



Migración de solutos en formaciones porosas saturadas

Jacqueline Köhn, Eduardo E. Kruse y Juan E. Santos

Departamento de Geofísica Aplicada, Fac. De Ciencias Astronómicas y Geofísicas, UNLP, Argentina.

RESUMEN

Este trabajo se refiere al modelado del flujo subterráneo y la simulación del transporte de contaminantes en formaciones porosas saturadas. La elaboración de un modelo matemático que describa esta situación no sólo es útil para representar el estado actual de contaminación sino para realizar un pronóstico hacia el futuro. La metodología utilizada se basa en la observación, teorización y simulación que se puede obtener en geofísica vinculando las distintas posibilidades que brinda la interrelación de respuestas reales del comportamiento hidrológico y la matemática aplicada que proporciona la estructura lógica para descifrar los efectos individuales de los fenómenos físicos generales. La técnica numérica TVD y el método iterativo mixto de características fueron empleados para la simulación de transporte bidimensional de contaminantes. Con el objetivo de comparar ambos métodos se planteó un caso sintético de migración de contaminante conservativo (cloruro) a partir de una fuente continua y puntual ubicada en la zona saturada.

INTRODUCCION

Durante la década pasada una considerable parte de la investigación concerniente a transporte de solutos en el subsuelo se ha enfocado hacia la comprensión del comportamiento de contaminantes disueltos migrando en formaciones geológicas (Dagan, 1988, 1990, 1991; Gelhar and Axness, 1983; Neuman et al., 1987; Sposito and Barry, 1987; Neuman and Zhang, 1990).

Para los fenómenos geofísicos, la naturaleza en sí misma debe tratarse como un laboratorio para considerar las observaciones de los fenómenos naturales. Sin embargo, en ese laboratorio natural es impracticable aislar e investigar los fenómenos individuales, entonces frecuentemente la observación corresponde al fenómeno físico en su totalidad.

Las técnicas a implementar en lo que se refiere a la simulación del transporte de contaminantes tienen en cuenta la variabilidad en el tiempo del campo de velocidad del flujo de agua subterránea. La simulación numérica del transporte de contaminantes se efectúa a través de un modelo matemático e involucra el campo de velocidad responsable del movimiento de dichos contaminantes. Ese campo de velocidad puede ser constante o variable, existiendo en los medios porosos trayectorias preferenciales de flujo.

El grado de atenuación que ocurre entre la fuente contaminante y el acuífero determina el grado de contaminación. La capacidad de atenuación o purificación de los materiales del subsuelo consiste en numerosos procesos físicos, químicos y biológicos en el sistema de agua subterránea y está afectado por el mecanismo de transporte de solutos y por las condiciones hidrogeológicas. Hay tres mecanismos principales de migración: convección, difusión y dispersión cinemática. La advección es el movimiento del contaminante causado por el flujo de agua subterránea. El fenómeno de difusión molecular es el responsable de la agitación molecular. El fenómeno de dispersión cinemática está relacionado a las heterogeneidades de la velocidad microscópica dentro de los poros. El medio poroso natural tiene numerosos poros y conectados entre sí, de diferente tamaño, forma y orientaciones; por lo tanto el contaminante se mueve dentro de un campo de velocidad determinado por el medio. Este fenómeno es denominado "dispersión hidrodinámica", que ocurre en sentido transversal y longitudinal.

Los acuíferos altamente permeables con niveles freáticos poco profundos son especialmente susceptibles a contaminarse por actividades humanas locales (fuentes puntuales) o esparcidas (fuentes dispersas).

Ejemplos de fuentes dispersas serían los contaminantes agrícolas, petrolíferos. Las aplicaciones dispersas de diferentes pesticidas constituyen una manera de contaminar un acuífero. El ritmo de la recarga natural e irrigación es un factor importante que afecta la infiltración del pesticida. La producción de petróleo afecta la calidad del agua subterránea, en lo que se refiere a las actividades de refinamiento y almacenamiento. La producción de solución salina en conjunción con el petróleo es el mayor potencial de contaminación de aguas subterráneas. Debido a que la solución salina está en contacto directo con el petróleo durante su producción, algunos hidrocarburos están presentes durante la evacuación de dichas soluciones. Por lo tanto, donde el agua subterránea ha sido afectada por las soluciones salinas, los hidrocarburos podrían constituir un contaminante. O sea, los hidrocarburos podrían acompañar las sales mientras ellas percolan hacia el subsuelo. La cantidad de contaminantes orgánicos que estarían asociados con las soluciones salinas es desconocida. Los factores que afectan el desarrollo de fuentes no puntuales de contaminación son muchos, entre ellos se destacan (Helgesen J. et. al, 1994) el uso del suelo y la litología de la zona no saturada.

El objetivo de este trabajo es el modelado en geofísica aplicado a transporte de solutos en zonas saturadas. Para ello, se desarrollaron los simuladores numéricos necesarios empleando dos técnicas diferentes (método TVD y método de característica), para la posterior comparación de los resultados.

PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS: GENERALIDADES

Determinar las propiedades geológicas e hidrogeológicas y dimensiones de cada unidad sedimentaria que son afectadas por la contaminación del agua subterránea incluye evaluar el tipo de roca, espesor del acuífero y unidades confinantes, su distribución areal, configuración estructural, transmisividad, conductividad hidráulica, infiltración.

En el subsuelo se definen dos zonas: una zona no-saturada y otra saturada. El límite entre ambas es el nivel freático. El agua en la zona no saturada está a una presión hidráulica menor que la atmosférica. El agua en la zona saturada ocupa todos los poros y otras aberturas y se encuentra a una presión más grande que la atmosférica.

La parte de la formación que constituye el acuífero está saturada con agua; una capa permeable no saturada no constituye un acuífero. Un acuífero está confinado si está cubierto por una formación con baja permeabilidad y si la presión hidráulica del agua que éste contiene es más alta que la del límite superior.

La porosidad es una medida de la capacidad acuífera de un medio y, juega un rol muy importante en la aptitud de éste con respecto a la transmisión de agua. Dicha aptitud se expresa por la conductividad del fluido en formación (o conductividad hidráulica en caso del agua).

La conductividad hidráulica K es una constante que depende del medio poroso y de las características y propiedades del fluido. Es igual a la permeabilidad específica k excepto un factor de escala. Aquellas rocas o acuíferos en los cuales la conductividad hidráulica es bastante uniforme son llamados homogéneos y aquellos en los cuales es variable son heterogéneos. El hecho que tanto estratos sedimentarios consolidados y no consolidados son depositados horizontalmente determina que la conductividad hidráulica sea generalmente más grande en sentido horizontal que en vertical, generalmente varios órdenes de magnitud de diferencia.

La permeabilidad es una característica del medio. Una roca puede ser muy porosa pero poco permeable. La permeabilidad se debe a la intercomunicación entre los poros, o sea a su porosidad efectiva.

METODOLOGIA

El modelo para describir la migración de plumas contaminantes en formaciones porosas presenta dos componentes: una parte que representa el flujo subterráneo en medios saturados, considerando las variaciones del mismo; y otra parte que determina la evolución en el tiempo de la concentración del soluto.

Es esencial definir precisamente el sistema de flujo para simular el transporte y permitir el posicionamiento correcto de la pluma dentro del acuífero. Si la masa de agua se conserva en cada elemento, entonces la divergencia del campo de velocidad sobre cada elemento es cero.

Para obtener el campo de flujo subterráneo el sistema se resuelve bajo la hipótesis de incompresibilidad. Luego este campo de velocidad se incluye en las ecuaciones que gobiernan la concentración de contaminantes.

Para efectuar la simulación del transporte de contaminantes no reactivos (conservativos) se plantea la ecuación de advección-difusión que surge de la conservación de la masa del contaminante, la cual se resuelve implementando dos métodos numéricos: esquemas de diferencias finitas TVD -Total Variation Diminishing- (Harten, 1983) y el método de característica (Dahle H. K. et al, 1990).

Con respecto al primero, muchos autores en los años recientes han alcanzado alta resolución para obtener perfiles representando discontinuidades eliminando oscilaciones espúreas de la solución numérica y alcanzar la convergencia deseada. Un limitador TVD contiene como un "switch" que cambia el esquema cuando ciertas condiciones críticas se presenta, como por ej. fuertes gradientes de concentración, por lo tanto una posibilidad es mirar la razón de gradientes consecutivos y se toma al limitador de flujo como función de dicha razón.

El problema algebraico asociado al método TVD consiste en la resolución de un sistema de ecuaciones con una matriz rara no simétrica, lo que se realizó utilizando el Yale Sparse Matrix Package.

El segundo procedimiento numérico utilizado para la resolución de la ecuación de transporte es un método iterativo mixto de características. Esta técnica de "operator splitting" permite eliminar la falta de simetría debido a la presencia del término convectivo y elimina las oscilaciones numéricas espúreas.

El procedimiento iterativo es del tipo de descomposición de dominio y se implementa el algoritmo para el caso en que los subdominios coinciden con las celdas que particionan al dominio.

APLICACION Y RESULTADOS

Con la finalidad de comparar ambos métodos (TVD y característica) se realizó una aplicación a un sistema genérico, que consistió en un corte transversal de un acuífero homogéneo, isotrópico, no confinado, de poco espesor, con una fuente de contaminación puntual. Esta fuente proveyó un flujo constante de cloruro al nivel freático.

El campo de flujo fue planteado uniforme y constante de izquierda a derecha, con una componente horizontal de 0.01 m/día y una componente vertical de 0.001 m/día.

Los parámetros físicos fueron elegidos como para representar un acuífero arenoso. La litología de la formación geológica fue caracterizada por una porosidad de 0.10, una dispersividad longitudinal de 10 m y una transversal de 5 m; el coeficiente de difusión molecular se mantuvo constante a 5×10^{-5} m²/día (Frind and Hokkanen, 1987). El dominio modelado abarcó una extensión longitudinal de 15 m y un espesor de 10 m.

Utilizando el Método TVD (fig. 1) se empleó un tiempo de CPU de 0.8168 seg. y utilizando el Método de Característica (fig. 2) 2.2844 seg. para simular en ambos casos 10 días con un paso de tiempo de 1 día.

Las figuras 1 y 2 muestran los resultados con curvas de isoconcentración de cloruro en mg/l.

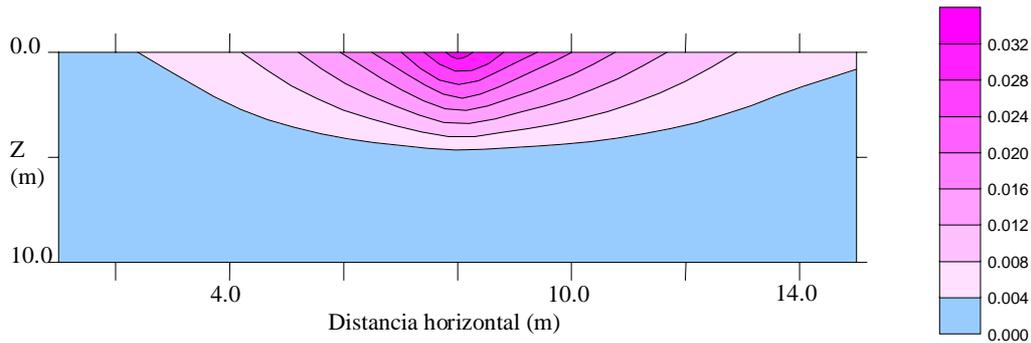


Figura 1. Migración de cloruro luego de 10 días (método TVD).

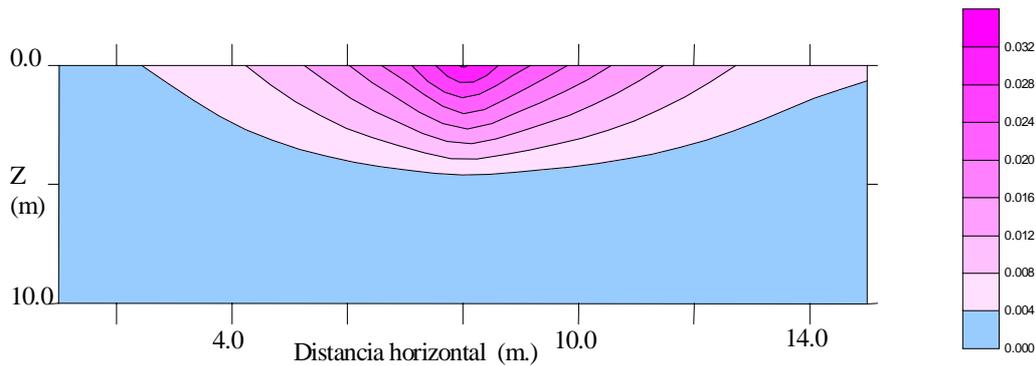


Figura 2. Migración de cloruro luego de 10 días (método de características).

CONCLUSIONES

Para realizar el modelado de flujos de agua subterránea y transporte de contaminantes se ha formulado y analizado el problema diferencial, y luego de elegir las técnicas numéricas a aplicar, se han desarrollado los simuladores numéricos respectivos, los cuales constituyen una *herramienta* valiosa para realizar predicciones de la evolución de plumas contaminantes, y describir su posición en el acuífero afectado.

Con respecto a los métodos numéricos, el algoritmo TVD y el de característica han proporcionado muy buenos resultados y ambos conducen a la misma solución numérica, conservando la masa en cada iteración en el tiempo. Tanto la aplicación del método TVD como del método iterativo mixto de características a este tipo de problemas resulta atractiva, ya que pocos autores los utilizan en sus problemas de transporte.

Las dificultades que generalmente se manifiestan en la aplicación de las técnicas desarrolladas en casos reales se refieren a que en algunas situaciones se carece de pozos de monitoreo que registren en forma continua las variaciones de la calidad química del agua. Por lo tanto, debe ser imprescindible analizar detenidamente la situación antes de plantear las hipótesis, con el objetivo de disminuir el margen de error de la simulación y evitar que ésta no represente adecuadamente lo que está ocurriendo.

REFERENCIAS

Dagan G., 1988, *Statistical theory of groundwater flow and transport: Pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale*, *Water Resour. Res.*, 24 (9), 1491-1500.

Dagan G., 1990, *Transport in heterogeneous formations: Spatial moments, ergodicity and effective dispersion*, *Water Resour. Res.*, 24 (9), 1281-1290.

Dagan G., 1991, *Dispersion of a passive solute in non-ergodic transport by steady velocity fields in heterogeneous formations*, *J. Fluid Mech*, 233, 197-210.

Dahle H. K., Espedal M. S., Ewing R. E. And Savareld O., 1990, *Characteristic Adaptive Subdomain Methods for Reservoir Flow Problems*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 6, 279-309.

Eisenstat S. C., Gursky M. C., Schultz M. H., and Sherman A. H., *Yale Sparse Matrix Package. I. The Symmetric Codes*, *Research Report # 112*.

Frind E. O. and Hokkanen G. E., 1987, *Simulation of the Borden Plume using the alternating Direction Galerkin Technique*, *Water Resour. Res.*, 23 (5), 918-930.

Gelhar, L. W. and C. L. Axness, 1983, *Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers*, *Water Resour. Res.*, 28 (7), 1955-1974.

Harten, 1983, *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, *J. Comput. Phys.* 49, 357-393.

Helgeson John O., Stullken Loyd E. and Rutledge A. T., 1994, *Assessment of Nonpoint-Source Contamination of the High Plains Aquifer in South-Central Kansas, 1987*, U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 2381-C.

Le Veque Randall J., 1992, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser Verlag.

Marsily Ghislain de, 1986, *Quantitative hydrogeology*, Academic Press Inc.

Neumann, S. P., and Y. K. Zhang, 1990, *A quasi-linear theory of non-Fickian and Fickian subsurface dispersion, 1, Theoretical analysis with application to isotropic media*, *Water Resour. Res.*, 26 (5), 887-902.

Neumann, S. P., C. L. Winter, and C. M. Newman, 1987, *Stochastic theory of field-scale Fickian dispersion in anisotropic porous media*, *Water Resour. Res.*, 23 (3), 453-466.

Sposito, G. And D. A. Barry, 1987, *On the model of solute transport in groundwater: Foundational aspects*, *Water Resour. Res.*, 23 (10), 1867-1875.