemente usada para resolver la ecuación gobernante del flujo. Por otra parte, la ecuación del transporte es en general más difícil que la ecuación de flujo subterráneo, principalmente porque las propiedades matemáticas de la ecuación varían dependiendo del término dominante de la ecuación en una situación particular (Konikow, 2002).

Los métodos numéricos usados hoy en día para la solución del transporte pueden ser agrupados dentro de cuatro clases: eulerianos, lagrangianos, mixtos (eulerianos/lagrangianos) y métodos TVD (Salamon y col., 2006). Los métodos TVD son esencialmente diferencias finitas (o volumen finito) de orden superior y como tal, pertenecen a la familia de las aproximaciones Eulerianas (Zheng y Wang, 1999).

A continuación se realiza una breve descripción de los métodos numéricos empleados en los modelos numéricos empleados acorde a su clasificación. Una descripción más detallada de los diferentes métodos puede encontrarse en Zheng y Bennett (2002).

2.3.1 Métodos eulerianos

Dentro de la aproximación euleriana, se encuentran los métodos de: diferencias finitas (DF), elementos finitos (EF) y disminución de la variación total (TVD).

Los modelos numéricos empleados en el desarrollo del presente trabajo, tienen como fundamento el método de diferencias finitas para el cálculo del proceso de flujo. Por otra parte, la ecuación de transporte de advección – dispersión tiene como alternativa de solución las diferencias finitas y el método TVD.

Método de diferencias finitas

Las ecuaciones en derivadas parciales que describen los procesos de flujo y transporte en el agua subterránea incluyen términos que representan las derivadas de las variables continuas. Los métodos de diferencias finitas tienen como objetivo aproximar estas derivadas (o pendientes de las curvas) mediante cambios lineales discretos en unos intervalos discretos de espacio o de tiempo. Para ello se requiere que el área del dominio sea discretizada en una malla. Si los intervalos son lo suficientemente pequeños entonces todos los incrementos lineales representan una buena aproximación de la superficie curvilínea verdadera (Konikow, 2002).

Existe un cierto error implícito al aproximar las derivadas mediante diferencias finitas, pero este error disminuye a medida que la discretización es más fina. Este error se denomina “error de truncamiento” ya que la substitución de una derivada por un cociente de diferencias equivalente a usar las series truncadas de Taylor, de manera que la solución exacta de una ecuación diferencial difiere de la solución correspondiente a la ecuación diferencial (Peaceman 1977) (citado por Konikow, 2002).

Tampoco se puede conseguir una solución “exacta” de la ecuación diferencial a causa de los límites de precisión al almacenar los números en un ordenador. Al resolver un gran sistema de ecuaciones diferenciales se realizan muchas operaciones aritméticas durante las que se pueden ir acumulando errores de redondeo. Debido a estos errores se pueden presentar problemas de dispersión numérica y oscilaciones artificiales, por ello, el método estándar de diferencias finitas es conveniente solamente para resolver modelos de transporte no dominados por la advección (Zheng y Bennett, 2002).

Métodos TVD

El término TVD se refiere a la característica compartida por estos métodos, de que la suma de las diferencias de la concentración entre los nodos adyacentes disminuye sobre pasos sucesivos del transporte, una condición necesaria si se pretende que la solución del transporte se mantenga libre de oscilaciones falsas.

Dado que generalmente los métodos de orden superior (higher-order) reducen al mínimo la dispersión numérica a expensas de introducir oscilaciones falsas, los esquemas de TVD típicamente son implementados con procedimientos numéricos (llamados limitadores del flujo) para suprimir o para eliminar oscilaciones falsas mientras que preservan los frentes de concentración agudos (Zheng y Wang, 1999).

Comparados con los métodos estándar de diferencias finitas, los esquemas de TVD generalmente son mucho más exactos en solucionar problemas dominados por la advección, no obstante con una mayor carga de cómputo. Con respecto a algunos métodos lagrangianos o mixtos, los esquemas de TVD no son tan eficaces en la eliminación de la dispersión numérica mientras que preservan los “picos” de concentración. Pero por la propiedad de la conservación de la masa y los

requerimientos menores de memoria, los esquemas TVD representan una mejor opción de solución en comparación a otros métodos eulerianos como las DF o EF.

2.3.2 Métodos lagrangianos

Los métodos lagrangianos tratan al transporte de masa del soluto por medio de una gran cantidad de partículas móviles, y evitan solucionar la ecuación de advección – dispersión directamente. Como consecuencia, los métodos lagrangianos están libres de dispersión numérica y son particularmente efectivos para manejar los problemas dominados por el transporte advectivo. El método de camino aleatorio (random walk) es el típico ejemplo de aproximación lagrangiana, el cual utiliza la técnica de rastreo de partículas (particle tracking) para aproximar el transporte por advección. El efecto de dispersión es incorporado por la adición de desplazamientos aleatorios a la locación de la partícula después de cada movimiento advectivo. La sorción y el decaimiento son manejados por el ajuste de la velocidad y la masa llevada por las partículas (Zheng y Bennett, 2002).

Ejemplos de aplicación de este método en la modelación del transporte de solutos se presentan en los trabajos de Ahlstrom y col. (1977), Prickett y col. (1981), Uffink (1985, 1988), Kinzelbach (1986, 1988), Tompson y Gelhar (1990), Tompson y Dougherty (1992), Kitanidis (1994), LaBolle y col. (1996, 1998) (citados por Zheng y Bennett, 2002), Salamon y col. (2006), Capilla y col., (1998), Llopis-Albert y Capilla (2009-(2)).

2.3.3 Métodos mixtos: eulerianos - lagrangianos

Los métodos mixtos, resultan ser los métodos numéricos de mayor diversidad para la resolución de los problemas de transporte. Las aproximaciones mixtas permiten tomar ventaja de las características de cada aproximación y por lo tanto, cada término de la ecuación de transporte es resuelto por distintos métodos. Es así como los métodos lagrangianos son empleados para el manejo de la componente advectiva dado a que son particularmente convenientes y los métodos eulerianos por su efectividad son utilizados para el manejo de la dispersión y el término de las reacciones del soluto.

Dependiendo del uso de diferentes técnicas lagrangianas para la aproximación del término advectivo, los métodos mixtos pueden ser agrupados como:

- a) Método de las características (MOC),
- b) Método de las características modificado (MMOC) y
- c) Combinación de ambos métodos: método híbrido (HMOC).

Método de las características MOC

Al principio de la simulación, un sistema de partículas móviles se distribuye en el campo del flujo aleatoriamente o con un patrón fijo. Una concentración y una posición en el sistema coordinado cartesiano se asocian a cada una de estas partículas. Las partículas

son rastreadas hacia adelante a través del campo del flujo, usando un incremento pequeño del tiempo, basados en el método de particle tracking. Al final de cada incremento de tiempo, la concentración media en la celda es debida solamente a la advección en el incremento del tiempo (Zheng y Wang, 1999).

Una de las principales características del método es que está virtualmente libre de dispersión numérica causada por errores de truncamiento espaciales y trabaja bien en los casos donde existen frentes de concentración agudos.

La principal desventaja es que dada la cantidad de partículas que emplea por celda, es un método lento y requiere gran cantidad de memoria de la computadora, en especial cuando se trabaja en tres dimensiones. Además, en términos de balance de masa no es un método conservativo.

Método de las características modificado MMOC

La técnica de MMOC es similar a la técnica del MOC excepto en el tratamiento del término de la advección. En este método, en la rejilla fija del dominio se ubica una partícula ficticia en el punto nodal y es rastreada hacia atrás para encontrar su posición en un intervalo de tiempo anterior al evaluado. Así, la concentración calculada corresponde al efecto de la advección durante el periodo, desde el tiempo precedente.

El método emplea solo una partícula para cada celda de la diferencia finita, utiliza conjuntamente un esquema simple de interpolación de bajo-orden y no almacena las identidades de la partícula en la computadora, lo que hace que sea un esquema más rápido. Sin embargo, el uso del esquema de interpolación de bajo-orden introduce una dispersión numérica considerable, especialmente para los problemas con frentes agudos de concentración. Por lo tanto, su uso está condicionado a situaciones donde los frentes de concentración sean suaves.

Método híbrido de las características HMOC

El método híbrido es una adaptación automática del proceso de solución, a la naturaleza del campo de la concentración. Cuando hay presencia de frentes agudos de concentraciones, el término de la advección es solucionado por la técnica de MOC, en caso contrario, la advección es solucionada por la técnica de MMOC.

La dificultad del uso del método se basa en la selección del criterio apropiado que define el control de la interacción entre los esquemas de MOC y de MMOC. Este procedimiento por su adaptabilidad puede combinar las mejores características de ambos métodos: proporcionar soluciones exactas a los problemas del transporte sobre la gama de números de Peclet a partir de la 0 al ∞ , dar soluciones libres virtualmente de dispersión numérica y usar pocas partículas (Zheng y Wang, 1999).

2.3.4 Comparación entre métodos

En la Tabla 2 se indican las características más importantes de los diferentes métodos usados en los modelos numéricos a utilizar.

Tabla 2. Comparación de los diferentes métodos numéricos

Característica	FD		TVD	MOC	MMOC	HMOC
	Explicitas	Implícitas				
Esfuerzo computacional y demanda de almacenamiento	Bajo	Medio	Grande	Grande	Bajo	Grande
Dispersión numérica y/o oscilaciones	Grande	Grande	Pequeña	Nula	Medio	Pequeña
Balance de masa	Exacto	Exacto	Exacto	No exacto	No exacto	No exacto
Máximo paso de tiempo	Pequeño	Grande	Pequeño	Grande	Grande	Grande

Fuente: Schäfer W.

Considerando las diferentes recomendaciones típicas para la solución de los problemas del transporte, en la Tabla 3 se presenta los métodos recomendados acorde a las características del modelo de aplicación. Cabe aclarar que estas recomendaciones no son universalmente validas, pero puede considerarse una guía de orientación (Schäfer, 2009).

Tabla 3. Métodos numéricos recomendados a usar en casos de aplicación específicos

Características del modelo de aplicación	Método recomendado
Gradientes de concentración espacialmente pronunciados (ej. Penacho de contaminantes con una fuente puntual, estudios de laboratorio con contaminantes)	TVD, MOC, HMOC
Transporte de contaminantes a escala regional con gradientes de concentración pequeños (ej. Transporte de nitrato con fuentes distribuidas)	FD
Exactitud en balance de masas (ej. Acoplamiento de transporte y reacción no lineales)	FD, TVD
Pasos de tiempo requeridos grandes (ej. Transporte de grandes rangos de soluto en décadas)	FD implicit, HMOC
Números de Peclét de mallas grandes (pequeñas dispersividades o espaciamiento grande del mallado)	MOC, HMOC

Fuente: Schäfer W.

2.4 Modelo numérico SEAWAT

SEAWAT 2000 es un programa de simulación tridimensional para la modelación de flujo transitorio bajo condiciones de densidad variable, pero considera a ésta exclusivamente como función de la concentración de soluto, despreciando los efectos de la temperatura. El código desarrollado por la USGS a cargo de Weixing Guo y Christian Langevin (2002), combina en un solo programa los códigos comúnmente usados MODFLOW y MT3DMS, solucionando acopladamente las ecuaciones de flujo y transporte de solutos, mediante modificaciones a los códigos base.

A continuación se hace una breve descripción de la estructura del programa en general, el modelo matemático y las aproximaciones del flujo de densidad variable empleadas.

Para mayor información se puede consultar a (Guo & Langevin, 2002) y Langevin y col. (2003).

2.4.1 Estructura del programa

Como se mencionó anteriormente, SEAWAT es una combinación de los códigos MODFLOW y MT3DMS. Partes del código original de MODFLOW (Harbaugh y col. 2000) fueron modificadas para resolver la ecuación de flujo bajo condiciones de densidad variable mediante la reformulación del sistema de ecuaciones en términos de flujo másico en vez de volumen de flujo, incluyendo los términos de densidad necesarios.

El acoplamiento entre los procesos de flujo y transporte es desarrollado a través de la aproximación de la sincronización de los pasos de tiempo y los ciclos entre las soluciones de MODFLOW de la ecuación de flujo y las soluciones del MT3DMS de la ecuación de transporte, como se indica en la Figura 10. La variación espacio-temporal de la concentración de soluto se simula utilizando las rutinas del MT3DMS.

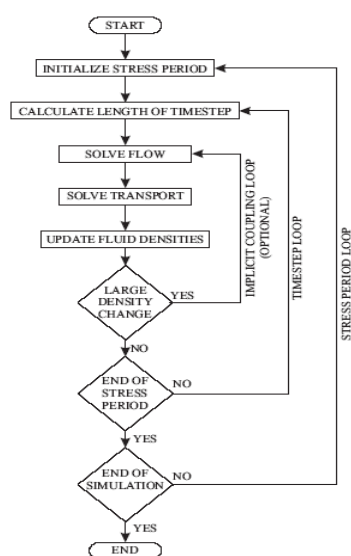


Figura 10. Cuadro de flujo generalizado del programa SEAWAT. Fuente: (Guo & Langevin, 2002)

SEAWAT utiliza tanto el procedimiento explícito o implícito para acoplar las ecuaciones de flujo y de transporte de soluto. En el procedimiento explícito, la ecuación de flujo es resuelta para cada paso de tiempo y el campo de velocidades advectivas resultante se utiliza para resolver la ecuación de transporte, este procedimiento de resolución alterna de ambas ecuaciones se repite hasta completar el período simulado.

En el procedimiento implícito, las ecuaciones de flujo y transporte son resueltas numerosas veces en cada paso de tiempo, hasta que la diferencia en la densidad del fluido entre iteraciones consecutivas es menor a la tolerancia especificada previamente. Bajo esta consideración, SEAWAT solo trabaja con el método de diferencias finitas para resolver la ecuación de transporte en el MT3DMS.

En la aproximación de acoplamiento implícito no se trabaja con métodos de partículas porque la memoria que podría ser requerida para almacenar información de la partícula puede ser excesiva (Guo & Langevin, 2002). El programa mantiene la estructura modular característica de MODFLOW y el MT3DMS. Debido a esta estructura, los procesos disponibles pueden ser clasificados en:

- ✓ Procesos globales (GBL); que corresponden a los procesos de control de ejecución del programa, requeridos para todas las simulaciones realizadas.

- ✓ Procesos de flujo (GWF); referidos a las rutinas base de MODFLOW para el cálculo del flujo.
- ✓ Procesos de flujo de densidad variable (VDF); se refiere a las rutinas GWF modificadas para resolver la ecuación de flujo bajo la consideración de densidad variable.
- ✓ Procesos de transporte (IMT); se refiere a los procesos de transporte de MT3DMS integrados para su solución secuencial (explícita) o simultánea (implícita) para cada paso de tiempo.
- ✓ Procesos OBS; corresponden a los procesos de observación del flujo - datos medidos, niveles piezométricos, condiciones de contorno -.

Estos procesos pueden ser usados en diferentes combinaciones acorde al planteamiento del problema a resolver. Existen cuatro modos de simulación posibles con el código, que considera tanto procesos de flujo de densidad constante como variable, indicados en la Figura 11. Para los modos de ejecución de densidad constante con o sin transporte (Modos A y B), los resultados obtenidos con el código también pueden ser obtenidos usando las versiones estándar de MODFLOW 2000 y MT3DMS.

	TRANSPORT EXCLUDED	TRANSPORT INCLUDED
CONSTANT-DENSITY GROUND-WATER FLOW	A GLO + GWF GLO + GWF (OBS) GLO + GWF (OBS + SEN) GLO + GWF (OBS + SEN + PES)	B GLO + GWF + IMT GLO + GWF (OBS) + IMT GLO + GWF (OBS + SEN) + IMT GLO + GWF (OBS + SEN + PES) + IMT
VARIABLE-DENSITY GROUND-WATER FLOW	C GLO + VDF GLO + VDF (OBS)	D GLO + VDF + IMT GLO + VDF (OBS) + IMT E GLO + VDF + IMT GLO + VDF (OBS) + IMT

UNCOUPLED FLOW AND TRANSPORT
 COUPLED FLOW AND TRANSPORT

EXPLANATION
 GLO GLOBAL PROCESS
 GWF GROUND-WATER FLOW PROCESS
 OBS OBSERVATION PROCESS
 SEN SENSITIVITY PROCESS
 PES PARAMETER ESTIMATION PROCESS
 IMT INTEGRATED MT3DMS TRANSPORT PROCESS
 VDF VARIABLE-DENSITY FLOW PROCESS

Figura 11. Modos de simulación disponibles con el programa SEAWAT 2000. Fuente: (langevin y col., 2003)

Existen tres modos de trabajo con flujo de densidad variable y transporte (Figura 11C, D y E), en los cuales los procesos de calibración (SEN y PES) no son compatibles con los procesos VDF.

En el modo de trabajo C, el usuario especifica la matriz de densidades del fluido que es mantenida constante durante el periodo de cálculo. En este esquema se asume que la densidad no cambia como respuesta de un esfuerzo hidrológico impuesto. Por otra parte, en el modo de simulación de densidad variable incluido el transporte, existen dos opciones: trabajar con el flujo y transporte sin que estén acoplados (modo D), o con los procesos acoplados (modo E).

En el modo D, el flujo trabaja desacoplado del transporte, lo que significa que la solución de flujo es afectada solamente por las densidades especificadas por el usuario, de esta manera, el campo de flujo no es afectado por las simulaciones de las concentraciones de soluto desarrolladas con los procesos IMT.

Finalmente, el modo E es usado para simular el acoplamiento de los procesos de flujo y transporte. En este modo de trabajo, las densidades del fluido que son usadas en los procesos VDF, son calculadas a partir de la ecuación de estado y de las concentraciones

de soluto simuladas. Así, el campo de flujo es afectado por la variación de las concentraciones.

2.4.2 Modelo matemático y aproximaciones empleadas

El modelo matemático empleado se basa en la modificación de la ecuación de flujo para conservar la masa del fluido más que el volumen del mismo, empleando el concepto de altura de agua dulce equivalente como la variable dependiente principal. De esta manera la ecuación del flujo es reformulada en términos de masa del fluido incluyendo las aproximaciones apropiadas de los términos de densidad.

La ecuación gobernante del flujo de densidad variable, definida y descrita en la ecuación 37 es:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\rho K_{f\alpha} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \alpha} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\rho K_{f\beta} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \beta} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \beta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\rho K_{f\gamma} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \gamma} + \left(\frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \frac{\partial z}{\partial \gamma} \right) \right] = \rho S_f \frac{\partial h_f}{\partial t} + \theta E \frac{\partial C}{\partial t} - \bar{\rho}_s q_s$$

Donde, α, β y γ son coordenadas de ejes ortogonales, alineados con la dirección principal de la permeabilidad; K_f es la conductividad hidráulica de agua dulce equivalente; S_f es el almacenamiento específico en términos de agua dulce equivalente, t es el tiempo; θ es la porosidad efectiva; C es la concentración del soluto; $\bar{\rho}_s$ es la densidad del fluido proveniente de fuentes externas y q_s es la tasa de flujo volumétricapor unidad de volumen del acuífero, proveniente de fuentes y/o sumideros.

Para el acoplamiento de los procesos de flujo y transporte, el código asume que la variación de la concentración es debida únicamente a los cambios de concentración, despreciando efectos de presión y temperatura. La ecuación de estado de la densidad, es definida por la ecuación 35:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial C} C$$

Donde, $\partial \rho / \partial C$ adopta el valor de 0.7143, para condiciones similares al agua del mar.

Los procesos VDF resuelven la ecuación gobernante del flujo (ec. 35) usando la aproximación de diferencias finitas centradas en el bloque. Para mayor detalle ver (Guo & Langevin, 2002). Los procesos de transporte son calculados a través de los procesos IMT, que tienen como base, todas las aproximaciones de cálculo definidas en el programa MT3DMS (para mayor detalle consultar Zheng y Wang, 1999).

Los procesos de solución de la ecuación del transporte no presentan modificaciones de fondo, sino, modificaciones en mecanismos para facilitar el acoplamiento con los procesos GWF y VDF. Por lo tanto, las opciones de resolución de la ecuación del transporte en el código SEAWAT dependen del tipo de acoplamiento definido y

corresponden a: diferencias finitas (DF), método de las características (MOC), método modificados de las características (MMOC), método híbrido (HMOC) y TVD.

2.4.3 Limitaciones

El programa resuelve bajo cualquier esquema las ecuaciones de flujo y transporte para cada paso de tiempo, aun si se consideran sistemas de densidad constante o variable, por lo tanto, el tiempo de ejecución de las simulaciones es sensiblemente mayor en comparación a los programas base (MODFLOW y MT3DMS).

No existe un planteamiento general para la ecuación de estado de la densidad, ésta es basada en la aproximación lineal planteada por Baxter y Wallace (1916) (ver Tabla 1) y definida por la ecuación 35. Dicha ecuación tiene aplicación en sistemas que interactúan con fluidos con características similares al agua de mar. En el caso del uso de solutos con características diferentes, es necesaria la determinación del factor F por medio de ensayos de laboratorio.

Debido a la incompatibilidad de los procesos de calibración con los procesos VDF, no puede emplearse esta herramienta para ajustar los parámetros de los modelos realizados.

2.5 Resumen y conclusiones

Los trabajos previos sobre los flujos advectivos mixtos han permitido identificar la influencia de la variación de densidades en los patrones de flujo y transporte de contaminantes en medios porosos saturados. En especial, los trabajos de laboratorio experimental sobre el comportamiento de penachos densos y la identificación de la formación de inestabilidades gravitatorias, han contribuido al entendimiento de cómo los gradientes de densidad causados por las variaciones en la concentración del soluto, pueden crear patrones complejos de flujo y transporte, afectando no solo los tiempos de desarrollo del penacho, sino también las dimensiones del zona de mezcla del soluto.

Los frentes de trabajo en el tema de transporte de penachos densos se han enfocado principalmente en el estudio de la generación, identificación y predicción de las inestabilidades gravitatorias, mediante el desarrollo de modelos matemáticos que logren describir dicho fenómeno, respaldados en trabajos experimentales. Las referencias de aplicación de los modelos numéricos para el estudio del movimiento de penachos densos en casos reales y el uso de modelos tridimensionales son escasos en la literatura.

El modelo matemático empleado para la consideración de los efectos de la variación de la densidad en los procesos de flujo, supone la necesidad de acoplamiento con la ecuación que describe el transporte. Dada la complejidad de esta última ecuación, el uso de diferentes métodos numéricos de solución para cada término componente

(advección, dispersión, reacciones) influye en la obtención de resultados más exactos y realistas al problema propuesto.

Considerando las diferentes ventajas y desventajas de los métodos numéricos descritos, el uso de aproximaciones lagrangianas supone soluciones libres problemas numéricos, aunque la desventaja en la exactitud del balance de masa podría influir en los cálculos de gradientes de densidad, especialmente en los tiempos de desarrollo cuando se inicia el movimiento del soluto en el medio. Por otra parte, el uso de aproximaciones Eulerianas tiene implícito los problemas de dispersión numérica, pero la ventaja de la conservación de masa puede representar una mejor opción.

Teniendo en cuenta lo anterior y las consideraciones de uso de cada método, para resolver la componente advectiva del transporte se escogió un método representativo para cada aproximación. De la aproximación lagrangiana, el MOC fue seleccionado, dado a que trabaja bajo esquemas de frentes agudos de concentración, mientras que para la aproximación euleriana, el TVD es el esquema escogido, por ser un método que reduce la dispersión numérica.

3

Modelo físico experimental

El tanque experimental en fase de prototipo, fue diseñado y construido en la Universidad Politécnica de Valencia (Sanchez, 2007), para la investigación de la influencia de la heterogeneidad en el transporte no reactivo (Sánchez y col., 2008).

Esta construido en metacrilato debido a las características del material en términos de deformación, resistencia y a la facilidad para observar los fenómenos de transporte en su interior. El tanque cuenta con un longitud total de 1.4 m, una altura de 0.4 m. y espesor de 0.05 m. En su interior posee tres cámaras, dos ubicadas en los extremos cada una de 0.10 m de longitud, que actúan como zona de entrada y salida de agua. Y una cámara intermedia de 1.2 m en la que se encuentra el medio poroso (Figura 12). Los detalles constructivos pueden ser revisados en (Sanchez, 2007).

Las cámaras de entrada y salida, están separadas de la cámara intermedia por una malla metálica de $560 \mu\text{m}$ de abertura, tamaño inferior a la granulometría del medio utilizado. Para conseguir la entrada de agua de forma más uniforme a lo largo de toda la altura del tanque, tiene un tubo de PVC de 335 mm de diámetro ranurado en toda su longitud. Para contrarrestar el empuje lateral ejercido por el medio poroso sobre la malla, el espacio restante está relleno con perlas de vidrio de 2 mm de diámetro.



Figura 12. Tanque experimental Universidad Politécnica de Valencia

En la cámara intermedia se encuentra el medio poroso el cual fue introducido empleando el método de relleno húmedo, a través de elementos de 255 mm longitud, 20 mm de altura y 50 mm de profundidad, para obtener un medio discretizado por bloques (Sanchez, 2007).

El tanque cuenta con tubos de entrada y salida ubicados en la parte inferior, los cuales pueden ser conectados a tanques de nivel constante que descansan sobre plataformas móviles ajustables a la altura deseada, para controlar así, la altura piezométrica en las zonas de entrada y salida, y generar un gradiente de potencial constante a lo largo de la vertical.

Dado que se considera un tanque de análisis bidimensional, en una de las paredes laterales se ubican todos los puertos de medición y muestreo, mientras que la pared contraria se encuentra despejada para que se pueda observar fácilmente los ensayos de trazadores realizados en él.

3.1 Medio poroso

3.1.1 Medidas físicas

El medio poroso utilizado en el relleno del tanque fue principalmente arenas silíceas químicamente inertes, de diferentes granulometrías concretas y uniformes. Se emplearon en total cinco tipos de arenas cuya conductividad fue determinada mediante el test ASTM 2434. La porosidad fue calculada mediante ensayos de laboratorio. En la Tabla 4 se presentan los resultados obtenidos para cada una de las características físicas de las granulometrías usadas.

Tabla 4. Características físicas del medio poroso

Tipo de arena	Tamaño medio del grano	Conductividad		Porosidad efectiva (%)
		cm/s	m/d	
a1	1.2 mm	0.086977	75.1481	0.21
a2	0.7 mm	0.049301	42.5960	0.17
a3	0.12 mm	0.012945	11.1844	0.15
a4	600 μ	0.002662	2.2999	0.11
a5	120 μ	0.00069	0.5961	0.09

3.1.2 Distribución espacial

Con el tanque se pretendió reproducir la heterogeneidad presente en un acuífero confinado natural. Para ello se tomo como referencia la información existente de la distribución de campos de conductividad en el acuífero denominado MADE site, localizado en Columbus, Mississippi, USA (Llopis-Albert & Capilla, 2009).

El medio conformado está compuesto por cinco tipos de conductividad acorde a las arenas definidas previamente, distribuidas heterogéneamente a lo largo y alto de las dimensiones de la cámara interna del tanque. Para ello, se conformo 47 columnas y 20 capas de bloques de 255 mm de longitud, 20 mm de alto y 5 mm de ancho. La heterogeneidad planteada mostrada en la Figura 13, se considera para el plano X -Z, ya que en Y la distribución es uniforme.

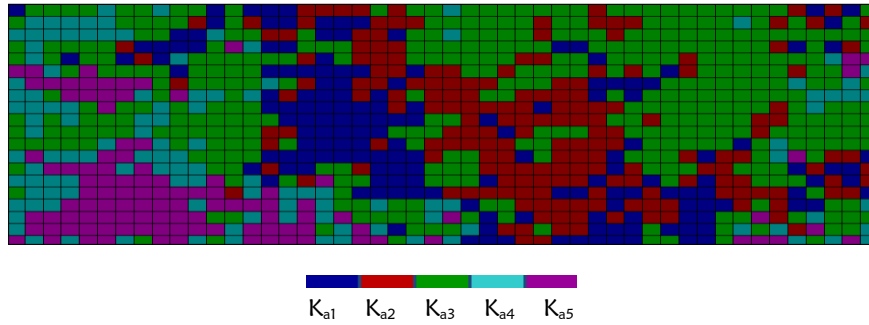


Figura 13. Distribución espacial del campo de conductividades y porosidades (M_{ax} : conductividad/porosidad arena tipo)

El medio conformado se presenta en la Figura 14, en la cual se observa las diferencias entre las granulometrías utilizadas.



Figura 14. Configuración del medio poroso construido

3.2 Instrumentación y toma de datos

3.2.1 Medidas piezométricas

Para la adquisición de datos experimentales de niveles piezométricos en el interior del tanque, se emplearon sensores de presión. Los sensores empleados fueron transductores de presión, los cuales convierten la presión que se ejerce en el sensor del instrumento en una señal eléctrica, por medio de una resistencia de magnitud variable (un potenciómetro). Las señales que se reciben como medida de presión son en realidad, diferencias de potencial. Estas diferencias de potencial se recogen en un voltímetro digital, que fue conectado a un ordenador para su control y el almacenamiento de los datos. Se estableció una relación señal eléctrica-presión, mediante una función determinada a través de la regresión lineal de datos medidos (ver mayor detalle en

(Sanchez, 2007)) y de esta forma se registro en el espacio y tiempo, los datos de niveles piezométricos en el medio propuesto.

Se utilizaron 36 transductores de presión distribuidos en 3 filas y 12 columnas (ver Figura 15). Para su fijación en el tanque, se emplearon agujas de 25 mm de longitud las cuales fueron colocadas en la boca del sensor y atraviesan en el medio poroso, a través de orificios pequeños hechos en una de las paredes longitudinales del tanque, los cuales posteriormente fueron sellados con silicona para evitar la pérdida de presión (Sanchez, 2007).

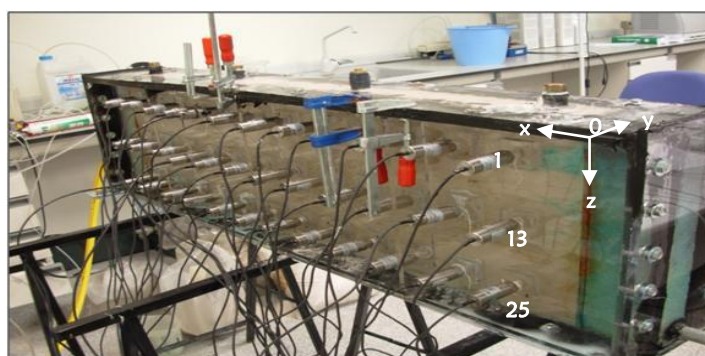


Figura 15. Ubicación de los transductores de presión en el tanque de experimentación (para su identificación, se enumeraron de derecha izquierda en orden descendente)

De esta manera, se recolecto información de niveles piezométricos en 36 puntos en el medio poroso, de manera directa y continua a través de las lecturas de los sensores. Los datos recolectados corresponden a las presiones determinadas en el centro del tanque.

3.2.2 Medidas de concentración

La estimación de concentraciones de trazador se realizo mediante el análisis de imágenes digitales. Esta técnica consiste en estimar la concentración de un tinte coloreado a través de la intensidad de color emitida por él. Para asegurar que la medida de color es debida únicamente al tinte, además de la fotografía digital del medio con el tinte utilizado como trazador, es necesaria una fotografía del medio completamente libre de trazador (imagen “blanco”) y otra de una superficie de color homogéneo para valorar el efecto de la iluminación no homogénea (Sanchez, 2007).

A fin de determinar la concentración de trazador en un punto del medio, se acepta que la emisión de color depende exclusivamente de la concentración de trazador. Para aceptar esta consideración, es necesario eliminar o al menos calibrar la influencia del resto de efectos en la imagen final obtenida. Para ello se debe restar de la imagen obtenida, la componente debida al color del medio. De esta forma, a las imágenes tomadas en cada ensayo se le resta la imagen “blanco”, para poder posteriormente procesar las intensidades debidas exclusivamente al trazador.

La estimación de la intensidad del color emitido se basa en la descomposición de las imágenes obtenidas en sus colores primarios: rojo (R), verde (G) y azul (B), de imágenes tomadas en formato RAW. Una vez descompuesta la imagen en sus colores primarios, mediante un procedimiento estadístico y aplicando las herramientas de análisis de imagen del paquete informático Matlab 7.1, se determinó el logaritmo de la concentración de trazador, ya que este es función de los valores del brillo en cada una de esas imágenes primarias.

Así, el análisis de las componentes de color de la imagen debida al trazador muestra como resultado un mapa muy detallado de las concentraciones de éste en cada punto del penacho. Para un mayor detalle del análisis de la fotografía digital ver en (Sanchez, 2007).

El trazador usado fue Brilliant Blue FCF (colorante E-133 según la clasificación europea), cuyas características principales son la neutralidad y la nula adsorción en medios libres de materia orgánica. Este colorante ha sido utilizado como trazador en numerosos estudios de infiltración en suelos y flujo subterráneo, debido a su estabilidad y facilidad de detección. En la Tabla 5, se presentan las características más representativas.

Tabla 5. Análisis químico de la forma comercial del colorante Brilliant Blue FCF

Características	Valores
Descripción	Líquido de color azul oscuro. Solución en agua con estabilizadores y conservantes
Contenido total de colorante % peso	20± 1
Disolvente	Agua
Cloruro de sodio / sulfatos (%)	Max. 3.0
Impurezas de color (%)	Max. 1.0
Compuestos intermedios (%)	Max. 0.5
Aminas primarias aromáticas no sulfonadas (%)	Max 0.003
Arsénico (ppm)	Max 1.0
Plomo (ppm)	Max. 10.00
Metales pesados (ppm)	Max. 20.00
Solubilidad (gr/l)	320
Densidad (kg/m ³)	1088
Concentración de saturación (gr/l)	200
Concentración inicial (gr/l)	170

Fuente: Sánchez (2007)

Se utilizó la cámara digital Canon 350D de 8 megapíxeles con una resolución espacial de 9 Mbs y capacidad para almacenar datos en formato RAW. Para la iluminación del ensayo se emplearon dos lámparas de xenón de bombillas de alta frecuencia y una temperatura de color estándar de 5500 K, para obtener una representación del color lo más fiel posible.

3.3 Experimentación realizada

El experimento realizado en el tanque experimental, fue desarrollado por Israel Sánchez en abril del 2008 en marco de su proyecto de tesis doctoral. Una vez realizado el relleno del tanque con el medio poroso y la instalación de los diversos instrumentos de medida, se estableció las condiciones necesarias de gradiente hidráulico para definir el régimen de funcionamiento, además de realizar la inyección del trazador y la posterior toma de datos. El procedimiento se detalla a continuación.

3.3.1 Gradiente hidráulico

Los niveles piezométricos al interior del tanque experimental se controlaron a través de tanques de nivel constante móviles ubicados con referencia al suelo. El gradiente hidráulico así definido, fue:

N.A. Tanque de entrada: 117.6 cm
N.A. Tanque de salida: 117.2 cm
Longitud: 120 cm
Gradiente establecido (i): $(117.6 - 117.2) * 100 / 120 = 0.33\%$

Definido el gradiente, se permitió la estabilización del sistema para trabajar bajo condiciones constantes, es decir, régimen de flujo estacionario; para ello se calculo el caudal circulante a través del medio (0.6 ml/min) y se corrobora durante diferentes tiempos que permaneciera sin variaciones. Una vez alcanzada la estabilidad, se realizó las mediciones de niveles piezométricos y la posterior inyección del trazador.

3.3.2 Datos piezométricos

Al igual que en el establecimiento del régimen de flujo, para la toma de datos de niveles piezométricos al interior del tanque, se permitió la estabilización de los datos medidos para evitar la interferencias como conexiones eléctricas defectuosas y/o erróneas, tomando diferentes medidas hasta observar una mínima y/o nula variación entre tomas sucesivas. Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 6.

Tabla 6. Niveles piezométricos al interior del tanque experimental

Sensor No.	Coordenadas (cm)		Nivel Piezométrico (cm)	Sensor No.	Coordenadas (cm)		Nivel Piezométrico (cm)
	X	Z			X	Z	
1	9.0	7.5	1.623	19	46.0	20	1.742
2	18.7	7.5	1.652	20	55.0	20	1.753
3	28.0	7.5	1.701	21	64.0	20	1.776
4	37.0	7.5	1.699	22	73.5	20	1.796
5	46.0	7.5	1.712	23	83.5	20	1.862
6	55.0	7.5	1.731	24	92.0	20	1.889
7	64.0	7.5	1.735	25	103.0	33.5	1.562
8	73.5	7.5	1.754	26	112.0	33.5	1.658

Sensor No.	Coordenadas (cm)		Nivel Piezométrico (cm)	Sensor No.	Coordenadas (cm)		Nivel Piezométrico (cm)
	X	Z			X	Z	
9	83.5	7.5	1.762	27	9.0	33.5	1.694
10	92.0	7.5	1.781	28	18.7	33.5	1.718
11	103.0	7.5	1.809	29	28.0	33.5	1.726
12	112.0	7.5	1.856	30	37.0	33.5	1.731
13	9.0	20	1.573	31	46.0	33.5	1.744
14	18.7	20	1.67	32	55.0	33.5	1.751
15	28.0	20	1.692	33	64.0	33.5	1.783
16	37.0	20	1.709	34	73.5	33.5	1.808
17	9.0	20	1.721	35	83.5	33.5	1.858
18	18.7	20	1.725	36	92.0	33.5	1.84

* El eje de coordenadas se muestra en la Figura 5; el punto 0 se considera a partir del inicio del medio poroso.

Tabla 6 (Continuación). Niveles piezométricos al interior del tanque experimental

3.3.3 Datos concentraciones

Se inyectó 2 ml de una solución densa de 170 gr/l del trazador Brilliant Blue FCF al interior del medio de menor densidad y su subsecuente modelo de mezcla y transporte fue monitoreado a través de fotografías digitales tomadas en intervalos de tiempo de 3 min durante aproximadamente 72 horas.

La inyección del trazador trato de realizarse homogéneamente en los 5 cm de espesor del tanque de forma manual, empleando una jeringa y aguja de 90 mm introducida a través de un orificio de los sensores de presión. Posteriormente se realizó el análisis de las imágenes digitales descrito en el numeral 3.2.2 para obtener los mapas de concentración correspondientes, tal como se muestra en la Figura 16.

Durante el desarrollo del experimento, se observó que durante los tiempos iniciales el penacho se desarrolló principalmente en la componente vertical (Figura 16.a-1) favorecido posiblemente por el efecto gravitatorio debido a la diferencia de densidades entre el medio y el trazador inyectado. Después de aproximadamente 0.5 días, el penacho se desarrolló principalmente en el eje horizontal favorecido probablemente por las trayectorias de flujo predominantes (ver Figura 16.b hasta 16.e). El tiempo total de experimentación analizado fue de 2.64 días.

Teniendo en cuenta el desarrollo del penacho, se estableció 8 tiempos de monitorización para efectos de comparación con los resultados de los modelos numéricos a aplicar. Los tiempos definidos que se indican en la Figura 16, muestran la formación y el transporte del penacho durante el tiempo de desarrollo del experimento.

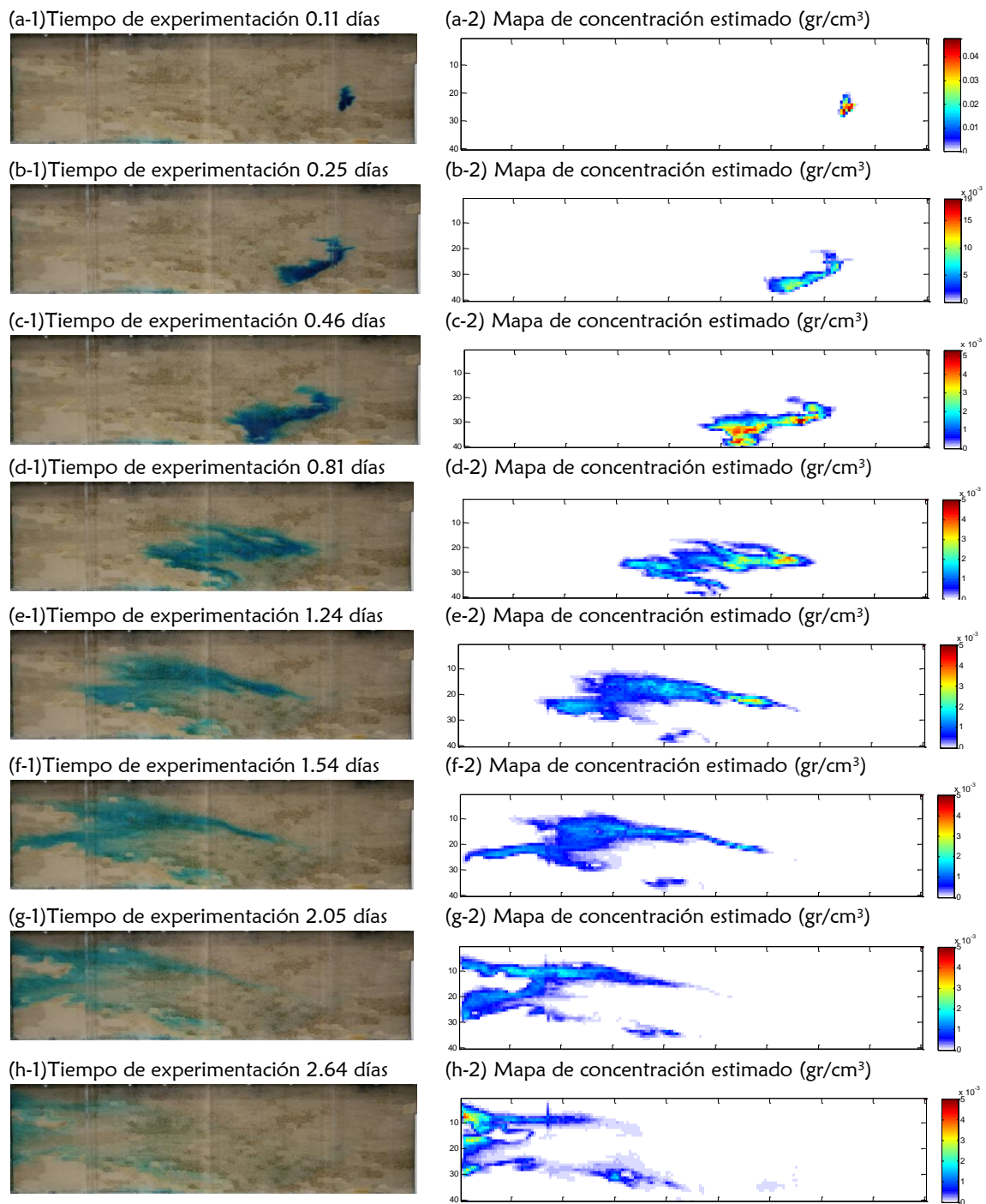


Figura 16. Comparación de imágenes digitales tomadas en diferentes tiempos de experimentación vs. Mapas de concentración correspondientes calculados

4

Modelación matemática de los resultados experimentales

Con base en los datos experimentales se construyó un modelo tridimensional, con el objeto de reproducir el comportamiento del flujo del agua y el transporte del trazador, observados en el tanque. Inicialmente se definió un modelo conceptual en el cual se describen las características principales del experimento (geometría, condiciones iniciales, condiciones de contorno, entre otros) y los parámetros base para la construcción de cada uno de los modelos informáticos para los casos de evaluación establecidos.

Posteriormente bajo el modelo conceptual, la modelación matemática se realizó para dos casos específicos:

- a) El primer caso corresponde a la práctica común de solucionar los problemas del flujo y transporte independientemente, asumiendo que los cambios en el campo de la concentración no tienen ningún efecto en el campo del flujo. Por lo tanto, el esquema numérico empleado no tiene en cuenta las diferencias de densidades entre el soluto y el medio y son consideradas constantes a lo largo de la simulación. Para ello se empleó el código MODFLOW 2000 desarrollado por la Harbaugh y col. (2000) de la USGS para simular el flujo y el código MT3DMS desarrollado por Zheng y Wang (1999), para simular el transporte.
- b) En el segundo caso, se pretende considerar los efectos gravitatorios en los patrones del flujo y transporte del desarrollo del penacho, dado que la densidad del trazador es mayor a la del agua de medio poroso. Para modelar esta condición se debe considerar que la variación de la concentración afecta el campo de flujo, por lo tanto, el esquema numérico empleado fue de flujo densidad variable, el cual se

resuelve acopladamente con el transporte. Varios tipos de códigos que modelan densidad variable han sido divulgados en la literatura. Entre los códigos numéricos más ampliamente utilizados se encuentra el SUTRA y SEAWAT, ambos desarrollados por la USGS. Para este caso, se trabajó con el código SEAWAT 2000, el cual utiliza una forma modificada del código de MODFLOW para solucionar las ecuaciones del flujo del agua subterránea y el código MT3DMS para solucionar las ecuaciones del transporte y para simular los efectos asociados de la densidad.

Los códigos anteriormente mencionados fueron trabajados a través de la interfaz gráfica del programa Visual Modflow 4.2 desarrollado por Waterloo Hydrogeologic Inc (2006) y adicionalmente con el código fuente del SEAWAT 2000. A continuación se desarrollan cada uno de los casos de estudio y se presentan los resultados obtenidos y el análisis respectivo para cada condición.

4.1 Modelo informático

4.1.1 Conceptualización

El experimento a reproducir fue planteado bajo el modelo conceptual mostrado en la Figura 17. Una de las características del experimento es la inyección lateral del trazador a lo largo del espesor del tanque, la cual es representada en el modelo numérico a través de una concentración inicial C_0 . La concentración corresponde a la distribución uniforme de la masa total inyectada (0.34 gr) en un bloque de arena (es decir, en 255 mm de longitud, 20 mm de alto y 5 mm de ancho). Éste se encuentra localizado en el eje horizontal a una distancia de L con respecto al inicio del medio poroso y una profundidad de H con respecto al borde superior.

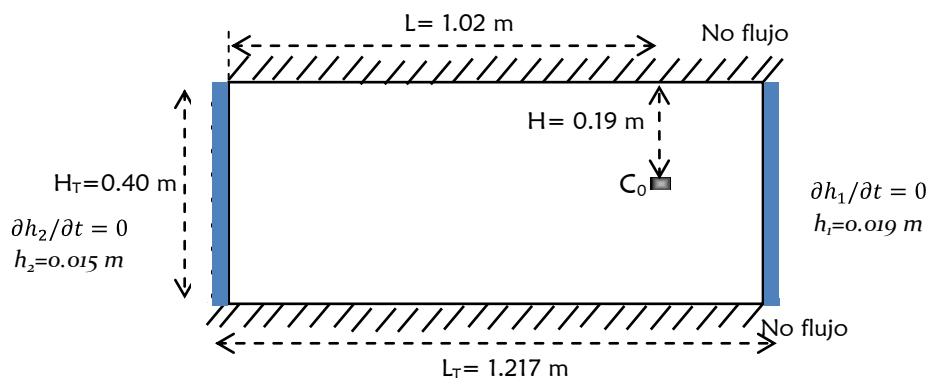


Figura 17. Condiciones iniciales y de contorno considerados en el modelo numérico

La presión en todas partes es hidrostática, con una concentración inicial igual a cero. Como condiciones de contorno para el flujo y transporte se considera bordes impermeables en el borde superior, inferior, la pared frontal y trasera, para esquematizar un acuífero confinado. Las celdas laterales que corresponden a la entrada y

salida del flujo se definieron como celdas de nivel constante (ver Figura 17), obedeciendo a la condición de contorno de Dirichlet, con las cuales se mantuvo un gradiente constante durante el desarrollo del experimento.

Además para resolver el modelo, se han realizado algunas consideraciones adicionales:

- ✓ Medio saturado e isotrópico.
- ✓ Se manejan dos hipótesis de solución del problema: modelos de densidad constante y modelos de densidad variable del fluido.
- ✓ No se consideran los efectos de la variabilidad de la viscosidad y temperatura del fluido.
- ✓ La ley de Darcy es válida (flujo laminar).
- ✓ La expresión estándar para el almacenamiento específico en un acuífero confinado es aplicable.
- ✓ Las aproximaciones del transporte advectivo a manejar pueden ser fickianas o no fickianas.
- ✓ Las aproximaciones del transporte difusivo y dispersivo se consideran fickianas.
- ✓ Se considera una sola fase de un líquido totalmente miscible de muy pequeña compresibilidad.

4.1.2 Discretización espacial y temporal

Basados en la distribución del campo de conductividades mostrado en la Figura 13, el modelo cuenta con una geometría regular con la cual se busco reproducir los límites físicos del tanque de experimentación. Teniendo en cuenta que los bloques de construcción del medio poroso tienen una geometría de 2.55 cm x 2 cm x 5 cm, se considera que cada uno de estos bloques está dividido en 4 columnas, 2 capas y 5 filas, tal como se muestra en la Figura 18.

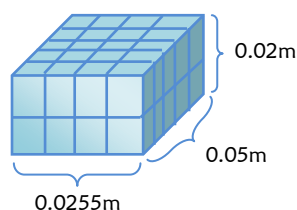


Figura 18. Discretización por bloque de medio poroso

De esta manera el dominio espacialmente fue discretizado uniformemente en 190 columnas, cada una de 6.38×10^{-3} m de longitud, representando la longitud total del medio poroso (1.2 m) por 188 columnas y considerando 2 columnas como las cámaras de entrada y salida. La profundidad total del tanque fue representado por 40 capas y el espesor por 5 filas cada una de espesor de 0.01 m respectivamente (Figura 19).

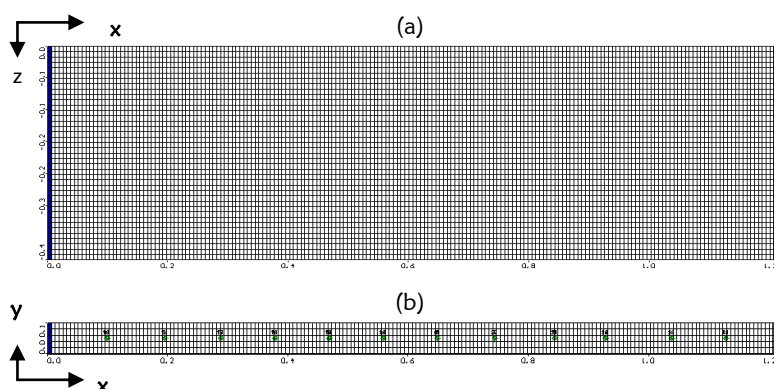


Figura 19. Discretización modelo numérico. (a) Vista longitudinal de 40 capas y 190 columnas (b) vista superior de 5 filas y 190 columnas, indicando además la posición de los piezómetros

Con el objeto de definir adecuadamente el tamaño de la malla, se empleó una medida empírica usada por Voss (1984) (citado por (Simmons, Fenstemaker, & Sharp, 2001)) basada sobre los valores de dispersividad establecidos. La medida considera que el tamaño del elemento debe ser del orden $\Delta_L \leq 4\alpha_L$, donde Δ_L es la distancia entre dos elementos medidos en la dirección paralela al flujo local y α_L es la dispersividad longitudinal; así la discretización espacial empleada en este estudio, satisface fácilmente este criterio.

La discretización temporal corresponde a un periodo de tiempo de 2.7 días en total. Dado que en la conceptualización de la aplicación del trazador se ignora el periodo transitorio que ocurre durante la inyección en los tiempos iniciales del experimento, se simuló en estado estacionario.

4.1.3 Parámetros básicos

Existen dos grupos de parámetros básicos definidos; el primer grupo corresponde a la información general empleada en los modelos a evaluar (Modflow/MT3DMS y SEAWAT), la cual ha sido definida para tratar de reproducir las características del medio y las condiciones de desarrollo del experimento. Estos parámetros se presentan en la Tabla 7.

Tabla 7. Parámetros físicos generales para los modelos planteados

Parámetro	Valor	Unidades
Densidad de referencia (agua dulce) (ρ_0)	1000	kg/m ³
Densidad del trazador (ρ)	1088	kg/m ³
Densidad de saturación trazador (ρ_s)	1106	kg/m ³
Concentración inicial del trazador (C_0)	170	kg/m ³
Concentración saturación trazador (C_s)	200	kg/m ³
Masa total aplicada	3.40×10^{-4}	Kg
Dispersividad longitudinal ($\alpha_L = 90\%$ Long. celda)	5.74×10^{-3}	m
Dispersividad transversal horizontal (α_{TH})	5.74×10^{-4}	m
Dispersividad transversal vertical (α_{TV})	5.74×10^{-5}	m
Coefficiente difusión molecular (D_0)	8.64×10^{-7}	m ² /d

El segundo grupo corresponde a los parámetros definidos a través de una serie de simulaciones preliminares. En ellas se examinó el comportamiento del modelo con los datos iniciales, los tiempos de ejecución de las simulaciones y se comprobó la consistencia de la información básica para los programas en cuestión. Dado que SEAWAT trabaja con un esquema de Modflow modificado y MT3DMS, los parámetros de los solvers definidos para los procesos de flujo y transporte, son consistentes en ambos programas.

Los parámetros definidos tienen en cuenta: a) las características y criterios de convergencia para el flujo y b) las características y criterios para la convergencia para las ecuaciones de transporte. Los ajustes realizados se ven reflejados en el grado de tolerancia de error para cada ecuación gobernante y son presentados en la Tabla 8.

Tabla 8. Parámetros definidos para los componentes del flujo y transporte

Componente	Condición / Valor
Característica de la solución ecuación del flujo	
Técnica de solución de la matriz	PCG
Criterio de convergencia de alturas de agua	1×10^{-8} m
Criterio Residual	1×10^{-8} m
Característica de la solución ecuación del transporte	
Técnica de solución de la matriz	GCG
Criterio de convergencia de la concentración	1×10^{-6}
Longitud de paso de tiempo	Calculado durante la simulación usando el valor del número de Courant
Tamaño máximo de paso de tiempo	0.005 días
Método de cálculo del término advectivo	MOC y TVD
Método de cálculo del término de dispersión, reacción y fuente/sumidero	Método implícito diferencias finitas
Número de Courant	0.75

4.2 Caso 1: modelo de densidad constante

Con los programas Modflow 2000 – MT3DMS se desarrolló una serie de simulaciones para tratar de reproducir el ensayo experimental y evaluar si el esquema convencional de flujo/transporte logra representar el fenómeno de hundimiento del penacho observado en el tanque. En el primer conjunto de simulaciones se examinó el comportamiento del modelo con los datos iniciales, identificando los parámetros a tener en cuenta en la calibración y posteriormente se llevaron a cabo las calibraciones necesarias.

Posteriormente con el modelo calibrado se simuló el flujo a través del método numérico de diferencias finitas y el transporte a través de métodos eulerianos y eulerianos–lagrangianos. Bajo el esquema euleriano, el transporte advectivo fue simulado con el método TVD y el transporte dispersivo fue resuelto a través de diferencias finitas (DF). Para el esquema euleriano–lagrangiano, el transporte advectivo fue resuelto a través del

método de características (MOC) y el transporte dispersivo de igual forma, fue resuelto a través de diferencias finitas (DF).

La diferenciación entre los métodos de solución del transporte advectivo se realizó con el objeto de observar el comportamiento del modelo bajo los dos esquemas propuestos y analizar si existen diferencias significativas entre el uso de cada uno en cuestión. A continuación se presenta la descripción y los resultados obtenidos en cada etapa de desarrollo.

4.2.1 Modelación de datos iniciales

Las simulaciones con la información básica del medio definidas en la Tabla 4, presentan el comportamiento mostrado en la Figura 20.

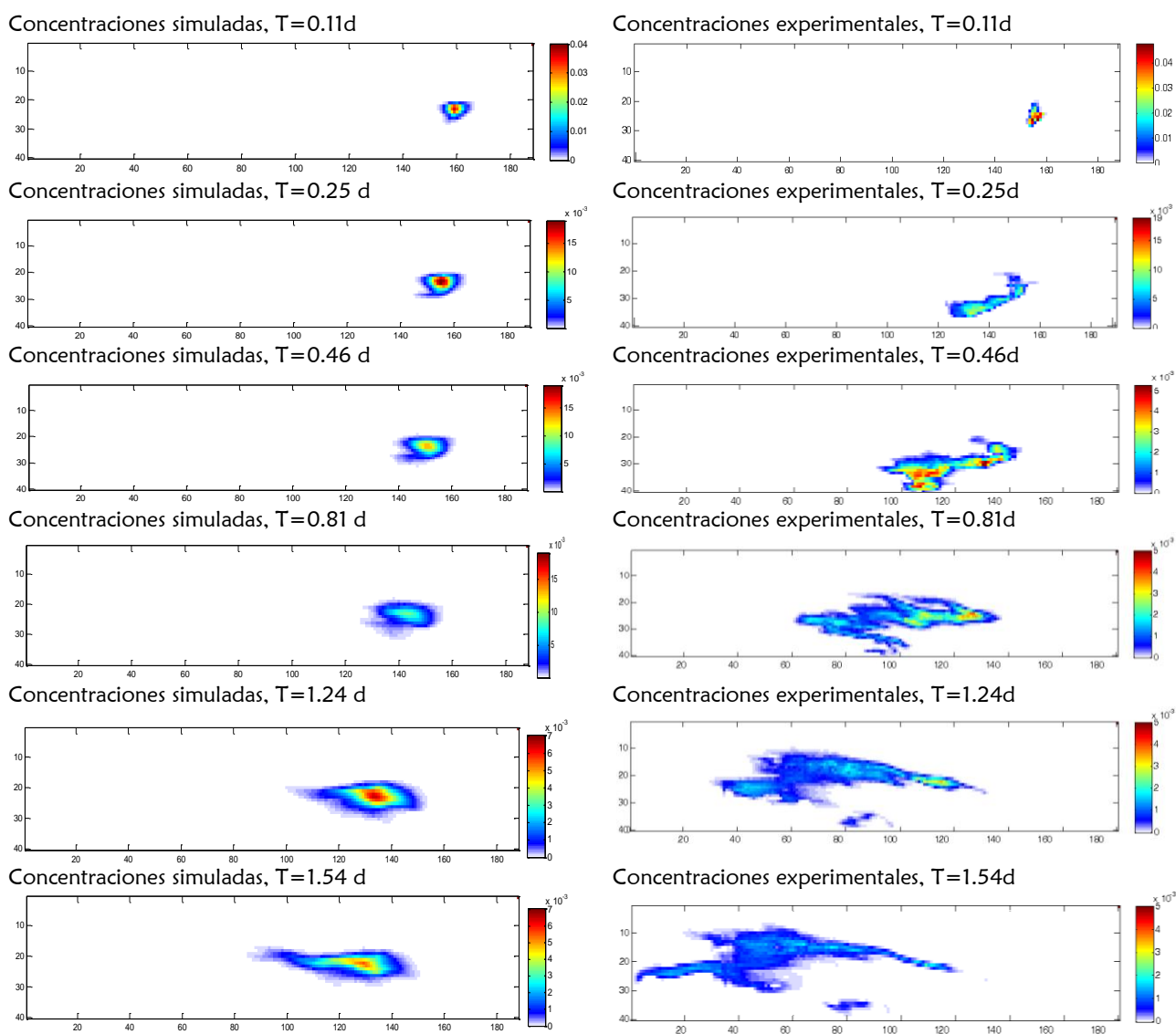


Figura 20. Comparación de mapas de concentraciones experimentales y simulados, obtenidos con la información básica para los tiempos de simulación de 0.11, 0.25, 0.46, 0.81, 1.54 y 2.64 días.

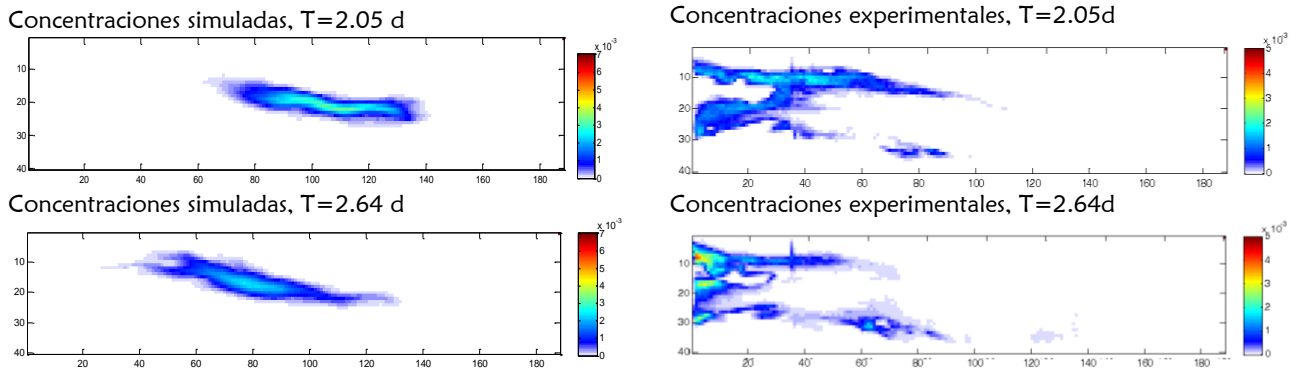


Figura 20 (Continuación). Comparación de mapas de concentraciones experimentales y simulados, obtenidos con la información básica para los tiempos de simulación de 0.11, 0.25, 0.46, 0.81, 1.54 y 2.64 días.

Al comparar los resultados obtenidos con los datos experimentales, se observa inicialmente que el modelo no describe completamente el movimiento vertical que se presenta en los tiempos iniciales. Debido a que no se simula el descenso pronunciado, el penacho resultante solo describe un movimiento similar al observado en la mitad superior del tanque, y cualitativamente la distribución de las concentraciones es más uniforme, presentando menos dispersión en comparación a los mapas experimentales.

En términos cuantitativos para los tiempos evaluados, los mapas indican rangos de concentraciones mayores a las calculadas experimentalmente, debido al movimiento lento del penacho que genera acumulación de masa. Teniendo en cuenta lo anterior, con base en los mapas de concentración experimentales calculados para la fila 5 (cara externa del tanque) y con los datos de porosidad inicial se calculo la masa inyectada, presentada en la Figura 21.

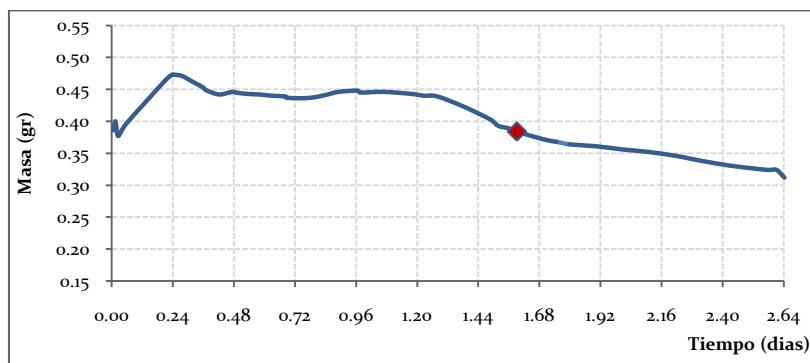


Figura 21. Curva de masa aplicada obtenida con datos básicos de porosidad y mapa de concentraciones experimentales.

La masa así calculada es aproximadamente 0.1 gramos mayor a la inyectada, lo cual indica que es necesario realizar un ajuste en los valores de las porosidades, ya que estas fueron determinadas para cada tipo de arena antes de la construcción del medio poroso.

Debido a la complejidad de la etapa constructiva y dada la heterogeneidad medio planteada, las características físicas tales como porosidad y conductividad para cada tipo de arena empleada, pueden presentar variaciones consecuencia de la posible mezcla entre materiales por diferencia de granulometría, la compactación del medio, entre otros factores. Esta variabilidad influye fuertemente en el flujo y transporte del soluto, lo cual se observó en las simulaciones iniciales.

Por otra parte, el desarrollo del penacho durante el periodo de simulación fue mucho más lento que el observado en el laboratorio. Para modelar la salida del trazador del tanque, se necesito ajustar el tiempo de simulación de 2.64 a 3.5 días. Esto indica que los campos de velocidad obtenidos en la simulación (Figura 22) – varían en el rango de 6.5×10^{-3} a 1.14 m/d – son inferiores a los que se generaron físicamente en el tanque.

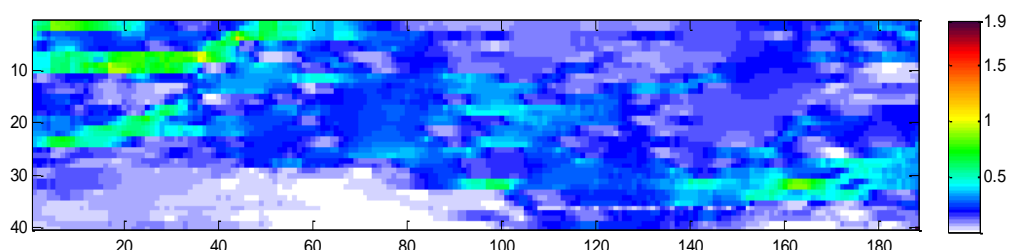


Figura 22. Mapa de velocidades totales obtenidos con la información básica (m/d)

Adicionalmente los gradientes de flujo calculados por el programa muestran una distribución de niveles piezométricos desfasados en comparación a los medidos experimentalmente (ver apartado 3.2.2) (Figura 23). El error cuadrático calculado para estas condiciones fue del 12%.

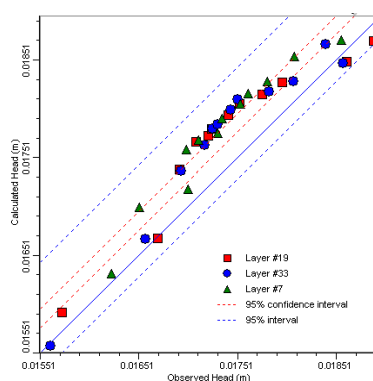


Figura 23. Comparación de las alturas de agua observadas vs calculadas, resultado de simulaciones con la información básica.

Los resultados de la modelación con los datos iniciales señalan la necesidad de ajustar los parámetros físicos del tanque (porosidad y conductividad) para poder establecer condiciones acordes a lo observado en el laboratorio. En consecuencia, la porosidad fue ajustada con los mapas de concentración mencionados en el apartado 3.2.3, y la conductividad fue calibrada empleando los datos de alturas piezométricas medidas experimentalmente (ver Tabla 6).

4.2.2 Calibración de parámetros físicos del tanque

4.2.2.1 Porosidad

El campo de porosidades iniciales cuenta con 5 zonas, acorde a la cantidad de materiales empleados en el relleno del tanque (ver Figura 13). Para realizar el ajuste de los valores de la porosidad, se discretizó el medio en 9 zonas diferenciando las áreas de flujo preferente acorde a los resultados obtenidos en la modelación de condiciones iniciales. Adicionalmente, las porosidades diferenciadas también corresponden a las zonas donde pudo presentarse mayor mezcla de materiales debido a la heterogeneidad espacial, principalmente entre las arenas de mayor granulometría (K_{a1} , K_{a2} y K_{a3}). Las zonas de porosidad planteadas se muestran en la Figura 24.

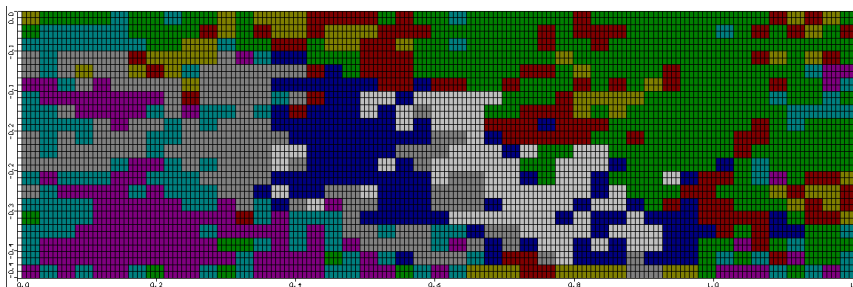


Figura 24. Distribución de parámetros de porosidad a calibrar

Los campos de porosidades se ajustaron manualmente a través del análisis de la distribución de la masa de trazador para un tiempo (t) determinado, basándose en los mapas de concentraciones experimentales. Con base en esta información se estimó los valores de porosidad que mejor se ajustan para calcular la masa inyectada, mediante la relación:

$$M_{total} = \sum_{i=1}^n C_i * \theta * V \quad (66)$$

Siendo

- n: Número total de celdas del mapa
- C_i : Concentración por celda (gr/cm^3)
- θ : Porosidad
- V: Volumen de celda (cm^3)

De la ecuación 66 se conoce: la masa inyectada (0.34 gr), la discretización de la malla para las imágenes, la cual corresponde a celdas uniformes de $6.67 \times 10^{-5} \text{ m}^3$ de volumen y la concentración por celda para 611 mapas. La calibración se realizó mediante un proceso iterativo, a través de un solver cuyo objetivo fue minimizar el error cuadrático entre la diferencia de la masa calculada para cada mapa de concentración vs el valor de la masa inyectada, obteniendo como resultado los valores presentados en la Tabla 9.

Tabla 9. Valores de porosidad ajustados a observaciones experimentales de concentración

Parámetro	Zona	Variación		Parámetro	Zona	Variación	
		Valor	%			Valor	%
Porosidad 1 (01)	Azul	0.175	17	Porosidad 5 (05)	Fucsia	0.081	10
Porosidad 2 (02)	Roja	0.130	24	Porosidad 6 (06)	Gris claro	0.130	24
Porosidad 3 (03)	Verde	0.100	33	Porosidad 7 (07)	Gris oscuro	0.100	33
Porosidad 4 (04)	Azul claro	0.095	14	Porosidad 8 (08)	Amarillo	0.150	75

En la Figura 25 se presenta la curva de masas total calculada con los valores de porosidad calibrados. En ella se observa que la distribución de la masa a partir de 0.2 días hasta 1.5 días, se encuentra en el rango del 95 al 100% de la masa total inyectada. Posterior a este tiempo hasta la finalización del experimento, la masa disminuye hasta aproximadamente 0.24 gr que corresponden al 70% del trazador.

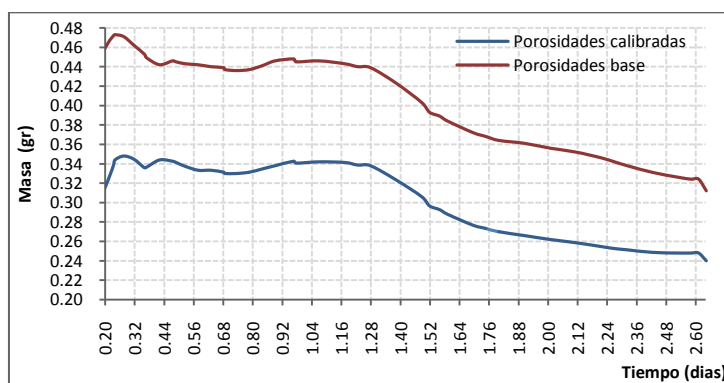


Figura 25. Comparación entre curvas de masa obtenidas con la información general y los valores calibrados para la porosidad

Dado que la distribución de las arenas en el espesor del tanque es uniforme se considera que las concentraciones obtenidas para una fila, son iguales para todo el espesor, es decir, los mapas son representativos del transporte del penacho en las 5 filas discretizadas.

4.2.2.2 Conductividad

Para la calibración del campo de conductividades se empleó el programa PEST-ASP (*parameter estimation code* desarrollado por Dr. John Doherty de Watermark Computing). Al igual que para la porosidad, el campo de conductividades inicial consta de cinco zonas previamente definidas (ver Figura 13).

La distribución inicial fue discretizada en 497 elementos, conformados cada uno por 12 columnas (tres bloques) y dos capas. Así, cada tipo de arena se codificó acorde a la cantidad de elementos propuestos para tratar de mantener la heterogeneidad del medio, tal como se presenta en la Figura 26 (a – e). Una vez codificados los elementos por tipo de arena, la distribución general de la nueva parametrización corresponde a la indicada en la Figura 26 – f.

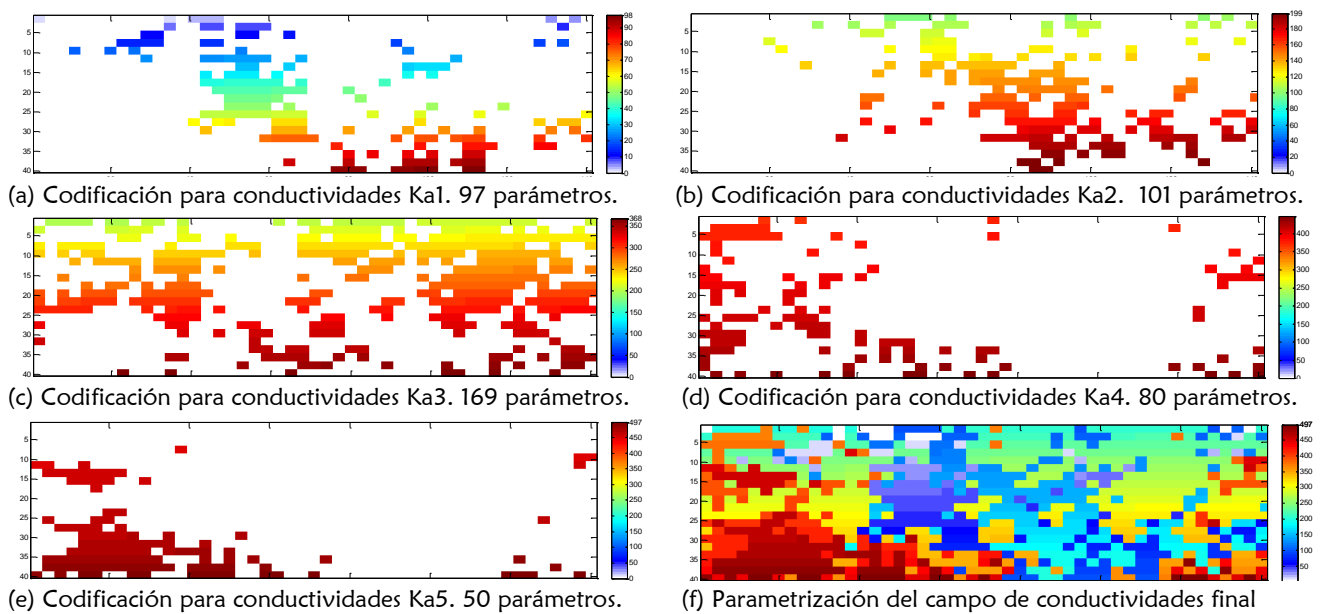


Figura 26. Parametrización de las zonas de conductividad para calibración

Los límites de variación para cada parámetro se definieron teniendo en cuenta que existe mayor probabilidad de mezcla entre las arenas más gruesas entre sí y con materiales finos, por lo tanto, el rango de variación es mayor para las conductividades K_{a1} , K_{a2} y K_{a3} .

Por otra parte, considerando los resultados de la modelación de la información inicial, donde se observó que los tiempos de desarrollo del penacho duplicaban aproximadamente el tiempo experimental y después de realizar diferentes pruebas ampliando los límites de variabilidad de las conductividades, se concluyó que para reproducir el modelo en el tiempo experimental de referencia, los factores de variación deben corresponder a los presentados en la Tabla 10.

Tabla 10. Límites de variación para la conductividad PEST

Conductividad (m/d) No.	Inicial	Factor de variación		Límites (m/d)	
		Inferior	Superior	Inferior	Superior
K_{a1}	75.15	0.62	2.0	46.96	150.30
K_{a2}	42.60	0.49	1.9	20.98	79.87
K_{a3}	11.18	0.75	1.9	8.38	20.97
K_{a4}	2.30	0.93	1.5	2.15	3.45
K_{a5}	0.59	0.97	1.5	0.59	0.89

Bajo las condiciones anteriores se realizó la calibración obteniendo como resultado las conductividades para cada parámetro presentadas en el Anexo I, con una distribución espacial como se observa en la Figura 27.

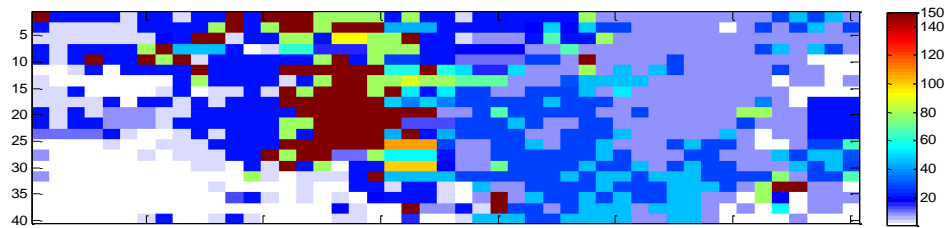


Figura 27. Distribución espacial de las conductividades calibradas (m/d)

Los resultados de las alturas piezométricas calculadas vs. las medidas se detallan en la Tabla 11.

Tabla 11. Resultados de los niveles piezométricos calibrados

Sensor No.	Valor Medido (cm)	Valor Calculado (cm)	Error Residual		Sensor No.	Valor Medido (cm)	Valor calculado (cm)	Error residual	
			Valor	%				Valor	%
1	1.623	1.6188	0.0042	0.26	19	1.742	1.7433	-0.0013	-0.07
2	1.652	1.6674	-0.0154	-0.93	20	1.753	1.7601	-0.0071	-0.40
3	1.701	1.6859	0.0151	0.89	21	1.776	1.7770	-0.0010	-0.06
4	1.699	1.7128	-0.0138	-0.81	22	1.796	1.7971	-0.0011	-0.06
5	1.712	1.7198	-0.0078	-0.46	23	1.862	1.8314	0.0306	1.64
6	1.731	1.7256	0.0054	0.31	24	1.889	1.8647	0.0243	1.29
7	1.735	1.7400	-0.0050	-0.29	25	1.562	1.5577	0.0043	0.28
8	1.754	1.7595	-0.0055	-0.31	26	1.658	1.6488	0.0092	0.56
9	1.762	1.7737	-0.0117	-0.66	27	1.694	1.6991	-0.0051	-0.30
10	1.781	1.7956	-0.0146	-0.82	28	1.718	1.7167	0.0013	0.08
11	1.809	1.8349	-0.0259	-1.43	29	1.726	1.7283	-0.0023	-0.13
12	1.856	1.8606	-0.0046	-0.25	30	1.731	1.7320	-0.0010	-0.06
13	1.573	1.5748	-0.0018	-0.12	31	1.744	1.7497	-0.0057	-0.33
14	1.670	1.6518	0.0182	1.09	32	1.751	1.7650	-0.0140	-0.80
15	1.692	1.7016	-0.0096	-0.57	33	1.783	1.7803	0.0027	0.15
16	1.709	1.7196	-0.0106	-0.62	34	1.808	1.7993	0.0087	0.48
17	1.721	1.7237	-0.0027	-0.16	35	1.858	1.8297	0.0283	1.52
18	1.725	1.7281	-0.0031	-0.18	36	1.840	1.8543	-0.0143	-0.78

El ajuste realizado permite una mayor heterogeneidad del medio y basados en las observaciones experimentales, los cálculos de los niveles piezométricos simulados presentan una alta correlación de datos ($R^2=0.987$). Al graficar los residuos en la Figura 28 se observó una media nula y un coeficiente de correlación despreciable, por lo cual los resultados de la calibración se aceptaron inicialmente para posteriormente ser validados.

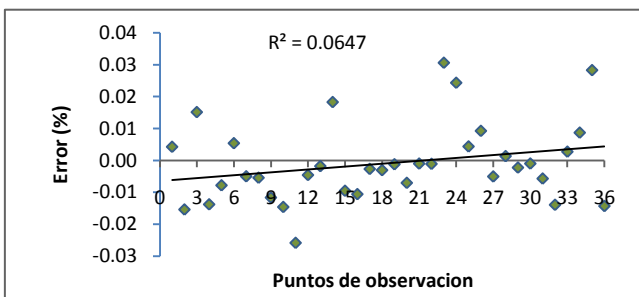


Figura 28. Representación gráfica de residuos

4.2.3 Simulaciones de flujo y transporte

Calibrados los parámetros de porosidad y conductividad, se realizó las simulaciones correspondientes para observar el comportamiento del modelo frente al fenómeno observado en el transporte del penacho. Inicialmente se obtuvo que para una mayor discretización del campo de conductividades, los gradientes de alturas piezométricas tienen una distribución como la indicada en la Figura 29 y las alturas de agua calculadas vs las observadas presentan un error cuadrático de 3.6%.

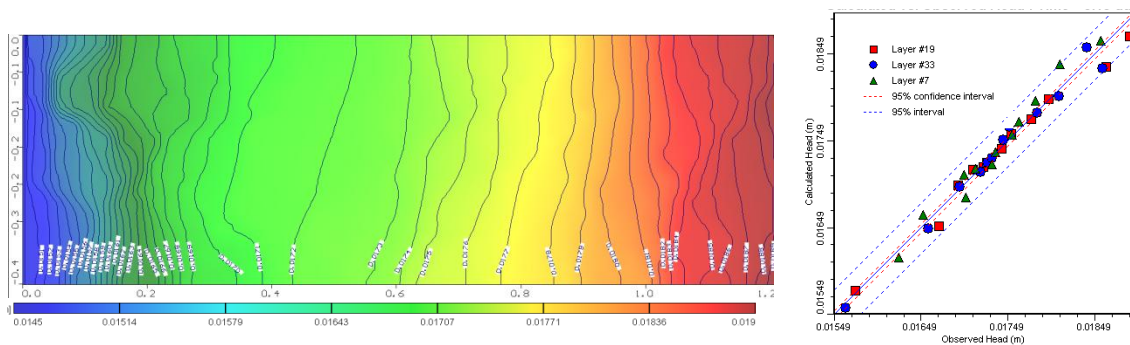


Figura 29. Campo de flujo calibrado y alturas de agua calculadas con medio calibrado

Los campos de velocidades obtenidos muestran zonas de flujo preferente por donde se observa el desarrollo del penacho experimentalmente (ver Figura 30). Acorde a la distribución espacial de las heterogeneidades, el flujo se centra en las zonas de alta conductividad (centro del tanque y área superior final) y tiende a diverger en las zonas de baja conductividad (zona inferior).

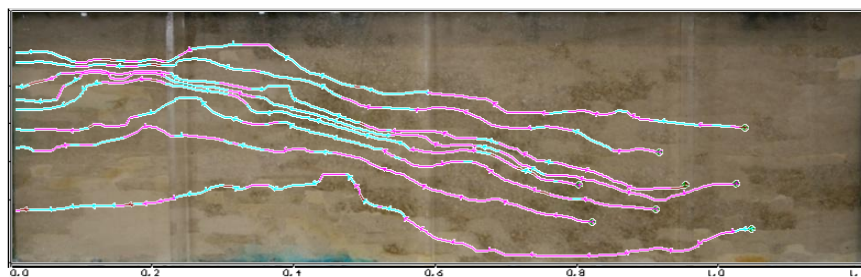


Figura 30. Trayectorias preferentes de las partículas para el medio calibrado

Al comparar la velocidad por cada componente, se observa que prevalece el flujo horizontal (V_x), la cual presenta velocidades máximas en el orden de 1.5 m/d y se presentan en la parte final del tanque (Figura 31-a). En la zona central se crean claramente caminos preferenciales con velocidades entre 0.5 a 1 m/d y en el área donde se realizó la inyección del trazador, las velocidades varían entre 0.3 a 0.5 m/d. En general para la componente vertical (V_z), las velocidades son cercanas a cero a lo largo del tanque, exceptuando la parte central donde se observa claramente las áreas cuya velocidad ascensorial es mayor (en el orden de 0.5 m/d). Las velocidades en eje Y son del orden de 10^{-5} , por lo cual se consideran despreciables.

El mapa de velocidades totales muestra gran similitud con la forma del penacho desarrollada (Figura 31–c). Al comparar los campos de velocidades totales obtenidos para el medio calibrado versus el medio con la información básica (Figura 22) se observa que los caminos preferentes se acentúan con la calibración. La combinación de la componente vertical y horizontal favorece esta condición, obteniendo velocidades del orden de 0.5 m/d hasta 1.9 m/d, en las zonas de discusión.

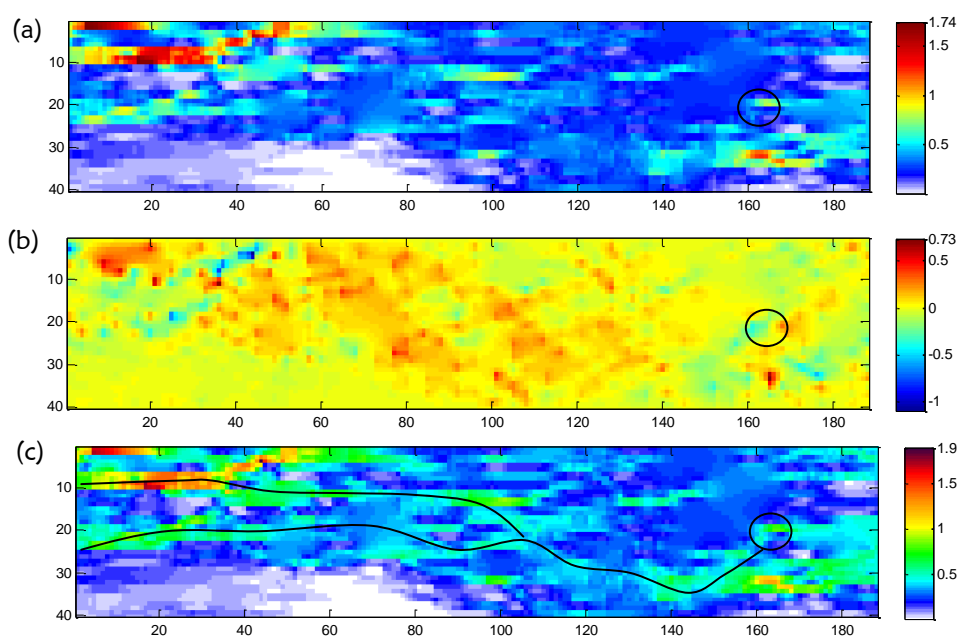
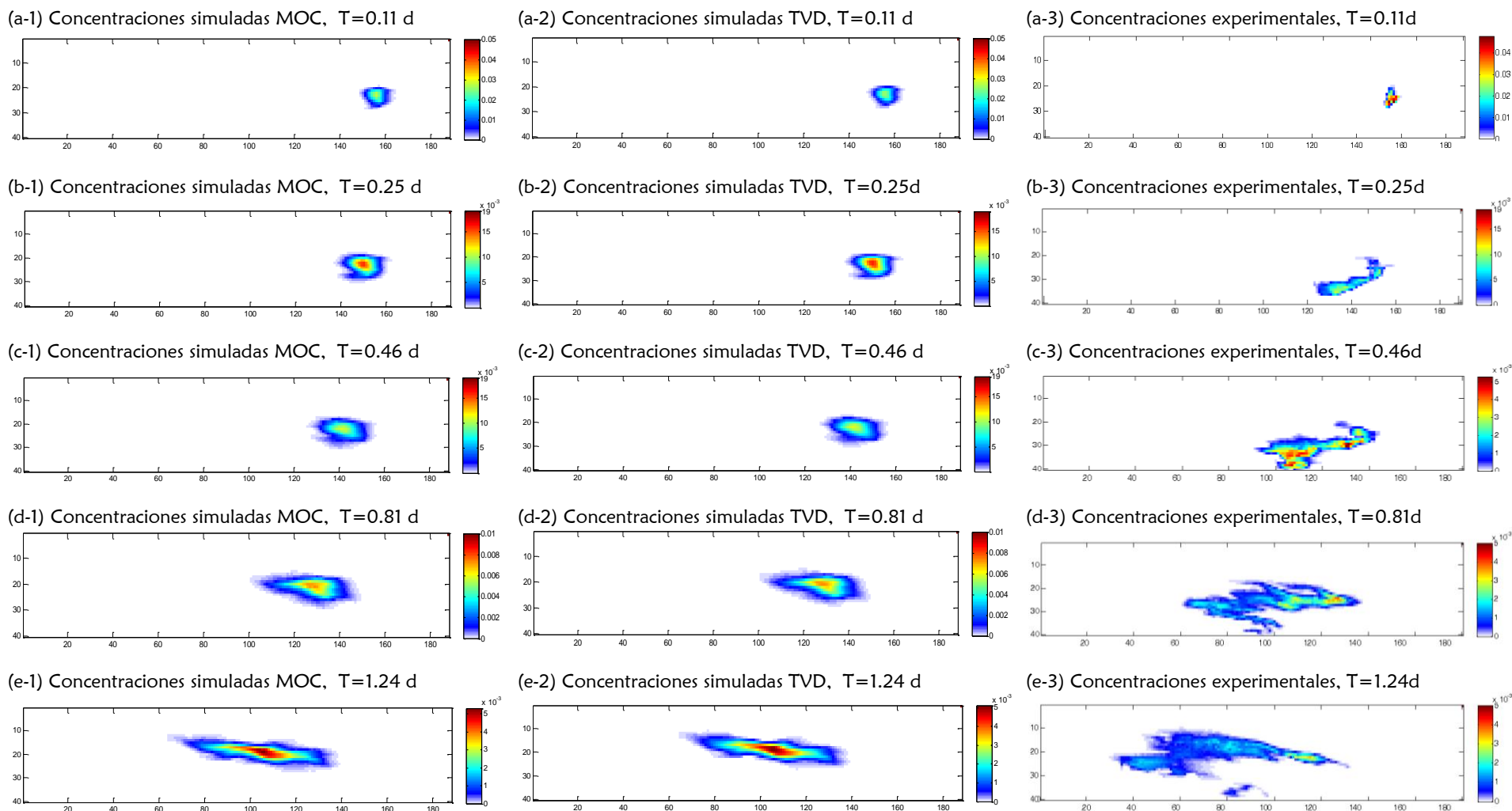


Figura 31. Campo de velocidades resultantes (a) Velocidades eje X, (b) Velocidades eje Z, (c) Velocidades totales (unidad: m/d)

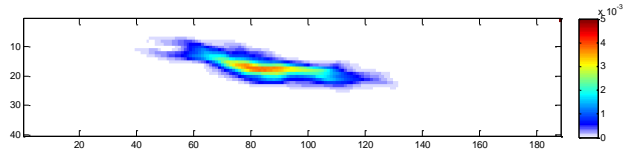
Contrario a lo que indican los campos de velocidades obtenidos, la simulación del transporte no logra reproducir el hundimiento del trazador. Por lo tanto, el penacho se desarrolla de forma similar a lo simulado con la información inicial. Como se muestra en la Figura 32 (a, b y c), el campo de velocidades generado no es suficiente para provocar el movimiento vertical del trazador en los tiempos iniciales y el modelo numérico empleado no es sensible a las altas variaciones de concentración para generar dicho movimiento. En consecuencia se considera que el desarrollo vertical es acentuado por las diferencias de densidades entre el trazador y el agua del medio.

La calibración realizada favorece el desarrollo más rápido del penacho y por ende, permite que el trazador se mueva a lo largo del tanque experimental en el tiempo establecido. En 0.11 días el modelo simula un descenso de aproximadamente 9 cm (el penacho llega hasta la capa 28) y en 0.81 días cae un centímetro más (Figura 32 a y d); cuando experimentalmente en este periodo de tiempo el penacho llega hasta el fondo del tanque. La profundidad simulada se alcanza debido al campo de velocidades en la zona del punto de inyección. Dado que el penacho no cae lo suficiente en los tiempos iniciales, a medida que se mueve y dispersa en el medio, la componente advectiva del flujo es mayor y favorece la forma del penacho observada.

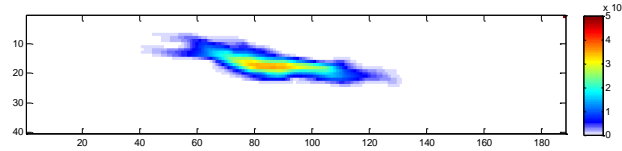
Figura 32. Comparación de los mapas de concentraciones experimentales y simulados para modelo calibrado, bajo esquemas de transporte advectivo simulado por MOC y TVD para los tiempos definidos.



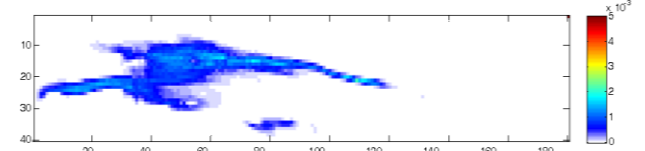
(f-1) Concentraciones simuladas MOC, T=1.54 d



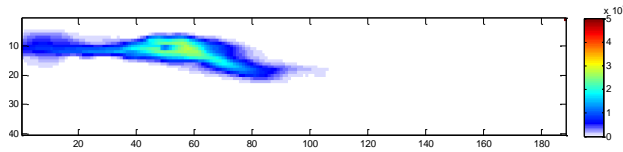
(f-2) Concentraciones simuladas TVD, T=1.54 d



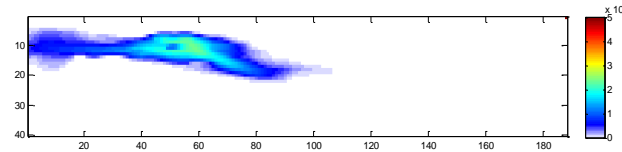
(f-3) Concentraciones experimentales, T=1.54d



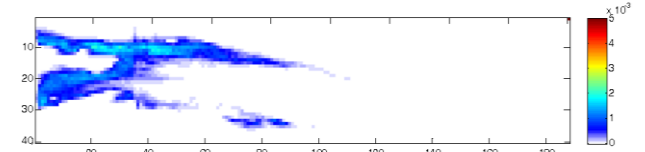
(g-1) Concentraciones simuladas MOC, T=2.05 d



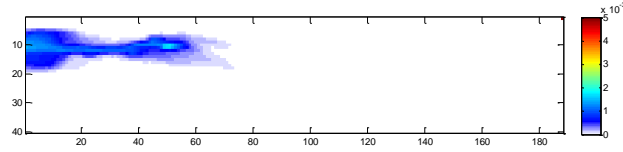
(g-2) Concentraciones simuladas TVD, T=2.05 d



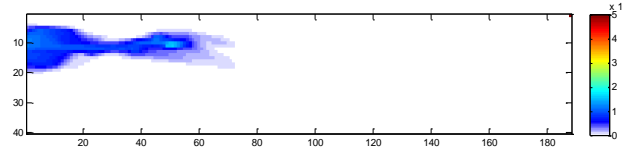
(g-3) Concentraciones experimentales, T=2.05d



(h-1) Concentraciones simuladas MOC, T=2.64 d



(h-2) Concentraciones simuladas TVD, T=2.64 d



(h-3) Concentraciones experimentales, T=2.64d

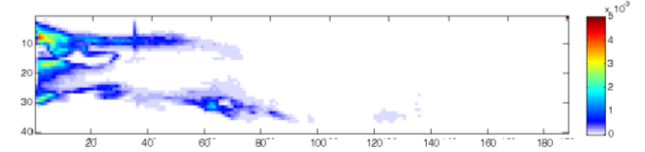


Figura 24. (Continuación) – Comparación de los mapas de concentraciones experimentales y simulados para modelo calibrado, bajo esquemas de transporte advectivo simulado por MOC y TVD para los tiempos definidos.

Los resultados indican que el modelo a pesar de trabajar con información calibrada, no logra reproducir el descenso del trazador. El movimiento vertical no solo se debe a las fuerzas advectivas del sistema y la dispersión del área, sino al flujo convectivo mixto consecuencia de las diferencias de densidad entre el trazador y el agua del medio. La ecuación de flujo clásica empleada por Modflow no describe este tipo de proceso, por ello emplear este tipo de modelos en casos donde se presume que pueden existir diferencias de densidades, conlleva a obtener resultados que discrepan con la realidad e ignorar los posibles efectos gravitatorios que se puedan presentar.

Otra característica del modelo, es la forma del penacho. Para tiempos desde la inyección hasta aproximadamente 0.46 días, el trazador se mueve en zonas de bajas conductividades donde la dispersión es favorecida. De esta manera, el penacho adopta una forma semiredondeada, manteniendo en el centro la mayor concentración de soluto. Como no se simula el descenso total del penacho, las dimensiones de la zona de mezcla del trazador y el medio son mucho menores a lo observado experimentalmente, al igual que el área de extensión de éste.

A medida que avanza hacia zonas más conductivas, se va cerrando como consecuencia de la predominancia del movimiento advectivo (Figura 32 e hasta h). Una vez alcanza las zonas de caminos preferenciales se desarrolla de manera similar al experimento pero a diferencia, la distribución de las concentraciones continua siendo uniforme.

En los mapas experimentales (Figura 32 columna 3) el penacho tiene una forma muy delineada y delimitada por la distribución de heterogeneidades del medio. El modelo numérico aunque reproduce aproximadamente el movimiento del penacho, la forma que adopta es mucho más dispersa a la observada, abarcando un área de mayor afectación (ver Figura 32 g y h).

Por otra parte, al modelar el transporte advectivo por los métodos TVD y MOC se observó que en los tiempos finales (Figura 32 g-1 y g-2) el penacho simulado con MOC tiene una dispersión menor a la observada para el TVD. Esto genera una distribución de concentraciones en el penacho más compacta para la simulación con MOC en comparación a la obtenida con el TVD. En términos cualitativos, el penacho se desarrolla y se mueve de la misma forma para ambos esquemas.

4.2.4 Balance de masa y curvas de evolución local de la concentración

Para observar el movimiento de la masa a través del medio durante el periodo de experimentación, se estableció 7 puntos de referencia que se describen en la Tabla 12. Los puntos se ubicaron sobre las zonas donde se observó el desarrollo del penacho, tal como se indica en la Figura 33.

Para medir la precisión del modelo se comprobó la conservación de la masa obtenida mediante la comparación de los flujos netos de entrada y salida. Esta verificación se

realizo durante el proceso de calibración para obtener la solución más aproximada a la cantidad de trazador inyectada experimentalmente.

Tabla 12. Ubicación de puntos de observación de concentraciones

Punto de observación	Ubicación	
	Capa	Columna
1	34	139
2	15	95
3	27	82
4	9	60
5	22	53
6	9	2
7	24	2

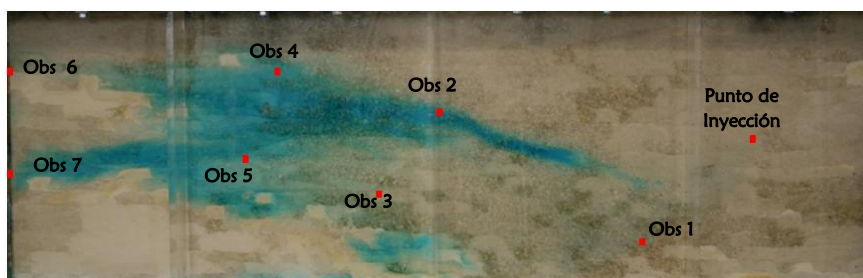


Figura 33. Ubicación de puntos de observación para las concentraciones simuladas. Imagen correspondiente a 1.51 días de experimentación.

Teniendo en cuenta que la ecuación del transporte es complicada de resolver numéricamente, el error en el balance de masas del soluto puede ser mayor al del fluido, pero depende también de la naturaleza del método numérico empleado. Es así como los métodos de diferencias y/o elementos finitos conservan la masa, mientras que métodos como el de las características o el seguimiento de partículas no la conservan, ya que sus cálculos de balance son simples aproximaciones (Konikow, 2002).

Esta condición se corroboró al simular el modelo bajo los métodos de TVD y MOC. Los resultados para el balance de masas provenientes del modelo en el que se empleó MOC, muestra errores en el rango de -9.22 a 2.13%, con una media de 0.177%. Mientras que los errores del modelo corrido con TVD, varían en el rango de -8.72×10^{-5} a $2.67 \times 10^{-4}\%$, con una media de $1.14 \times 10^{-4}\%$.

Claramente el método TVD es mucho más conservativo que el MOC, pero a pesar de las diferencias, el orden de magnitud de los errores son bajos y la exactitud de ambos métodos en el cálculo de la masa aplicada, es bastante aceptable en ambas condiciones, tal como se observa en la Figura 34-a.

El movimiento del trazador simulado a través del medio puede describirse por las Figuras 34 b, c y d. En términos espaciales el avance del penacho simulado se ajusta con gran similitud a lo observado experimentalmente, ya que existe coincidencia en los tiempos de inicio y finalización de las curvas.

Cuantitativamente, dado que el modelo no reproduce el descenso del trazador, la distribución de masa que se observo experimentalmente no se da. El modelo simula el penacho con la totalidad de la masa aplicada. Por lo anterior, la distribución de concentraciones simuladas es aproximadamente un orden de magnitud mayor a las experimentadas.

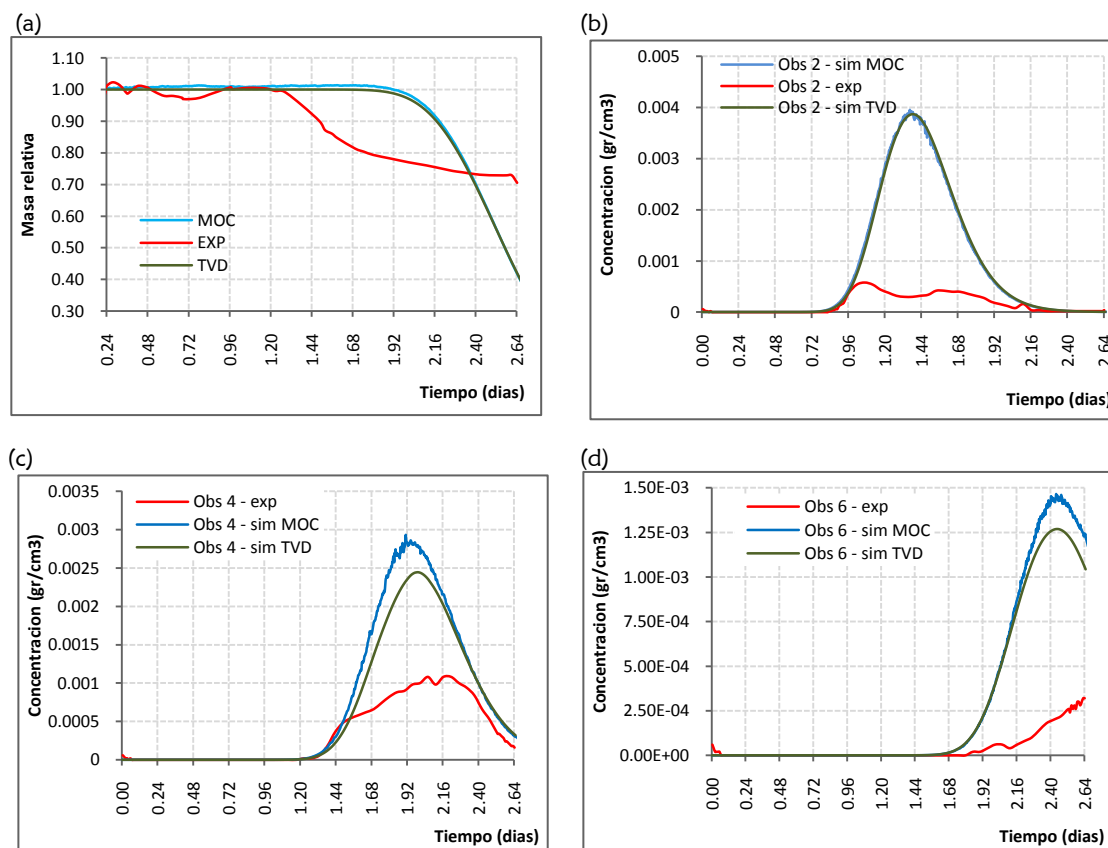


Figura 34. (a) Curva de masa relativa para condiciones experimentales y simuladas. (b, c, d) Comparación entre curvas de llegada para modelos simulados con MOC, TVD y obtenidas con datos experimentales para los puntos de observación 2, 4 y 6. (Sim: simulación, exp: experimental).

Adicionalmente, las curvas simuladas indican que a medida que el penacho se desarrolla, las diferencias de cálculo de masa entre los métodos TVD y MOC, se ven reflejadas en una distribución menor de concentración para el método TVD (Figura 34 c y d). Así la diferencia entre la máximas concentraciones calculada para cada métodos es de 5×10^{-4} gr/cm³.

Por otra parte, la curva de masa relativa para la condición experimental (Figura 34-a) indica que durante aproximadamente 1.5 días, más del 90% de la masa se conserva en el interior del tanque. Posterior a este tiempo se da el inicio de la salida del trazador reflejado en el descenso de la curva hasta el 70% de la masa inicial, es decir, en 2.64 días solo el 30% de la masa inyectada sale.

El movimiento de la masa total simulada tanto por el método MOC como TVD, es más lento en comparación a la curva de masa experimental. El movimiento descrito por el modelo corresponde al flujo que se da en la parte superior del tanque con la totalidad de la masa; mientras la curva experimental considera el movimiento del total de la masa en toda la profundidad del mismo.

Dado que existen dos caminos preferentes de flujo que permite la bifurcación del penacho experimentalmente, como se observa en la Figura 33; la salida del trazador se inicia a 1.55 días aproximadamente por la parte inferior del tanque y en la parte superior, el movimiento es un poco más lento, en consecuencia la salida del trazador se da a partir de 1.8 días (ver Figura 35). La curva con datos experimentales de masa relativa señala la salida de la masa considerando ambos caminos preferentes, de ahí la diferencia con las curvas simuladas.

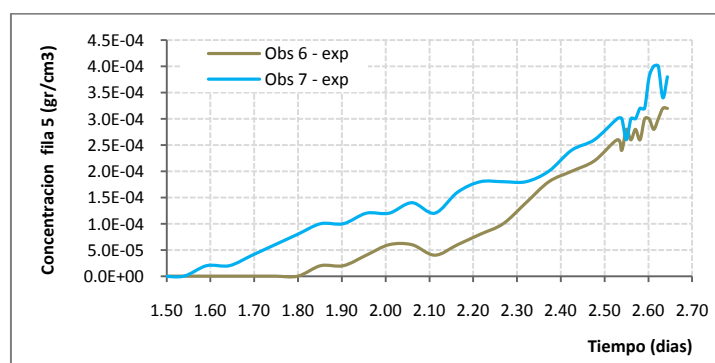


Figura 35. Concentraciones observadas experimentalmente en los puntos de observación 6 y 7. (Exp: experimental).

4.3 Caso 2: modelo de densidad variable

Con el programa SEAWAT 2000 se desarrolló una serie de simulaciones para tratar de reproducir los efectos gravitatorios observados en el desarrollo del penacho, considerando las diferencias de densidades entre el trazador y el agua del medio. El trabajo desarrollado consistió inicialmente en definir los parámetros correspondientes a la densidad involucrados en la componente VDF.

Posteriormente se simuló el experimento bajo las condiciones de calibración realizada para el modelo Modflow/MT3DMS y se realizaron los ajustes necesarios para reproducir con la mejor aproximación posible lo observado experimentalmente. Al igual que en el caso 1, el proceso de transporte advectivo se resolvió con los métodos TVD y MOC. A continuación se presenta la descripción y los resultados obtenidos en cada etapa de desarrollo.

4.3.1 Definición de parámetros característicos del modelo (componente VDF)

Dado que el código SEAWAT, resuelve de forma acoplada las ecuaciones gobernantes del flujo y transporte a través de la componente VDF (como se explica en el apartado 2.4), la definición de las características de esta componente son fundamentales en el desarrollo del modelo para tratar de reproducir los efectos de la variación de la densidad. Las características a tener en cuenta son:

- ✓ La definición de las densidades mínimas y máximas permitidas en el cálculo de las ecuaciones gobernantes.
- ✓ La ecuación de estado de la densidad correspondiente al tipo de soluto empleado.
- ✓ Esquema de acoplamiento entre los procesos de transporte (IMT) y la densidad (VDF).

4.3.1.1 Densidades mínimas y máximas

Los límites de la densidad deben ser establecidos como medidas correctivas frente a los posibles problemas numéricos de oscilación artificial que pueden presentarse en el desarrollo de las simulaciones del modelo, debido al modelo numérico utilizado para su solución. Dichas oscilaciones pueden generar en el proceso IMT valores erróneos en las concentraciones calculadas, por ejemplo, valores negativos o no realistas. Si una concentración negativa es usada en la ecuación de estado de la densidad para un paso de tiempo determinado, la densidad calculada puede resultar inferior a la densidad de referencia (Langevin, Christian D; Shoemaker, W. Barclay; Guo, Weixing, 2003).

En nuestro caso se definió como densidad mínima, la correspondiente a la densidad de referencia ($\rho_0=1000 \text{ kg/m}^3$) y se estableció como límite de densidad máxima, la correspondiente a la densidad del trazador ($\rho_0=1088 \text{ kg/m}^3$).

4.3.1.2 Ecuación de estado de la densidad característica del trazador empleado

La densidad del fluido es asumida como una función solamente de la concentración, debido a que los efectos por variaciones de presión y temperatura no son considerados, tal como se explica en el apartado 2.4. En estos casos autores como Zheng y Bennett (2002) y Langevin y Guo (2002) entre otros, proponen el uso de la ecuación 29, descrita en el apartado 2.2.1.3:

$$\rho = \rho_0 + FC$$

Donde el valor de F es definido como 0.7143 (en el caso del código SEAWAT) y su rango de aplicabilidad varía para fluidos con densidades similares del agua dulce hasta una composición típica al agua del mar, es decir, densidades aproximadas entre 998 a 1025 kg/m^3 .

En aquellos casos donde la densidad del soluto es mayor a este rango, la literatura recomienda el uso de la ecuación 30 (referenciada con el nombre de Hydrocoin en adelante), que expresa la relación densidad/concentración en términos de la densidad y concentración de saturación para el soluto empleado:

$$\rho^{-1} = (1 - C_m)\rho_f^{-1} + C_m\rho_s^{-1}$$

De acuerdo a la información básica la densidad del trazador Brilliant Blue (E-133) empleado en la experimentación, corresponde a 1088 kg/m³ la cual está por fuera del rango de aplicación de la ecuación 29. En consecuencia, el factor F definido por defecto en el programa, no es aplicable a la condición del experimento y la ecuación de estado factible debido a su carácter general sería la ecuación de Hydrocoin, pero esto supone una modificación al código fuente del programa.

Por otra parte, conforme a las recomendaciones de diversos autores como (Herbert y col., 1988), (Guo & Langevin, 2002), (Simmons y col., 2001) entre otros, se realizó un ensayo experimental para determinar la función que describe la relación de la variación de la densidad con respecto a la concentración para el Brilliant Blue.

Para ello se prepararon 8 diluciones de la solución original (C_o=170 kg/m³), para concentraciones en el rango de 20 hasta 160 kg/m³, y posteriormente se determinó su densidad empleando un densímetro. Con los resultados obtenidos se construyó la curva mostrada en la Figura 36.

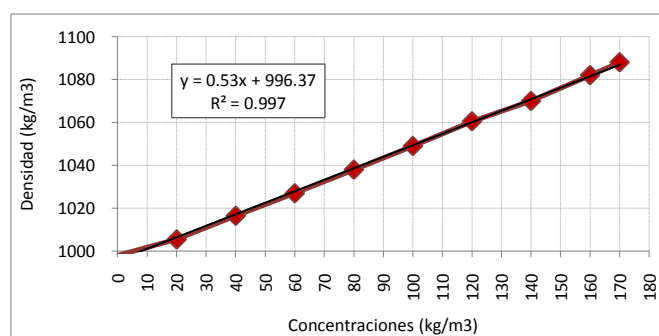


Figura 36. Variaciones relativas de densidad como función de la concentración del trazador Brilliant Blue, obtenidas experimentalmente.

Los resultados indican que la relación en particular puede ser descrita de forma lineal con una pendiente equivalente a 0.53, que representa los efectos combinados de la variación de la masa del soluto y la variación del volumen en la solución. Al comparar la curva obtenida experimentalmente, la curva teórica de Hydrocoin (ec 30) y la ecuación 29 (ver Figura 37) se observa que la variación de la densidad respecto a la concentración para el trazador, es menor que la variación esperada para aguas con composición parecida al agua del mar.

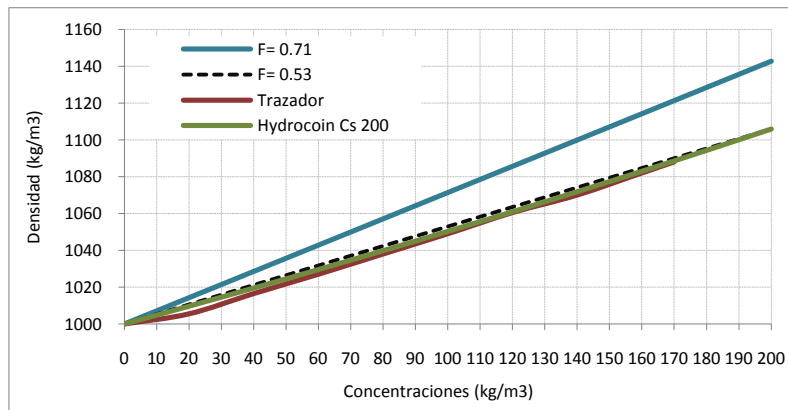


Figura 37. Comparación de las variaciones relativas de densidad como función de la concentración del trazador Brilliant Blue, obtenidas teórica y experimentalmente

En particular, la ecuación de Hydrocoin para una C_s de 200 kg/m^3 tiene un comportamiento similar a la función determinada experimentalmente para el trazador. Por lo cual, puede considerarse válido el empleo de dicha ecuación para condiciones donde se desconoce la densidad del soluto a evaluar.

Para efectos de la equivalencia con la ecuación 29, la constante F puede adoptar el valor de 0.53 en el caso de simular las variaciones acorde al ensayo experimental o para considerar los cambios de acuerdo a condiciones de saturación, por la similitud de las curvas planteadas anteriormente. El valor de F definido, representa el mejor ajuste a las curvas mencionadas, y es planteado para utilizar el código SEAWAT 2000 sin tener que hacer variaciones en el código fuente.

Por otra parte, la variación de la densidad del trazador como se indicó anteriormente es distinta al comportamiento esperado para soluciones con composición típica del agua del mar. Esto puede ser debido posiblemente al grado de complejidad de su molécula y a la interacción con el agua a causa de los distintos componentes de la solución (colorante, aminas, arsénico, plomo y metales pesados). Por tanto, se puede generar un acoplamiento con el agua un poco más lento, lo cual se refleja en la variación de la densidad con respecto a la concentración.

Considerando la importancia de la relación densidad/concentración, se realizó una serie de simulaciones con la información básica y parámetros definidos, variando los valores de F en 0.2, 0.53 y 0.71, para observar el comportamiento del modelo. Los resultados de las simulaciones (Figura 38) muestran como el desarrollo del penacho depende sensiblemente de la relación definida entre la densidad y concentración. Así, la simulación de los efectos gravitatorios se ve delineada por esta constante.

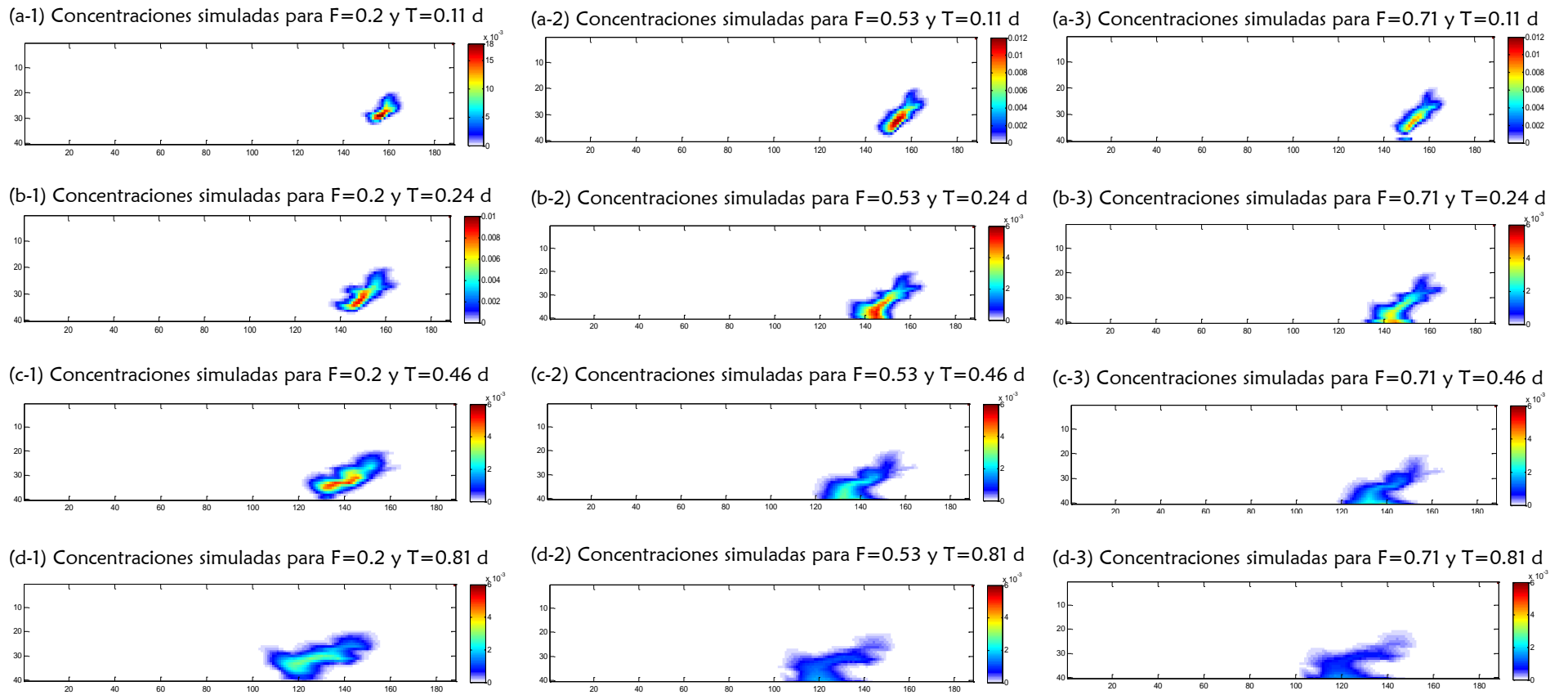


Figura 38. Mapas de concentraciones para el medio con conductividades y porosidades base, para 0.11, 0.3, 0.46, 0.81, 1.54 y 2.64 días de experimentación, obtenidos con el programa SEAWAT 2000, para diferentes valores de F (0.2, 0.53 y 0.7).

En la Figura 38 se observa que durante los tiempos iniciales para todos los valores de F evaluados (a y b columnas 1, 2 y 3), el penacho se desarrolla preferencialmente en la componente vertical, dado que la densidad del trazador es significativamente mayor (1088 kg/m^3) a la del agua del medio (1000 kg/m^3). En consecuencia los gradientes de densidad son altos debido a que durante este intervalo de tiempo las variaciones de las concentraciones son mayores dada la cercanía con el punto de inyección.

Después de 0.24 días se observa que la distribución de concentraciones en el medio poroso es mayor, reflejada en la amplitud del penacho y dependiendo del valor del factor F , los efectos de densidad pueden ser disminuidos para valores cercanos a cero o incrementados para valores cercanos a la unidad (como en el caso de $F=0.53$ y 0.71).

En casos particulares como el expuesto, donde la densidad del trazador es diferente a lo normalmente empleado en la literatura (agua del mar o trazadores con densidades inferiores a 1025 kg/m^3), la determinación de la función que describe la relación entre densidad y concentración, es particular para cada caso y se recomienda la obtención de la misma de forma experimental.

Las simulaciones llevadas a cabo con diferentes valores de F sirven para ilustrar a manera de ejercicio, que el emplear un valor estándar para F o un valor no realista, puede influenciar sensiblemente el desarrollo del penacho en el medio evaluado y de esta manera generar resultados no acordes a la realidad.

Aunque la definición del factor F no ha sido un tema de particular interés en los estudios de flujo de densidad variable, debido al empleo de solutos con características al agua del mar y en particular, la mayor parte de estudios se han referido a intrusión marina o la interacción entre el agua del mar/agua dulce; la definición del mismo resulta importante al momento de reproducir trabajos experimentales como el expuesto.

4.3.1.3 Esquema de acoplamiento de procesos transporte y densidad

El código SEAWAT 2000 posee cuatro modos de ejecución, como se ha explicado en el apartado 2.4. El modelo planteado para el experimento considera el acoplamiento del transporte del soluto (proceso IMT) y el flujo de densidad variable (proceso VDF), el cual es representado por el modo E. Esta condición indica que la densidad del fluido usada en el proceso VDF, es calculada a partir de la ecuación de estado definida en el apartado 4.2.2 y las concentraciones de soluto simuladas. Bajo este esquema, los procesos VDF no son compatibles con los procesos de calibración realizados por programas como el PEST (Langevin y col., 2003).

El acoplamiento de los procesos VDF e IMT se realizó de forma explícita, dado que las opciones de solución para la componente advectiva en el transporte pueden ser tanto eulerianos (diferencias finitas y TVD) como lagrangianas (MOC, MMOC Y HMOC). A diferencia en el acoplamiento implícito solo es aplicable el método de diferencias finitas.

El acoplamiento explícito indica que la ecuación de flujo es formulada usando las densidades del fluido de un paso de tiempo previo al evaluado. Esta aproximación es conceptual y resulta adecuada para la mayor parte de simulaciones con flujos de densidad variable (Langevin y col., 2003).

Tabla 13. Resumen de parámetros definidos para la componente VDF

Componente	Condición / Valor
Densidad de referencia (ρ_f)	1000 kg/m ³
Densidad mínima (ρ_{min})	1000 kg/m ³
Densidad máxima (ρ_{max})	1088 kg/m ³
Pendiente relación densidad/concentración (F)	0.53
Acoplamiento procesos VDF e IMT	Explícito
Paso de tiempo inicial	0.001 días

4.3.2 Modelación con datos de calibración inicial

Como se describió en el numeral 4.2 para el caso de densidad constante, los parámetros de conductividad y porosidad fueron calibrados con la información experimental de alturas piezométricas y medidas de concentración. Dado que se pretende comparar los resultados obtenidos bajo la consideración de flujo de densidad variable, la simulación inicial con el programa SEAWAT corresponde a las condiciones calibradas para el Caso 1. El modelo fue corrido para la condición de transporte advectivo solucionado con el método de las partículas (MOC). Los mapas de distribución de concentraciones resultantes son comparados con los mapas experimentales en la Figura 39.

La simulación mostró que el modelo es capaz de capturar el patrón de transporte de forma aproximada. Para los tiempos iniciales del periodo de simulación (Figura 39 a y b), la forma del penacho es similar a lo observado en el laboratorio aunque se aprecia un rápido desarrollo del mismo en el periodo en cuestión. Debido a que la masa inyectada es distribuida en un bloque de arena – condición definida para las concentraciones iniciales–, la forma inicial del penacho ocupa una mayor área a la observada experimentalmente.

El efecto causado por la diferencia de densidades genera en los tiempos iniciales frentes agudos de concentración y altos gradientes de variación de densidad, lo cual permite simular el descenso del penacho. Para las condiciones establecidas, la simulación numérica sobre-estima el efecto debido a la variación de la densidad, creando un descenso mayor al observado en el laboratorio.

Dado que la diferencia de densidades entre el trazador y el agua del medio es considerable, el modelo realza la mezcla vertical y el penacho comienza a hundirse promoviendo diversos patrones de flujo que tienden a separarse con las heterogeneidades de la zona. Por tanto la masa se “parte” y se acumula en zonas de baja permeabilidad, mientras fluye libremente por zonas más conductivas (Figura 39 c1 y c2).

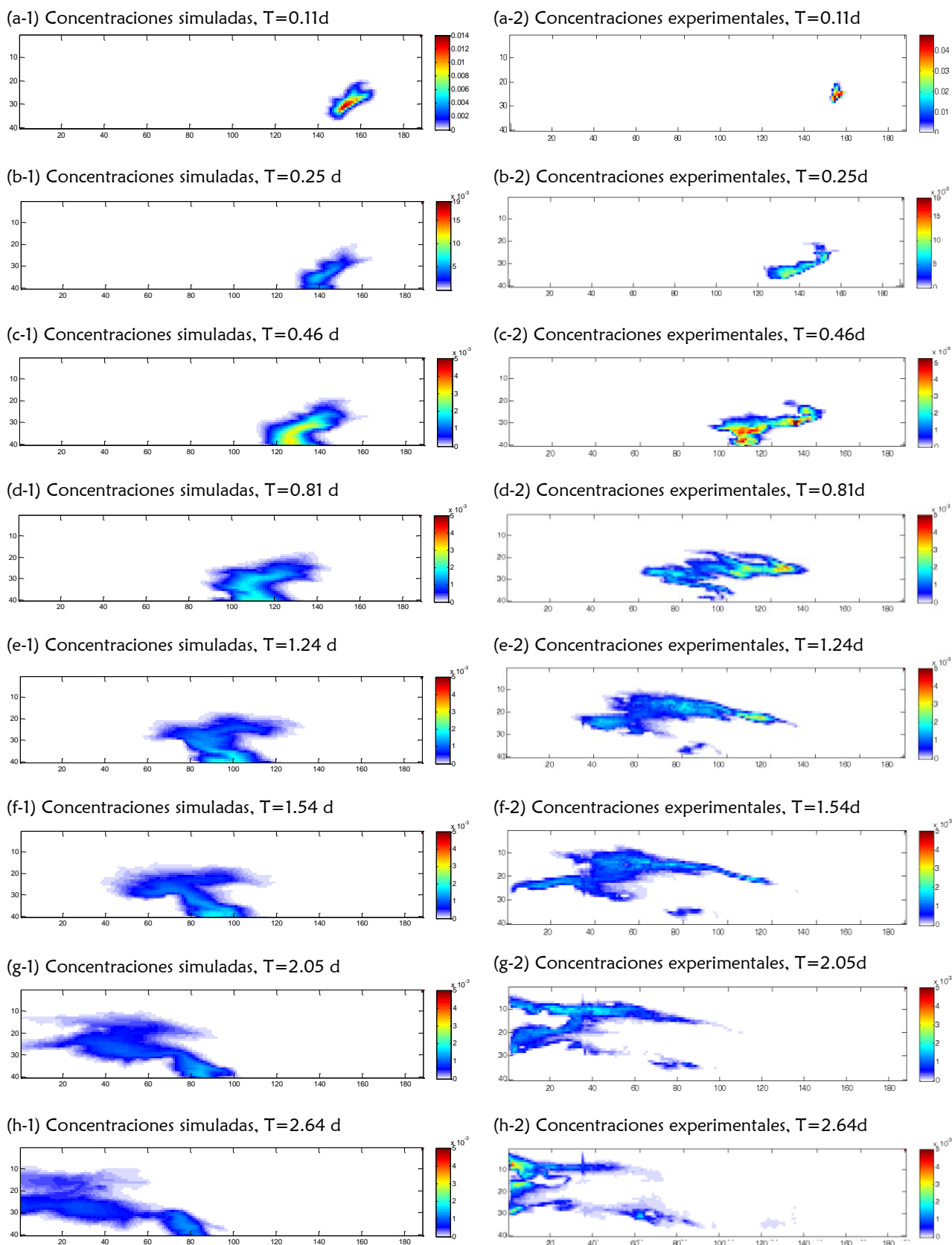


Figura 39. Comparación de mapas de concentraciones simuladas con el programa SEAWAT vs experimentales, para el medio con conductividades y porosidades calibradas en el Caso 1.

Debido a que en la ecuación de flujo modificada el cálculo de la velocidad se ve afectada por la variación de las densidades, se esperaba encontrar diferencias al respecto. Por el contrario, se observó que las velocidades calculadas por el programa, tienen los mismos límites de variación y la misma distribución espacial mostrada en la Figura 31, para el caso del modelo Modflow/MT3DMS.

El campo de velocidades calculado para el medio indica que las velocidades oscilan entre 0.25 a 0.6 m/d principalmente. El área por donde se mueve el penacho se encuentra en una zona con velocidades totales cercanas a 0.5 m/d, como se aprecia en la Figura 40. Con estas velocidades el flujo dirigido por la densidad provoca que el penacho se desarrolle rápidamente. En consecuencia el trazador cae rápidamente al fondo del tanque donde se concentra la mayor parte de la masa inyectada (Figura 39 a y b).

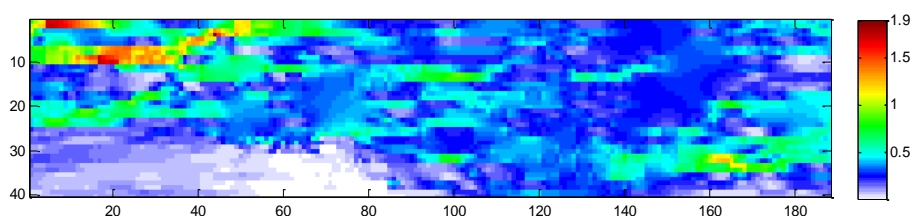


Figura 40. Campo de velocidades totales simuladas con el programa SEAWAT

En los tiempos posteriores al hundimiento (Figura 39 c-1 hasta h-1), la forma del penacho es condicionada a la distribución de las concentraciones en el fondo del dominio. Dado que en la parte inferior del tanque se encuentra el campo de conductividades más bajas, las velocidades en esta zona son inferiores a 0.1 m/d y los patrones de flujo son más débiles. De esta forma, el trazador que queda en la zona tiene un movimiento lento presentando discrepancias con el ensayo experimental.

Por la distribución de concentraciones resultantes, la fracción de trazador que no se acumula en el fondo, es la que se dispersa rápidamente debido al movimiento advectivo que predomina en la parte central y final del tanque. El penacho formado describe de manera general la trayectoria preferentes de los partículas (ver Figura 30) guardando cierta similitud con las observaciones experimentales.

La variación de la conductividad hidráulica juega un rol importante en el control del transporte en sistemas de densidad variable (Schincariol & Schwartz, 1990). En zonas de alta conductividad la tendencia del penacho es hundirse y mezclarse convectivamente. Por ello se observa la acumulación de la masa en la parte inicial del tanque, ya que en los tiempos iniciales el penacho se mueve por zonas de altas conductividades.

Debido a la conceptualización de la aplicación del trazador, el efecto de la formación de un penacho más compacto es atenuado. Dado a que se produce una mayor dispersión de la masa, la acumulación de ésta en el fondo del tanque es mayor, como lo refleja la

curva de avance del trazador en el punto de observación 1 (Figura 41a) en comparación al ensayo.

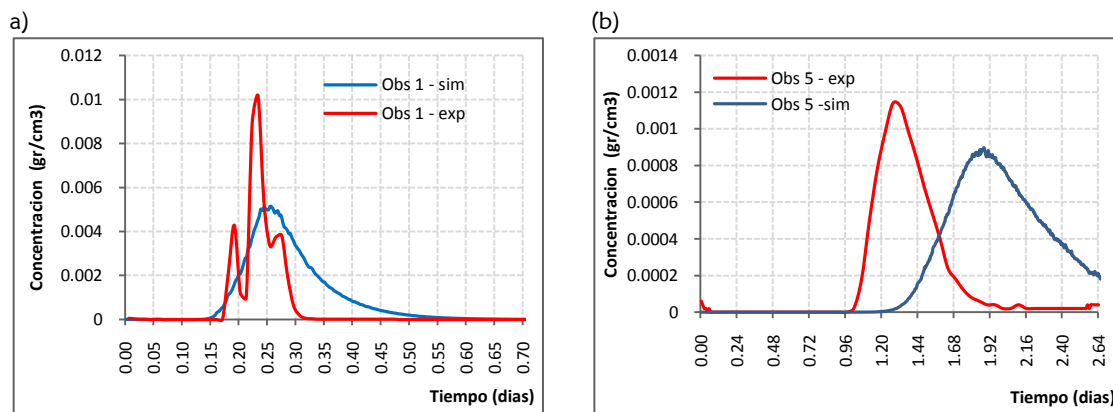


Figura 41. Comparación de curvas de llegada simuladas y experimentales, para los puntos de observación 1 (a) y 5 (b)

La curva experimental indica que la cantidad de concentración que pasa por el punto de observación 1 es mayor a la simulada. Su forma es cerrada debido a que el movimiento por la zona es rápido (reflejado en la pendiente de la curva) y la dispersión es menor. La curva resultante de la modelación presenta una pendiente mucho menor, por lo tanto el movimiento del penacho es lento y dado que la cola de la curva es bastante amplia indica una alta dispersión.

Un comportamiento similar se observa en la curva de concentración para el punto de observación 5 (Figura 41b). Por lo anterior se considera que el campo de velocidades simulado es menor al generado físicamente, provocando que el trazador se mueva hacia abajo de forma acentuada y que exista una dispersión considerable en la mayor parte del medio debido al movimiento lento del penacho (Figura 39 e – h).

La parametrización realizada para la conductividad (K), permitió generar una mayor heterogeneidad del medio. Dada la cantidad de puntos de observación, el programa de calibración empleado (PEST) permite una variación mayor en las zonas de K cercanas a los puntos de referencia, manteniendo con menor o sin variación aquellas zonas que no afectan las medidas piezométricas calculadas.

Para lograr una alta heterogeneidad como la que se supone existe en el tanque por la mezcla entre las arenas, es necesario bajo el esquema determinístico tener muchos puntos de observación. De esta manera podría ajustarse con mayor exactitud a la realidad física. Dado que no es el caso, con la información disponible no se alcanza a describir dicha heterogeneidad. La distribución obtenida presenta cierta homogeneidad entre la heterogeneidad planteada inicialmente. Por lo tanto, difícilmente el modelo puede describir en detalle el penacho observado.

4.3.3 Modelación con ajustes a la calibración inicial

Acorde a lo comentado anteriormente, se realizó una serie de simulaciones con diferentes ajustes de los campos de conductividad para tratar de reproducir los efectos gravitatorios con mayor exactitud. Las variaciones se hicieron teniendo en cuenta que la forma del penacho, el tiempo de caída y la distribución de los mapas de concentración, están gobernados por las velocidades de flujo del medio, la tasa de inyección del soluto, los coeficientes de dispersión y la diferencia de densidad entre el soluto y el agua del medio, tal como lo comenta Ostrom y col., (1992).

El proceso consistió en variar manualmente las zonas de conductividad con mayor inferencia en el desarrollo del penacho, favoreciendo las zonas de mayor velocidad. De esta manera se permitió incrementar o disminuir el valor calibrado previamente en zonas específicas, para generar una caída menor del penacho en el área cercana al punto de inyección. Adicionalmente se buscó incrementar los campos de velocidades en la zona central del tanque, para reproducir el tiempo de desarrollo del penacho. El ajuste se realizó por el método de ensayo y error.

Acerca de las inestabilidades gravitatorias

En el ensayo del laboratorio se observó la formación de inestabilidades gravitatorias (fingeris) en los tiempos cercanos a la inyección del trazador (Figura 42). Estas inestabilidades en penachos densos pueden ser generadas por perturbaciones pequeñas al azar, por las perturbaciones ocasionadas por las heterogeneidades en el medio poroso y las diferencias locales entre la densidad del soluto y el agua del ambiente. (Liu HH, Dane JH, 1997). Por su naturaleza, la reproducción de este tipo de inestabilidades a través de un modelo numérico es bastante complejo.



Figura 42. Inestabilidades gravitatorias observadas en el ensayo experimental posterior a la inyección del trazador para 55 min, 58 min, 1.82 h y 2.92 h respectivamente.

En los diferentes ensayos realizados se observó que al modificar en particular el campo de conductividades de las áreas cercanas al punto de inyección, el modelo que emplea el método MOC para resolver la componente advectiva del transporte, genera una serie de inestabilidades que determinan la forma del penacho para cada caso. Se decidió realizar un análisis en particular, para entender como las variaciones de conductividades localizadas en esta zona, afectan al penacho simulado. Como ejemplo, se presenta la variación de las conductividades en la zona señalada en la Figura 36, para tres pruebas específicas donde los valores de conductividad calibrados en el Caso 1, se afectaron por los factores indicados en la Figura 43a:

- a) Prueba 1. Consistió en amplificar las conductividades en la zona del fondo del tanque para promover un desplazamiento más horizontal y disminuir así el efecto de la densidad.
- b) Prueba 2. Se amplificó la conductividad de las zonas aledañas al camino preferente del penacho.
- c) Prueba 3. Se amplificó todas las conductividades señaladas en la figura correspondiente, para promover un movimiento más rápido sobre el medio.

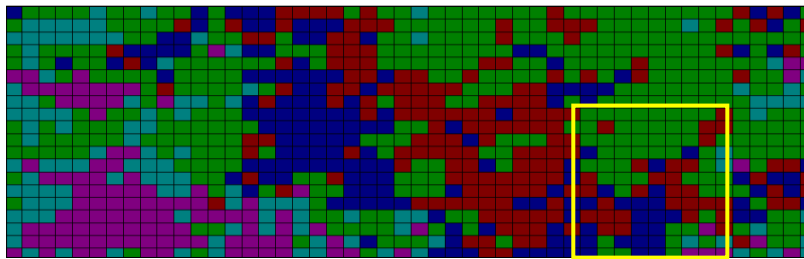


Figura 43. Área de modificación de conductividades hidráulicas

En la Figura 44 se presentan los resultados obtenidos para los cada caso en particular, evaluados a 0.05, 0.11, 0.16 y 0.25 días.

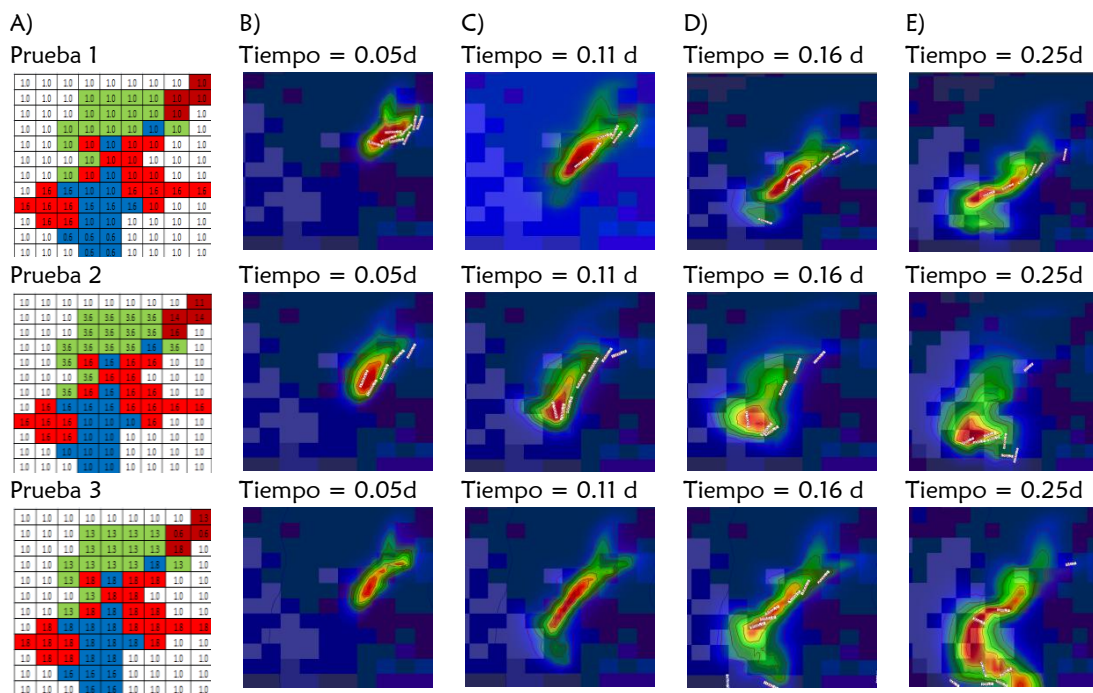


Figura 44. Comparación del desarrollo del penacho en la fila 5, para los tiempos cercanos a la inyección del trazador, en diferentes medios de conductividad modificados.

Los resultados en general muestran como las diferentes distribuciones de conductividades derivan en la formación de inestabilidades gravitatorias en los tiempos cercanos a la inyección del trazador mientras los efectos de la densidad son bastantes notorios. Las

inestabilidades creadas por el modelo numérico no corresponden a lo observado físicamente y según autores como Liu y Dane (1996) son consecuencia de pequeñas perturbaciones, como errores de truncamiento.

En las pruebas realizadas (Figura 44) se observa que el desarrollo del penacho está condicionado a los campos de conductividades altas y el patrón de flujo adoptado es determinado por el campo de conductividades del medio. La heterogeneidad planteada para cada caso, ocasiona el movimiento preferente hacia los puntos donde la variación de conductividad mayor. En consecuencia se observa la formación de lóbulos en el borde externo del penacho en los casos donde el trazador se mueve de zonas de baja a alta conductividad (prueba 1) (Figura 44 columna C). En los casos contrarios, donde el penacho se mueve a través de zonas de alta a baja conductividad (prueba 2), la tendencia de la masa es dispersarse y acumularse en estas zonas (Figura 44 columna E).

También se observó, que para los tiempos iniciales el penacho generado es inestable debido a los altos gradientes de densidad. En consecuencia la distribución de las concentraciones es diferente entre las filas discretizadas, generando una dispersión transversal que afecta el desarrollo del penacho, como lo plantean Fan y Kahawita (1994).

Dependiendo de qué tan inestable sea el inicio del este, se puede observar la presencia de zonas con concentraciones de trazador que no corresponden al movimiento del penacho en la fila analizada, como es el caso de lo observado en la prueba 1 (Figura 44 columna D). Si la distribución de las densidades varía entre una fila y otra debido al movimiento transversal de las concentraciones, físicamente la combinación de la libre convección y la forzada (efecto gravitatorio) dan lugar a patrones de movimiento mucho más complicados.

Esta desigualdad provoca la transferencia de masa de un punto a otro, creando variaciones espaciales y temporales en la distribución de la concentración del trazador, dando lugar a flujos y mezclas inestables (Liu y Dane, 1997). Esto fue observado en las diferentes simulaciones con el modelo numérico (bajo condiciones de información inicial, medio calibrado y variaciones de los campos de conductividad), empleando el método MOC, manteniéndose esta condición hasta que el efecto de la densidad fue atenuado por el movimiento advectivo del medio. Por el contrario, con el método TVD no se observó este comportamiento. Bajo este esquema las simulaciones mostraron un desarrollo de penacho igual para todas las filas discretizadas.

Acerca de las heterogeneidad del medio

Shincariol y Schwartz (1990) a partir de ensayos experimentales determinaron que la heterogeneidad del medio puede controlar el patrón de propagación de la masa, ejerciendo control sobre el flujo de densidad variable. Bajo condiciones de convección forzada por las altas concentraciones de trazador, la masa tiende a separarse entre las

zonas de alta y baja conductividad. En zonas de baja conductividad se favorece el efecto de la dispersión, mientras las altas favorecen el comportamiento advectivo.

Este comportamiento fue observado en el ensayo del laboratorio y en las diferentes variaciones de los campos de conductividad probadas (un ejemplo se presenta en la Figura 44 – prueba 3, columna E).

El movimiento horizontal del agua en el medio dirigido por fuerzas advectivas, ejerce una influencia estabilizadora en el penacho por la restricción del movimiento vertical, tal como lo referencia Liu y Dane (1996). Esto se evidenció experimentalmente desde los tiempos posteriores a 0.46 días e inclusive (ver Figura 39 c – h). En el ensayo, los efectos gravitatorios fueron atenuados desde tiempos tempranos. A los 0.25 días ya se observaba como el penacho se estabilizaba consecuencia del movimiento advectivo en las zonas de alta conductividad. En los tiempos posteriores a 0.81 días, los efectos de la densidad prácticamente desaparecieron y la forma del penacho se atribuye a los trayectorias del flujo advectivo dominante.

Simular esta condición con el modelo numérico resultó ser bastante complicado, debido a las características del medio, dado el equilibrio existente entre la distribución del campo de conductividades, el campo de velocidades y las porosidades de cada zona. El generar campos de conductividad altos, favorece el movimiento horizontal pero a su vez, en los tiempos iniciales, se incrementa el efecto de la mezcla convectiva en el modelo numérico. Los resultados indican que la heterogeneidad planteada para el campo de conductividades es insuficiente para reproducir detalladamente el fenómeno de transporte ocurrido.

Dado que se parte de una aproximación determinística basada en asumir que se conoce la tendencia de la variabilidad espacial del campo de conductividades (Carrera, 1993), los patrones de las tendencias de dicha variabilidad son limitados a la capacidad de la definición de la cantidad de parámetros con los cuales puede trabajar el programa PEST. De esta manera el campo de heterogeneidades generado resultó ser muy grueso. El penacho en los tiempos iniciales presenta una alta inestabilidad resultado de los gradientes de densidad generados, por tanto la heterogeneidad del medio juega un rol importante en el momento de definir el patrón de flujo.

El movimiento vertical del penacho decrece fuertemente a medida que este avanza y se aleja del punto de inyección, consecuencia de la disminución de contrastes de densidad y la dilución advectiva la cual puede reducir fuertemente los efectos de la densidad (Koch & Zhang, 1992). Bajo esta consideración, el permitir un flujo advectivo mayor en la zona de inyección del trazador podría mejorar sensiblemente el desarrollo del penacho y así, evitar el descenso tan pronunciado que es simulado.

Tratando de generar la condición anterior, en la Figura 45 se presenta el campo de conductividades modificado.

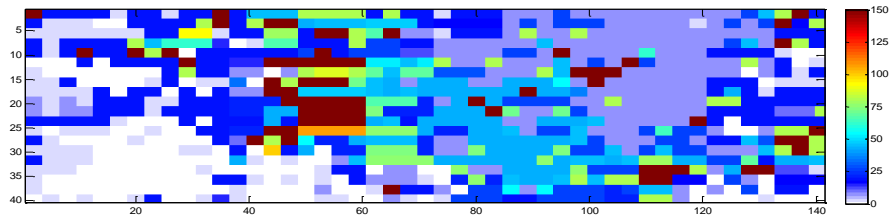


Figura 45. Campo de conductividades ajustadas

El campo de conductividades modificado (Figuras 45) presenta una mayor heterogeneidad del medio, en comparación al campo calibrado (Figura 27). Aunque los cambios no se ven reflejados en la cantidad de parámetros sino en el rango de variabilidad, las modificaciones favorecen las trayectorias preferentes observadas experimentalmente. De esta manera, el campo de velocidad fue incrementado en la parte inicial y central del medio, generando velocidades medias entre 0.5 a 1 m/d, como se indica en la Figura 46.

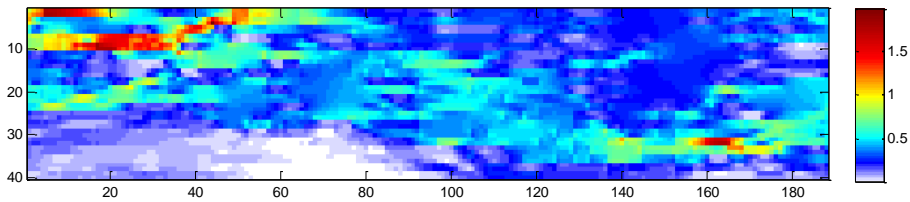


Figura 46. Campo de velocidades totales del medio ajustado

De acuerdo al nuevo campo de conductividades, se realizó la simulación del transporte tanto para el método MOC como TVD. Los mapas de concentraciones obtenidos en cada caso se presentan en la Figura 47.

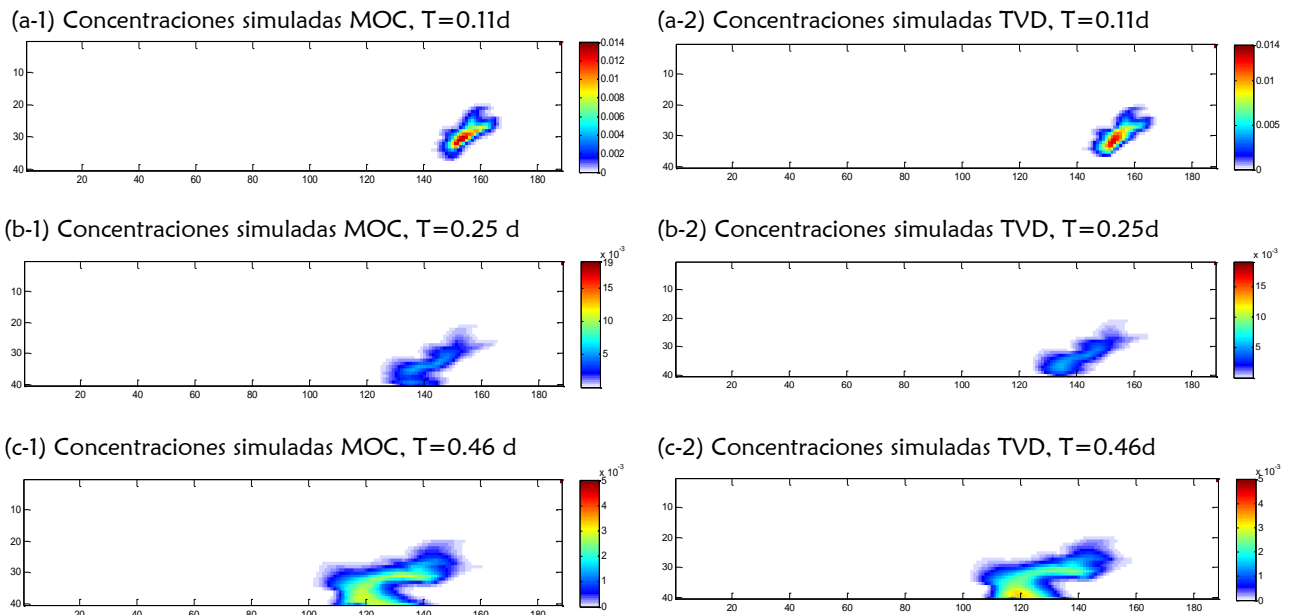


Figura 47. Comparación de mapas de concentraciones simuladas para el campo de conductividades ajustado MOC vs TVD

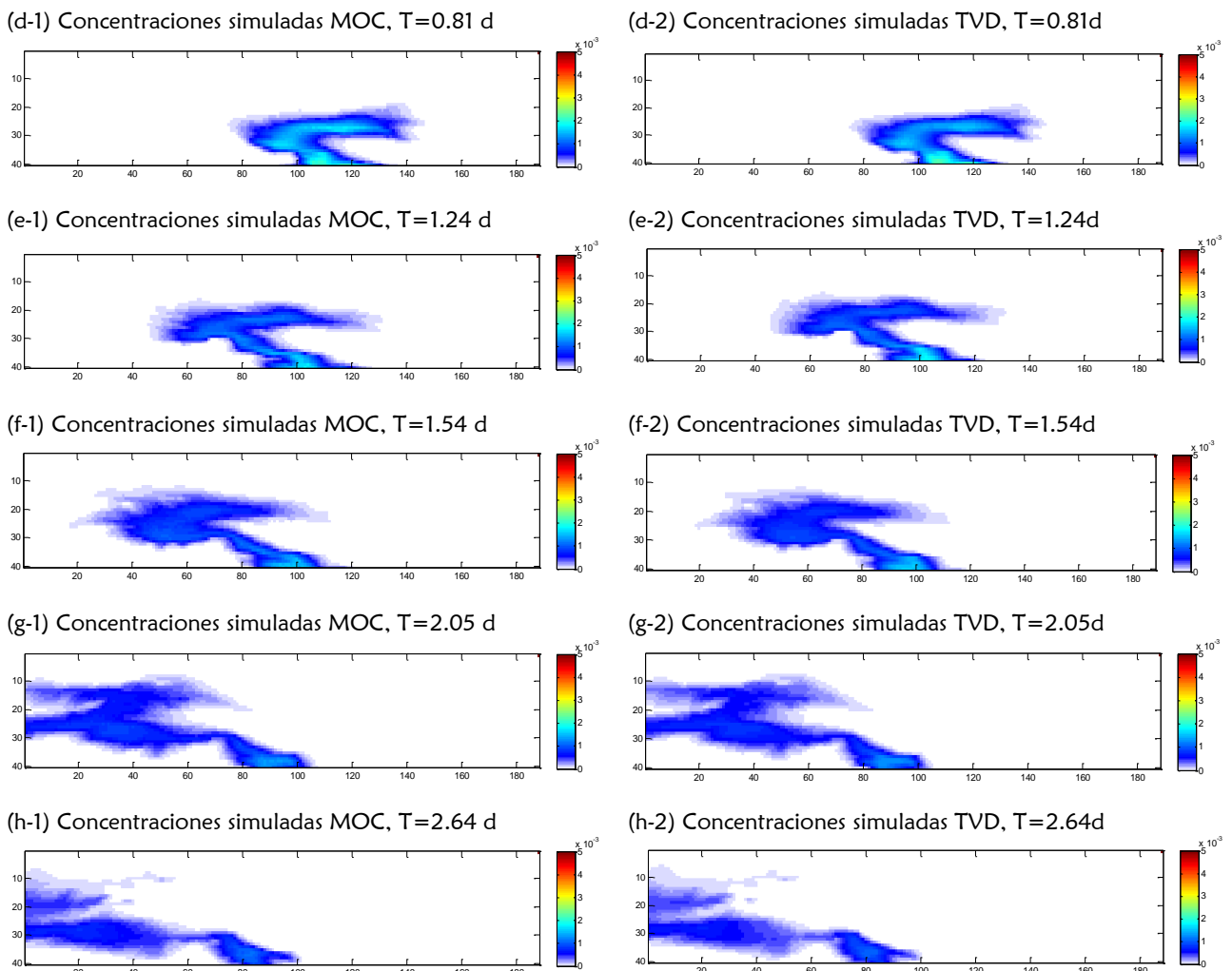


Figura 47. Comparación de mapas de concentraciones simuladas para el campo de conductividades ajustado MOC vs TVD

Para esta condición, se obtuvo una mejor reproducción de los canales de flujo vistos en el ensayo y un mayor ajuste de la distribución de las concentraciones en el medio al igual que en el tiempo de desarrollo del penacho. Aunque las modificaciones mejoran sensiblemente el desarrollo del penacho, las simulaciones numéricas para ambos casos reprodujeron cualitativa y cuantitativamente de forma aproximada el transporte del trazador.

Los efectos gravitatorios observados en el desarrollo inicial continuaron siendo sobreestimados mientras que la dispersión disminuyó sensiblemente en comparación a la calibración inicial, principalmente en las zonas inicial y central del medio. Zonas donde la componente advectiva del flujo fue incrementada. Por otra parte, la dispersión en la zona final del tanque continuo siendo bastante mayor a la observada experimentalmente.

4.3.4 Balances de masa y curvas de evolución local de la concentración

Como se ha comentado anteriormente, el método TVD es mucho más preciso en el balance de masa, mientras que el método MOC genera una variación mayor de ésta. Esta diferencia se hizo más significativa con el modelo SEAWAT (Figura 48). A pesar de la variación, los resultados obtenidos se consideran válidos ya que el error no supera el 5%. De la gráfica, el modelo simula un movimiento más lento al interior del tanque en comparación con el ensayo, provocando la salida del trazador a aproximadamente 1.68 días desde la inyección, cuando experimentalmente la salida se inicio a los 1.5 días.

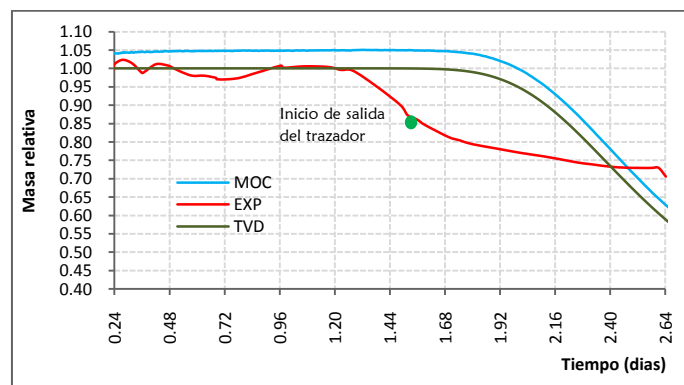


Figura 48. Curva de masa relativa para condiciones experimentales y simuladas con campo de conductividades modificadas para MOC y TVD.

Posterior a la salida, el movimiento del trazador simulado al interior del tanque, es mayor al observado, por ello para 2.64 días el modelo genera la salida del 40% de la masa inyectada, un 10% más en comparación a los resultados experimentales. Una diferencia a resaltar es la distribución de las concentraciones en los tiempos iniciales realizada por los métodos MOC y TVD, tiempos donde las variaciones de la densidad determinan la forma del penacho. Como se observa en la Figura 49(a-b), en el punto de observación 1, la distribución de concentraciones es mayor para el modelo simulado con TVD en comparación con el MOC.

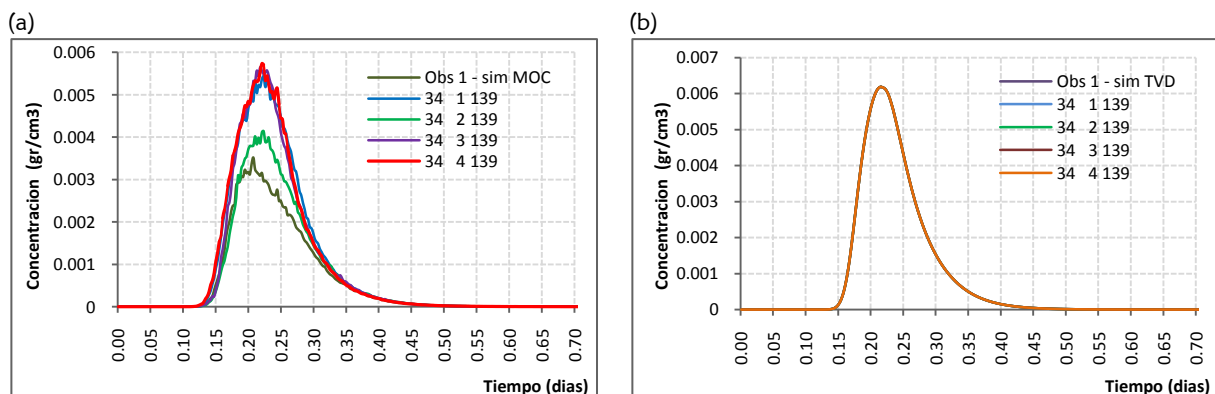


Figura 49. Comparación de la curva de concentraciones entre las filas discretizadas para el medio en el punto de observación 1. (a) Simulación del modelo de conductividades modificadas – método MOC. (b) Simulación del modelo de conductividades modificadas – método TVD. (Obs 1 corresponde a la fila 5)

Esto es debido, a que las simulaciones realizadas con el método MOC presentan una distribución no uniforme de las concentraciones en el espesor del tanque. Por ello, el penacho se desarrolla más rápido en la zona media (filas 3 y 4) en comparación con las zonas laterales – fila 1 y 5 – (Figura 49-a). Mientras que el modelo con TVD la distribución en el espesor es uniforme (Figura 49-b).

Para observar el movimiento del trazador, resultado de los modelos simulados (MOC y TVD) con el campo de conductividades ajustado, en la Figura 50 se graficó comparativamente las curvas de llegada de las concentraciones para cada uno de los puntos de observación propuestos vrs datos experimentales.

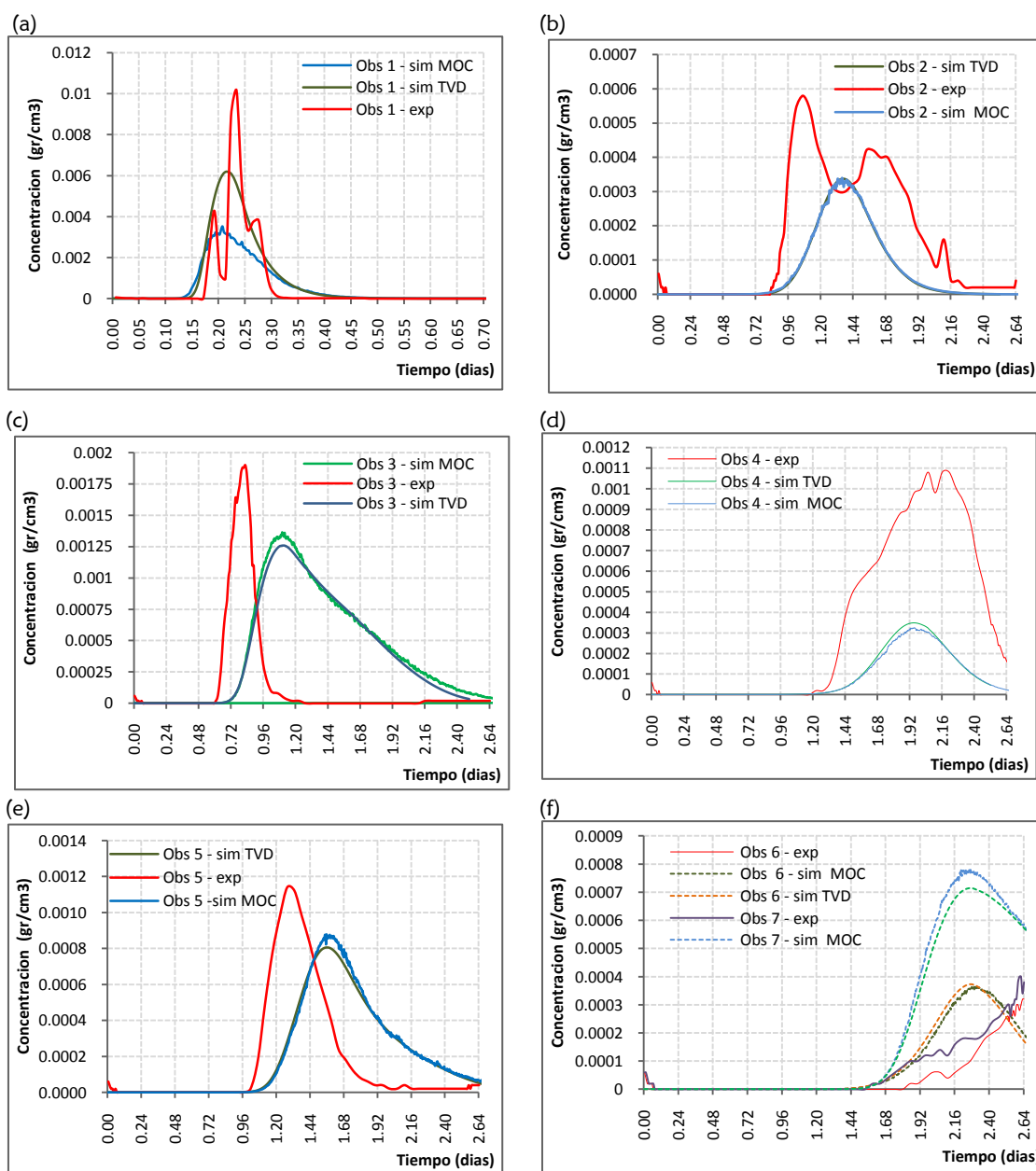


Figura 50. Comparación entre curvas de llegada para modelos simulados con MOC, TVD y obtenidas con datos experimentales para los puntos de observación 1 hasta 7. (Sim: simulación, exp: experimental).

Los resultados muestran como el desarrollo inicial del penacho afecta la distribución de la masa al interior del tanque. Debido que el modelo con los métodos de transporte MOC y TVD sobreestima el efecto gravitatorio causado por la densidad, la distribución de concentraciones difiere con la distribución observada a partir de datos experimentales.

En el punto de observación 1 (Figura 50a) la concentración máxima experimental medida corresponde a 0.01 gr/cm^3 , mientras que las simulación para TVD y MOC indican concentraciones máximas de 0.0062 y 0.0035 gr/cm^3 . Las curvas de avance tanto para el método TVD como MOC presentan una forma achatada y con una base aproximadamente del doble de longitud que la vista en la curva experimental. Esto indica como se ha mencionado anteriormente, que el movimiento del trazador simulado por la zona evaluada, es más lento en comparación al ensayo de laboratorio. Por lo tanto, la dispersión se incrementa generando colas de curvas largas.

Esta condición genera un retraso en el movimiento del penacho, que es visible en los puntos posteriores de observación 3 y 5 (Figuras 50c y e respectivamente). A medida que avanza el penacho, la dispersión se incrementa principalmente en las zonas de conductividad de valores medios a altos. Dado que en las simulaciones el descenso del trazador es muy pronunciado, la fracción de masa que se dispersa es menor a la observada experimentalmente. Por ello, en los puntos de observación 2 y 4, las concentraciones calculadas son menores a las experimentales en un orden de 50 a 70% aproximadamente.

Por otra parte, en los puntos de observación 6 y 7 (Figura 50f) la curva de concentraciones de salida del trazador coincide temporalmente con la curva experimental para el punto de observación 7, aunque cuantitativamente las concentraciones son sensiblemente mayores por las razones anteriormente expuestas. Cabe anotar, que para el punto de observación 6, el modelo reproduce aproximadamente la distribución de las concentraciones en la zona superior del tanque, aunque la salida del trazador es más rápida que la experimentada.

Conclusiones

En este estudio, se realizó la modelación matemática de los efectos gravitatorios observados en ensayo de trazador en un medio poroso heterogéneo completamente saturado. El desarrollo del trabajo se fundamentó en la información proveniente de un experimento completamente monitoreado y condicionado, del cual se tiene gran conocimiento de la estructura del medio y de las condiciones bajo las cuales se realizó la prueba.

La base de datos elaborada de la experimentación, contempla información tanto de niveles piezométricos como mapas de distribución de concentraciones obtenidas con base en técnicas de análisis de imágenes digitales. Técnica con la cual se obtiene datos detallados de concentración sobre todo el dominio del campo de flujo visible. El disponer de este tipo de información tan exhaustiva, facilita conocer con gran detalle las características del ensayo y favorecen la elaboración de un modelo para la reproducción numérica del experimento realizado. En particular, la dificultad radica en traducir la información experimental en un modelo conceptual que logre reflejar y reproducir las condiciones del ensayo. Además de emplear las ecuaciones que puedan describir los fenómenos observados con mayor exactitud y los métodos que permitan una solución de estas, más acorde a los datos experimentales.

En el trabajo desarrollado se trabajó en la reproducción matemática del movimiento del trazador cuya densidad es mayor a la del agua del medio, por lo cual generó un penacho denso cuyo movimiento favoreció los efectos gravitatorios en el medio poroso. Para ello se empleó dos aproximaciones de la ecuación de flujo gobernante, considerando densidad constante y variable, utilizando códigos numéricos ampliamente distribuidos.

Los resultados de la experimentación y modelación numérica realizada, permiten concluir que:

Acerca de los resultados experimentales

- El movimiento vertical del trazador en los tiempos iniciales de la experimentación, determina de forma muy marcada, la forma y el área de desarrollo del penacho en los tiempos posteriores a la inyección. El éxito de la simulación se basa en poder reproducir el hundimiento observado, ya que la distribución de la masa del trazador en el medio está íntimamente ligada a los patrones de flujo y campos de conductividad existentes.
- Las heterogeneidades del campo de conductividad, afectan sensiblemente el patrón de flujo y transporte del trazador. Los procesos de mezcla y las perturbaciones en la forma del penacho a través del sistema, pueden ser amplificadas o reducidas por las heterogeneidades del medio (Diersch & Kolditz, 2002).
- Las diferencias de densidad entre el trazador y el agua subterránea, juegan un papel importante en la estabilidad del penacho denso. Se observa además, que otros factores tales como la velocidad horizontal del medio, la cercanía al punto de inyección del trazador y la distribución del campo de conductividades, influyen significativamente en el desarrollo de los efectos gravitatorios y en el desarrollo del penacho.
- Del ensayo de laboratorio llevado a cabo para determinar experimentalmente la función que describe la relación de la variación de la densidad con respecto a la concentración, se obtuvo como resultado que para el colorante Brilliant Blue CFC E-133, la pendiente que describe esta relación tiene un valor de 0.53.

Acerca del uso de modelos numéricos de densidad constante

- El uso de modelos numéricos basados en el esquema tradicional del flujo y transporte (Modflow/MT3DMS) los cuales consideran la densidad constante, no permiten reproducir el movimiento vertical del trazador. Este planteamiento matemático no es sensible a los efectos de las variaciones de los frentes de concentración derivados de las diferencias de densidades en el medio. Por ello, el penacho simulado para los tiempos iniciales no presenta similitud con los datos experimentales.
- Cuando el movimiento del penacho no está condicionado por los efectos de las diferencias de densidad y es más afectado por el movimiento advectivo en el medio, el modelo reproduce de forma aproximada la forma y el movimiento de éste, que ocurre principalmente en la zona central y final del tanque, para los tiempos de simulación posteriores a 1.24 días. Cuantitativamente hay una sobrestimación de las concentraciones salientes en comparación a los datos experimentales, consecuencia de la distribución uniforme de la masa al interior del penacho.

- En las zonas donde existe concordancia cualitativa entre los resultados obtenidos tanto numérica como experimentalmente, el modelo describe de forma similar el grado de dispersión longitudinal del trazador, mientras que la dispersión vertical es sobre-estimada, generando un área de mayor afectación. Transversalmente el modelo reproduce condiciones similares para todas las filas de la discretización propuesta.
- Las simulaciones realizadas bajo las aproximaciones Eulerianas (TVD-DF) y aproximaciones mixtas (MOC- DF), no mostraron diferencias significativas en los resultados de distribución de concentraciones. En términos de conservación de masa, el método MOC no es tan conservativo como el método TVD, pero la dispersión generada es menor a la observada para las simulaciones con TVD.
- En la práctica, el uso de este tipo de modelos no es recomendable para reproducir experimentos o trabajos de campo donde se considere que puede existir efectos gravitatorios debido a la naturaleza del trazador usado o el contaminante evaluado. Su uso supone una modelación no realista del movimiento del penacho.

Para el caso del uso del modelo numérico de densidad variable

- Para comprender el efecto de fenómenos que se dan en las formaciones reales pero de los cuales es prácticamente inviable tener el detalle de información y medidas en los instantes iniciales, los ensayos en tanques experimentales representan una herramienta de análisis poderosa. El estudio realizado indica que el contar con información detallada en tiempos iniciales del desarrollo del penacho, permite entender el comportamiento de esos sistemas, aunque la simulación de estos procesos es compleja.
- El uso de un modelo matemático que considere el efecto de las diferencias de densidades entre el soluto y el medio, permite reproducir aproximadamente los efectos gravitatorios observados experimentalmente en el penacho. El modelo es sensible a los gradientes de densidad por esta diferencia, provocando el desarrollo vertical del penacho.
- La función que representa las variaciones de la densidad con respecto a la concentración para los trazadores empleados en ensayos experimentales debe ser calculada experimentalmente o en su defecto, emplear la ecuación que describe esta relación en términos de concentraciones y densidades de saturación si se cuenta con este tipo de información. El considerar el comportamiento del trazador similar al agua del mar, supone un error conceptual, si éste presenta características diferentes.
- El modelo numérico bajo las condiciones de modelación planteadas, sobre-estimó el proceso de la libre convección y la mezcla vertical. La propagación del efecto gravitatorio en zonas donde experimentalmente no se observó el desarrollo del

penacho, provocó una distribución compleja de las concentraciones al interior del penacho favoreciendo la acumulación de masa en la parte baja de éste.

- En la simulación del movimiento del penacho, se observó dependencia principalmente a la heterogeneidad del campo de conductividades, al campo de velocidades horizontales generadas, a la tasa de inyección y distribución del soluto en el medio. Además la naturaleza del soluto adicionado determina la interacción con el agua del medio y condiciona las diferencias de densidad.
- La definición de las condiciones iniciales de las concentraciones juega un papel importante en la formación y desarrollo del penacho, debido a que una mayor distribución de la masa atenúa el efecto de la densidad. Por ello, aunque las simulaciones numéricas en general reproducen cualitativamente los resultados experimentales, cuantitativamente subestimaron la distribución de concentraciones en el medio poroso.
- El modelo es capaz de reproducir en los tiempos iniciales de manera aproximada, el patrón de flujo del penacho, condición que determina su desarrollo posterior. Aunque se dio una sobreestimación del descenso del trazador, la forma del penacho simulada guarda similitud con las observaciones experimentales y permite conocer cualitativamente las áreas afectadas, a pesar de que estas son mayores dado que la dispersión del penacho es sensiblemente mayor en el modelo numérico que en la realidad.
- La discrepancia entre las simulaciones y los resultados de laboratorio pueden ser debidas al tamaño de la malla empleada para el modelo. El uso de una de malla con una alta resolución puede permitir una mayor exactitud en la representación de la mezcla dispersiva que ocurre en el experimento. La implicación del uso de un mallado fino, se encuentra en la disponibilidad computacional, ya que gasta mucho tiempo en la resolución de los procesos.
- Los estudios numéricos en el comportamiento de flujos de densidad variable tridimensionales son raros en la literatura. Este tipo de modelos permite observar la distribución de las concentraciones en el espesor del tanque y conocer la variabilidad generada por la modelación de los cambios de densidad transversalmente, la cual para tiempos iniciales genera diferentes patrones de flujo, ya que el penacho presenta un comportamiento inestable dependiendo del método de resolución de transporte advectivo empleado.
- Los métodos de solución del transporte advectivo tienen un rol importante en los resultados de las simulaciones. En el caso del uso del MOC, los resultados indicaron que el desarrollo de inestabilidades en los tiempos iniciales, dependían de las variaciones de la heterogeneidad del campo de conductividades. Estas inestabilidades simuladas por el modelo son irrealistas ya que no se observaron experimentalmente y demuestra la alta sensibilidad del modelo a la definición de los

parámetros físicos del experimento. Por otra parte, para el caso del modelo simulado con TVD, se observó una mayor estabilidad del penacho, no se generó la distribución heterogénea de densidades transversalmente en tiempos iniciales y su forma fue más compacta, para los tiempos donde los efectos de la densidad determinaron el movimiento del trazador.

- La simulación de inestabilidades gravitatorias por el modelo dependen sensiblemente de la heterogeneidad del medio planteada. La heterogeneidad determina tanto el inicio de las inestabilidades, como el control sobre el crecimiento o decaimiento de las mismas. Puede favorecer la mezcla dispersiva vertical si el desarrollo del penacho está condicionado a zonas de alta conductividad o puede limitar y generar resistencia al movimiento vertical si son zonas de baja conductividad, favoreciendo la dispersión y acumulación del trazador en esas zonas.
- En la práctica, predecir el movimiento de un penacho denso con modelos de densidad variable es una labor compleja, aunque con información básica se podría conocer de una forma aproximada el posible desarrollo de éste en el medio poroso. Estos modelos a diferencia de los modelos convencionales, permiten tener en cuenta la naturaleza del soluto (reflejada en su densidad) y de esta manera pueden afectar el movimiento del soluto en el medio por esta variable. Debido a que el desarrollo del penacho está condicionado a factores físicos como la heterogeneidad del medio en términos de conductividad y porosidad, las condiciones iniciales, las condiciones de contorno, etc, el nivel de incertidumbre en estos factores puede determinar la consideración de las diferencias de densidades y de ahí los resultados posibles.
- En casos reales puede ser factible encontrarse con concentraciones y densidades del orden de las usadas en el ensayo experimental. Esto supone la posible generación de flujos convectivos mixtos, dependiendo de la heterogeneidad y características del medio. En el caso particular, para el uso de modelos de densidad variable, se recomienda emplear la relación de densidad/concentración de 0.53, la cual fue determinada a través de ensayos de laboratorio.

LINEAS DE TRABAJO FUTURO

Acorde a los resultados obtenidos, se considera como futuras líneas de trabajo:

- El estudio del efecto de las heterogeneidades del medio en los procesos de convección libre y desarrollo de penachos densos.
- El estudio de cómo los flujos de densidad variable afectan las componentes dispersivas, dado que se observó la sobreestimación de esta componente en todas las modelaciones.
- Estudio del efecto de la dispersividad transversal en el desarrollo de inestabilidades gravitatorias y distribuciones de concentraciones en modelos tridimensionales.

6

Referencias bibliográficas

(2) Llopis-Albert, C., & Capilla, J. (2009). Gradual conditioning of non-Gaussian transmissivity fields to flow and mass transport data: 2. Demonstration on a synthetic aquifer. *Journal of Hydrology*, 371, 53–65.

Arlai, P., & Koch, M. (2009). The importance of density-dependent flow and solute transport modeling of seawater intrusion into a coastal aquifer system. *International Symposium on Efficient Groundwater Resources Management (IGS-TH 2009)*. Bangkok, Thailand,.

Bachu, S. (1995). Flow of variable-density formation water in deep sloping aquifers; review of methods of representation with case studies. *Journal of Hydrology* 164 (1-4), 19 - 38.

Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. New York: Dover publications, inc.

Bear, J. (1979). *Hydraulics of groundwater*. New York: MacGraww-Hill.

Beinhorn M., Dietrich P., Kolditz O. (2005). 3-D numerical evaluation of density effects on tracer tests. *Journal of Contaminant Hydrology, Volumen 81*, 89 - 105.

Braatz R, Koch M. (2007). Tank experiments, numerical investigations and stochastic approaches of density-dependent flow and transport in heterogeneous media. *Groundwater and ecosystems - XXXV International Association of Hydrogeologists*. Lisboa.

Capilla, Jose E; Gomez-Hernandez, Jaime; Sahuquillo, Andres. (1998). Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric head data. 3. Application to the Culebra formation at the Waste Isolation Pilot Plan (WIPP), New Mexico, USA. *Journal of Hydrology*, 207, 254-269.

Chan- Hee Park, Mustafa M Aral. (2007). Sensitivity of the solution of the Elder problem to density, velocity and numerical perturbations. *Journal of Contaminant Hydrology*, 33 - 49.

Dane J.H & Guven O, Oostrom M., Hayworth JS, Leijnse A. (1994). Dense aqueous phase contaminant plume behaviour in porous media near the groundwater table. *Future Groundwater Resources at Risk, Publicacion 222*, 333 - 340.

Diersch, H. J. (2005). *FEFLOW - Finite element subsurface flow & transport simulation system. Reference Manual*. Berlin - Germany: WASY GmbH - Institute for water resources planning and system research.

Diersch, H., & Kolditz, O. (2002). High density flow and transport in porous media: approaches and challenges. *Advances in Water Resources, Volumen 25*, 899 - 944.

Fan Y, Kahawita R, Tessier J.C. (1994). Numerical study of the effects of a variable density contaminant plume in an unconfined aquifer. *Transactions on ecology and the environment, Vol 5*.

Fetter, C. (1999). *Contaminant hidrogeology*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc.

Fetter, C.W. (2001). *Applied hidrogeology*. Prentice Hall, Fourth Edition.

Graf T, Therrien R. (2008). A test case for the simulation of three - dimensional variable-density flow and solute transport in discretely-fractured porous media. *Advances in Water Resources, Volumen 31*, 1253 - 1363.

Graf T., Therrien R. (2007). Variable density groundwater flow and solute transport in irregular 2D fracture networks. *Advances in Water Resources, Volumen 30*, 455 - 468.

Guo Weixing, Langevin Christian D. (2002). *User´s guide to SEAWAT: A computer program for simulation of three-dimensional variable-density groundwater flow*. USGS techniques of water resources investigations Book 6 Chapter A7.

Ham P.A.S, P. H. (2007). Predictive modelling of dispersion controlled reactive plumes at the laboratory-scale. *Journal of Contaminant Hydrology, Volumen 93*, 304 - 315.

Harbaugh A.W, E.R Banta, MC Hill y M.G Macdonal (2000). MODFLOW 2000, the US Geological Survey modular ground-water model: User guide to modularization concepts and the ground-water flow process. USGS Open File Report 00-92. USGS.

Hayworth JS. (1993). *A physical and numerical study of three - dimensional behavior of dense aqueous phase contaminant plumes in porous media*. Auburn University, Alabama: PhD dissertation, Dep of Civil Engineering.

Herbert A, Jackson C, Lever D. (1988). Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration . *Water Resources Research Vol 24 No.10*, 1781-1795.

Heredia, J., & Murillo Díaz, J. (2007). Estado del arte sobre la representación numérica de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable. *Boletín Geológico y Minero*, 118, (Núm. Especial): 555-576.

Holzbecher, E. (1998). *Modeling density-driven flow in porous media: principles, numerics, software*. Berlin Heidelberg - Germany: Springer-Verlag.

Johannsen, K., Kinzelbach, W., Oswald, S., & Wittum, G. (2002). The saltpool benchmark problem - numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium. *Advances in water resources Vol 25*, 335-348.

Koch M, Starke B. (2003). Experimental and Numerical Investigation of Macrodispersion of Density-Dependent Transport in Stochastically Heterogeneous Media: Effects of Boundary Conditions and High concentrations. *Second International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers - Monitoring, Modeling, and Management*. Merida, Mexico.

Koch, M. (s.f.). Numerical Solution of Finger Instabilities in Density and Viscosity Dependent Miscible Solute Transporte. *Mathematical Modeling in Water Resources*.

Koch, M., & Zhang, G. (1992). Numerical simulation of the effects of variable density in a contaminante plume. *Ground Water, Vol 30 (5)*, 731 - 742.

Kolditz O, Ratke R, Diersch H-J, Zielke W. (1998). Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable density flow and transport models. *Advances in Water Resources, Volumen 21*, 27 - 46.

Konikow LF, Sanford WE, Campbell PJ. (1997). Constant concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem. *Water Resources Research*, Vol 33 No.10, pg 2253-2261.

Konikow, L. (2002). Uso de modelos numericos para simular el flujo y transporte subterráneo. En *Isotopos ambientales en el ciclo hidrológico* (págs. 533 - 558). Madrid: Instituto minero y geológico de España - IGME.

Langevin Christian D, Guo Weixing. (2006). MODFLOW/MT3DMS Based simulation fo variable-density ground water flow and transport. *Groundwater*, Vol 44 No.3 pg 339 - 351.

Langevin, Christian D; Shoemaker, W. Barclay; Guo, Weixing. (2003). *MODFLOW 2000, the US Geological Survey Modular Groundwater Model - documentation of the SEAWAT 2000 version with the Variable - density flow process (VDF) and the integrated MT3DMS Transport process (IMT)*. Florida: USGS techniques of water resources investigations. Report 43 - 426.

Liu HH, Dane JH. (1997). A numerical study on gravitational instabilities of dense aqueous phase plumes in three -dimensional porous media. *Journal of Hydrology, Volumen 194* , 126 - 142.

Liu, H., & Dane, J. (1996). A criterion for gravitational instability in miscible dense plumes. *Journal of Contaminant Hydrology, Volumen 23* , 233 - 243.

Llopis-Albert, C., & Capilla, J. E. (2009). Gradual conditioning of non-Gaussian transmissivity fields to flow and mass transport data: 3. Application to the Macrodispersion Experiment (MADE-2) site, on Columbus Air Force Base in Mississippi (USA). *Journal of Hydrology, 371* , 75–84.

Massmann G, Simmons CT, Love A, Ward J, James-Smith J. (2006). On variable density surface water-groundwater interaction: A theoretical analysis of mixed convection in a stably-stratified fresh surface water - saline groundwater discharge zone. *Journal of Hydrology* , 390 - 402.

Mc Neil J.D., Oldenborger G.A., Schincariol R.A. (2006). Quantitative imaging of contaminant distributions in heterogeneous porous media laboratory experiments. *Journal of Contaminant Hydrology* , Vol. 84. Pag 36 - 54.

Oostrom M, Hayworth JS, Dane JH, Guven O. (1992). Behavior of dense aqueous phase leachate plumes in homogeneous porous media. *Water Resources Research, Vol 28 (8)* , 2123 - 2134.

Oyarzún L., R. (2007). *Transporte de contaminantes en aguas subterráneas*. Recuperado el 2009, de Geología, Botánica & Medioambiente (GBM). Aula2pontonet: un portal de cursos y documentos on-line.: http://www.aulados.net/Temas_ambientales/Contaminantes_aguas_subterranas/Transporte_contaminantes.pdf

Salamon, P., Fernández-García, D., & Gómez, J. (2006). A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method. *Contaminant Hydrology 87* , 277 - 305.

Sanchez, I. (2007). *Desarrollo de un modelo fisico de laboratorio de escala intermedia (ISE)*. Valencia: Tesina para la obtencion del Diploma de Estudios Avanzados, Departamento de ing. hidraulica y medio ambiente, Universidad Politecnica de Valencia.

Sánchez, I., López, L., & Capilla, J. (2008). Investigacion del flujo y transporte mediante experimentacion a escala intermedia. *Ingeniería del agua* , Vol. 15. No. 3. Pags. 147-162.

Schäfer, W. (s.f.). *Dr.-Ing. Wolfgang Schäfer - Groundwassermodellierung*. Recuperado el 9 de Octubre de 2009, de http://www.schaefer-gwm.de/downloads/transport_modelling.pdf

Schincariol R, Schwartz F. (1990). An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media. *Water Resources Research*, Vol 26 (10) , 2317 - 2329.

Schincariol R, Schwartz F, Mendoza C. (1994). On the generation of instabilities in variable density flow. *Water Resources Research*, Vol 30 (4) , 913 - 927.

Senger, R., & Fogg, G. (1990). Stream functions and equivalent freshwater heads for modelign regional flow of variable-density groundwater. 1 Review of theory and verification. *Water Resources Research* 26 , No. 9 pg 2089-2096.

Shincariol R, Schwartz F, Mendoza C. (1997). Instabilities in variable density flows: stability and sensitivity analyses for homogeneous and heterogeneous media. *Water Resources Reserach*, Vol 33 (1) , 31 - 41.

Simmons C, Narayan K, Wooding R. (1999). On a test case for density dependent groundwater flow and solute transport models: the salt lake problem. *Water Resources Research*, Vol 35 (12) , 3607 - 3620.

Simmons CT, Pierini ML, Hutson JL. (2002). Laboratory Investigation of Variable-Density Flow and Solute Transport in Unsaturated-Saturated Porous Media. *Transport in Porous Media*, Volumen 47 , 215 - 244.

Simmons, C. T. (2005). Variable density groundwater flow: From current challenges to future possibilities. *Hydrogeology Journal*, Volumen 13 , 116 - 119.

Simmons, C., Fenstermaker, T., & Sharp, J. J. (2001). Variable density groundwater flow and solute transport in heterogeneous poros media: approaches, resolutions and future challenges. *Journal of Contaminant Hydrology*, Volumen 52 , 245 -275.

Starke B, Koch M. (2001). Experimental and numerical investigation of macrodispersion of density-dependent flow and transport in stochastically heterogeneous media. *Proceedings of "The first International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers*. Essaouira, Marruecos.

Starke B, Koch M. (2003). Experimental and Numerical Investigation of Macrodispersion of Density-Dependent Transport in Stochastically Heterogeneous Media: Effects of Boundary Conditions and High Concentrations. *Second International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers. Monitoring, Modeling, and Management*. Mérida, México.

Starke B, Koch M. (2006). Laboratory experiments and Monte Carlo simulations to validate a stochastic Theory of tracer - and density-dependent macrodispersion. *16th Computational Methods in Water Resources Conference*. Copenhagen, Dinamarca.

Weatherill D, Simmons CT, Voss CI, Robinson NI. (2004). Testing density-dependent groundwater models: two-dimensional steady state unstable convection in infinite, finite and inclined porous layers. *Advances in Water Resources, Volumen 27*, 547 - 562.

Wooding R, Tyler, Scott, White, Anderson. (1997). Convection in groundwater below an evaporating salt lake. *Water Resources Research, Vol 33*, 1219 - 1228.

Woumeni RS, Vauclin M. (2006). A field study of the coupled effects of aquifer stratification, fluid density, and groundwater fluctuations on dispersivity assesmentes. *Advances in Water Resources, Volumen 29*, 1037 - 1055.

Zheng, Chunmiao; Bennett, Gordon D. (2002). *Applied contaminant transport modeling*. New York: Wiley-Interscience.

Zheng, Chunmiao; Wang, Patrick. (1999). *MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. Documentation and User's Guide*. Washington DC: U.S. Army Corps of Engineers.

Anexo 1. Resultados calibración PEST

PEST RUN RECORD: CASE PESTCTL

PEST run mode:- Parameter estimation mode

Case dimensions:-

Number of parameters : 497
 Number of adjustable parameters : 497
 Number of parameter groups : 1
 Number of observations : 36
 Number of prior estimates : 0

OBSERVATIONS

Observation	Value Measured	Value Calculated	Residual	Weight	Group
1	1.623000E-02	1.618773E-02	4.227000E-05	1.000	no_name
2	1.652000E-02	1.667432E-02	-1.543200E-04	1.000	no_name
3	1.701000E-02	1.685901E-02	1.509900E-04	1.000	no_name
4	1.699000E-02	1.712821E-02	-1.382100E-04	1.000	no_name
5	1.712000E-02	1.719846E-02	-7.846000E-05	1.000	no_name
6	1.731000E-02	1.725645E-02	5.355000E-05	1.000	no_name
7	1.735000E-02	1.740032E-02	-5.032000E-05	1.000	no_name
8	1.754000E-02	1.759472E-02	-5.472000E-05	1.000	no_name
9	1.762000E-02	1.773678E-02	-1.167800E-04	1.000	no_name
10	1.781000E-02	1.795639E-02	-1.463900E-04	1.000	no_name
11	1.809000E-02	1.834885E-02	-2.588500E-04	1.000	no_name
12	1.856000E-02	1.860614E-02	-4.614000E-05	1.000	no_name
13	1.573000E-02	1.574831E-02	-1.831000E-05	1.000	no_name
14	1.670000E-02	1.651759E-02	1.824100E-04	1.000	no_name
15	1.692000E-02	1.701568E-02	-9.568000E-05	1.000	no_name

Observation	Value Measured	Value Calculated	Residual	Weight	Group
16	1.709000E-02	1.719617E-02	-1.061700E-04	1.000	no_name
17	1.721000E-02	1.723717E-02	-2.717000E-05	1.000	no_name
18	1.725000E-02	1.728089E-02	-3.089000E-05	1.000	no_name
19	1.742000E-02	1.743265E-02	-1.265000E-05	1.000	no_name
20	1.753000E-02	1.760080E-02	-7.080000E-05	1.000	no_name
21	1.776000E-02	1.777043E-02	-1.043000E-05	1.000	no_name
22	1.796000E-02	1.797127E-02	-1.127000E-05	1.000	no_name
23	1.862000E-02	1.831431E-02	3.056900E-04	1.000	no_name
24	1.889000E-02	1.864706E-02	2.429400E-04	1.000	no_name
25	1.562000E-02	1.557667E-02	4.333000E-05	1.000	no_name
26	1.658000E-02	1.648788E-02	9.212000E-05	1.000	no_name
27	1.694000E-02	1.699086E-02	-5.086000E-05	1.000	no_name
28	1.718000E-02	1.716701E-02	1.299000E-05	1.000	no_name
29	1.726000E-02	1.728287E-02	-2.287000E-05	1.000	no_name
30	1.731000E-02	1.732025E-02	-1.025000E-05	1.000	no_name
31	1.744000E-02	1.749731E-02	-5.731000E-05	1.000	no_name
32	1.751000E-02	1.764962E-02	-1.396200E-04	1.000	no_name
33	1.783000E-02	1.780305E-02	2.695000E-05	1.000	no_name
34	1.808000E-02	1.799333E-02	8.667000E-05	1.000	no_name
35	1.858000E-02	1.829745E-02	2.825500E-04	1.000	no_name
36	1.840000E-02	1.854343E-02	-1.434300E-04	1.000	no_name

OBJECTIVE FUNCTION

Sum of squared weighted residuals (ie phi) = 5.4502E-07
Correlation coefficient = 0.9861

ANALYSIS OF RESIDUALS

Number of residuals with non-zero weight = 36
Mean value of non-zero weighted residuals = -9.1511E-06
Maximum weighted residual [observation "23"] = 3.0569E-04
Minimum weighted residual [observation "11"] = -2.5885E-04
Standard variance of weighted residuals = 1.5140E-08
Standard error of weighted residuals = 1.2304E-04

OPTIMISATION RESULTS

Parameters

Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado
hk_2	120.24	hk_41	38.59	hk_80	62.17	hk_119	63.89	hk_158	63.89	hk_197	21.29	hk_236	12.31	hk_275	16.78	hk_314	6.71	hk_353	13.78	hk_392	2.76	hk_431	2.14	hk_470	0.71
hk_3	120.24	hk_42	37.57	hk_81	54.73	hk_120	21.29	hk_159	34.26	hk_198	43.68	hk_237	16.78	hk_276	16.78	hk_315	6.71	hk_354	6.71	hk_393	2.76	hk_432	1.72	hk_471	0.71
hk_4	120.24	hk_43	120.24	hk_82	37.57	hk_121	21.29	hk_160	21.29	hk_199	21.29	hk_238	15.43	hk_277	6.71	hk_316	6.71	hk_355	13.81	hk_394	1.72	hk_433	1.98	hk_472	0.47
hk_5	37.57	hk_44	120.24	hk_83	37.57	hk_122	63.89	hk_161	21.29	hk_200	16.78	hk_239	7.45	hk_278	6.71	hk_317	16.78	hk_356	6.71	hk_395	1.72	hk_434	2.76	hk_473	0.47
hk_6	37.57	hk_45	120.24	hk_84	37.57	hk_123	63.89	hk_162	21.29	hk_201	16.78	hk_240	6.97	hk_279	6.71	hk_318	16.78	hk_357	16.78	hk_396	2.76	hk_435	1.82	hk_474	0.71
hk_7	120.24	hk_46	54.23	hk_85	120.24	hk_124	21.29	hk_163	21.29	hk_202	16.78	hk_241	6.71	hk_280	6.71	hk_319	16.78	hk_358	6.71	hk_397	2.76	hk_436	2.76	hk_475	0.71
hk_8	120.24	hk_47	120.24	hk_86	118.44	hk_125	21.29	hk_164	21.29	hk_203	16.78	hk_242	6.71	hk_281	16.78	hk_320	6.71	hk_359	6.71	hk_398	1.72	hk_437	1.72	hk_476	0.71
hk_9	120.24	hk_48	120.24	hk_87	37.57	hk_126	21.29	hk_165	21.29	hk_204	16.78	hk_243	6.70	hk_282	16.78	hk_321	6.71	hk_360	6.71	hk_399	2.76	hk_438	1.72	hk_477	0.47
hk_10	37.57	hk_49	37.57	hk_88	37.57	hk_127	48.95	hk_166	21.29	hk_205	16.78	hk_244	16.78	hk_283	16.78	hk_322	6.71	hk_361	6.71	hk_400	2.76	hk_439	1.72	hk_478	0.47
hk_11	120.24	hk_50	120.24	hk_89	37.57	hk_128	41.43	hk_167	22.43	hk_206	16.78	hk_245	16.78	hk_284	6.71	hk_323	6.71	hk_362	6.71	hk_401	2.76	hk_440	1.72	hk_479	0.71
hk_12	75.04	hk_51	120.24	hk_90	120.24	hk_129	63.89	hk_168	63.89	hk_207	6.71	hk_246	16.78	hk_285	6.71	hk_324	6.71	hk_363	16.78	hk_402	2.76	hk_441	2.76	hk_480	0.71
hk_13	120.24	hk_52	37.57	hk_91	120.24	hk_130	36.51	hk_169	63.89	hk_208	6.71	hk_247	16.78	hk_286	6.71	hk_325	16.78	hk_364	16.78	hk_403	2.76	hk_442	2.76	hk_481	0.71
hk_14	120.24	hk_53	37.57	hk_92	37.57	hk_131	21.29	hk_170	21.29	hk_209	6.71	hk_248	16.78	hk_287	16.78	hk_326	16.78	hk_365	12.55	hk_404	2.76	hk_443	2.42	hk_482	0.71
hk_15	37.57	hk_54	120.24	hk_93	37.57	hk_132	21.29	hk_171	21.29	hk_210	6.71	hk_249	16.78	hk_288	16.78	hk_327	8.33	hk_366	6.71	hk_405	2.76	hk_444	2.43	hk_483	0.47
hk_16	49.87	hk_55	120.24	hk_94	37.57	hk_133	63.89	hk_172	21.29	hk_211	16.78	hk_250	9.64	hk_289	6.71	hk_328	16.78	hk_367	6.71	hk_406	1.72	hk_445	1.97	hk_484	0.47
hk_17	54.45	hk_56	84.97	hk_95	37.57	hk_134	63.89	hk_173	21.29	hk_212	16.78	hk_251	6.71	hk_290	16.78	hk_329	6.71	hk_368	7.48	hk_407	1.72	hk_446	2.76	hk_485	0.71
hk_18	37.57	hk_57	37.57	hk_96	37.57	hk_135	63.89	hk_174	21.29	hk_213	16.78	hk_252	6.71	hk_291	16.78	hk_330	6.71	hk_369	2.76	hk_408	2.76	hk_447	2.07	hk_486	0.71
hk_19	37.57	hk_58	37.57	hk_97	37.57	hk_136	55.73	hk_175	23.84	hk_214	16.78	hk_253	6.71	hk_292	6.71	hk_331	6.71	hk_370	2.76	hk_409	2.76	hk_448	1.72	hk_487	0.71
hk_20	120.24	hk_59	37.57	hk_98	37.57	hk_137	23.43	hk_176	63.89	hk_215	16.78	hk_254	6.71	hk_293	6.71	hk_332	6.71	hk_371	2.76	hk_410	1.72	hk_449	0.71	hk_488	0.51
hk_21	120.24	hk_60	51.04	hk_99	63.89	hk_138	63.89	hk_177	21.29	hk_216	16.78	hk_255	16.78	hk_294	6.71	hk_333	16.78	hk_372	2.76	hk_411	1.72	hk_450	0.48	hk_489	0.71
hk_22	120.24	hk_61	120.24	hk_100	63.89	hk_139	63.89	hk_178	21.29	hk_217	13.78	hk_256	16.78	hk_295	6.71	hk_334	16.78	hk_373	2.76	hk_412	2.76	hk_451	0.71	hk_490	0.47
hk_23	120.24	hk_62	120.24	hk_101	63.89	hk_140	42.15	hk_179	21.29	hk_218	6.71	hk_257	16.78	hk_296	6.71	hk_335	13.60	hk_374	1.72	hk_413	2.76	hk_452	0.71	hk_491	0.47
hk_24	120.24	hk_63	43.78	hk_102	21.29	hk_141	21.29	hk_180	21.29	hk_219	6.71	hk_258	16.78	hk_297	16.78	hk_336	6.71	hk_375	2.76	hk_414	1.72	hk_453	0.48	hk_492	0.71
hk_25	120.24	hk_64	37.57	hk_103	21.29	hk_142	21.29	hk_181	21.29	hk_220	6.71	hk_259	13.04	hk_298	16.78	hk_337	6.71	hk_376	2.76	hk_415	2.76	hk_454	0.71	hk_493	0.71
hk_26	120.24	hk_65	37.57	hk_104	63.89	hk_143	29.89	hk_182	63.89	hk_221	6.71	hk_260	6.71	hk_299	6.71	hk_338	6.71	hk_377	2.76	hk_416	2.76	hk_455	0.71	hk_494	0.51
hk_27	120.24	hk_66	37.57	hk_105	63.89	hk_144	21.29	hk_183	21.29	hk_222	13.61	hk_261	6.71	hk_300	16.78	hk_339	6.71	hk_378	2.76	hk_417	1.72	hk_456	0.71	hk_495	0.71

Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado	Parametro numero	Valor calculado
hk_28	120.24	hk_67	120.24	hk_106	63.89	hk_145	21.29	hk_184	21.29	hk_223	16.78	hk_262	6.71	hk_301	16.78	hk_340	16.78	hk_379	2.76	hk_418	2.76	hk_457	0.71	hk_496	0.47
hk_29	37.57	hk_68	79.52	hk_107	34.48	hk_146	21.29	hk_185	21.29	hk_224	16.78	hk_263	6.71	hk_302	10.10	hk_341	6.71	hk_380	2.76	hk_419	2.76	hk_458	0.71	hk_497	0.47
hk_30	120.24	hk_69	58.36	hk_108	39.23	hk_147	29.84	hk_186	21.29	hk_225	16.78	hk_264	6.71	hk_303	6.71	hk_342	15.61	hk_381	2.76	hk_420	1.72	hk_459	0.71	hk_498	0.62
hk_31	71.12	hk_70	37.57	hk_109	21.29	hk_148	21.29	hk_187	21.29	hk_226	16.78	hk_265	16.78	hk_304	6.71	hk_343	16.78	hk_382	2.76	hk_421	2.76	hk_460	0.71		
hk_32	37.57	hk_71	37.57	hk_110	21.29	hk_149	21.29	hk_188	21.29	hk_227	7.35	hk_266	16.78	hk_305	6.71	hk_344	6.71	hk_383	1.72	hk_422	2.76	hk_461	0.71		
hk_33	37.57	hk_72	37.57	hk_111	21.29	hk_150	21.29	hk_189	21.29	hk_228	16.78	hk_267	6.71	hk_306	6.71	hk_345	6.71	hk_384	2.76	hk_423	1.76	hk_462	0.71		
hk_34	120.24	hk_73	37.57	hk_112	63.89	hk_151	63.89	hk_190	21.29	hk_229	6.71	hk_268	6.71	hk_307	16.78	hk_346	6.71	hk_385	1.72	hk_424	2.76	hk_463	0.48		
hk_35	120.24	hk_74	37.57	hk_113	62.24	hk_152	63.89	hk_191	21.29	hk_230	6.71	hk_269	6.71	hk_308	9.03	hk_347	11.14	hk_386	2.76	hk_425	1.72	hk_464	0.48		
hk_36	120.24	hk_75	120.24	hk_114	63.89	hk_153	21.29	hk_192	63.89	hk_231	6.71	hk_270	6.71	hk_309	16.78	hk_348	16.78	hk_387	2.76	hk_426	1.72	hk_465	0.71		
hk_37	37.57	hk_76	37.57	hk_115	54.07	hk_154	21.29	hk_193	21.29	hk_232	6.71	hk_271	6.71	hk_310	16.78	hk_349	15.35	hk_388	1.72	hk_427	1.99	hk_466	0.71		
hk_38	43.32	hk_77	37.57	hk_116	63.89	hk_155	21.29	hk_194	21.29	hk_233	16.78	hk_272	6.71	hk_311	16.78	hk_350	16.78	hk_389	1.72	hk_428	2.76	hk_467	0.71		
hk_39	120.24	hk_78	37.57	hk_117	63.89	hk_156	21.29	hk_195	63.89	hk_234	16.78	hk_273	16.78	hk_312	16.78	hk_351	6.71	hk_390	2.76	hk_429	2.76	hk_468	0.48		
hk_40	120.24	hk_79	37.57	hk_118	63.89	hk_157	16.78	hk_196	21.29	hk_235	16.78	hk_274	16.78	hk_313	6.71	hk_352	6.71	hk_391	2.76	hk_430	2.76	hk_469	0.71		