
**APLICACIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS DE FLUJO Y
TRANSPORTE DE CONTAMINANTES PARA EL DISEÑO DE SISTEMAS
DE REMEDIACIÓN**
**APPLICATION OF GROUNDWATER FLOW AND CONTAMINANT
TRANSPORT MATHEMATICAL MODELS TO THE DESIGN OF
REMEDICATION SYSTEMS**

NÚÑEZ MUÑOZ, Jose Luis

Geólogo. URS – Dames & Moore. Madrid, España
C/ Gral Ramírez de Madrid, 8 6TM, Madrid. jose_luis_nunez@urscorp.com

RESUMEN

La modelización matemática de flujo de agua subterránea y transporte de contaminantes puede representar una importante herramienta para el diseño de sistemas de remediación basados en la extracción y tratamiento de aguas subterráneas. El presente documento expone el concepto de modelización, haciendo un repaso en los tipos de modelos y en sus aplicaciones, así como en las diferentes etapas en su construcción. Se expone asimismo un caso práctico real de aplicación de modelos en el diseño de un sistema de extracción complejo en una planta petroquímica cuyas aguas se encuentran afectadas por la presencia de diferentes compuestos en varias zonas.

ABSTRACT

Groundwater flow and contaminant transport mathematical models represent an important tool for the design of remediation systems based on the pump-and-treat methods. This document explains basic concepts related to modeling, showing the different kinds of models and its practical applications. Likewise, a case study is exposed, where a mathematical digital model was used for the design of a complex groundwater pumping system in a multiple-contaminated petrochemical plant in Spain.

PALABRAS CLAVE

Modelización, simulación, flujo, transporte, sistema, contaminación, extracción, bombeo.

1. INTRODUCCIÓN

Un modelo científico es una herramienta que reproduce el funcionamiento de un sistema natural, y cuyo objetivo es el estudio y el análisis del mismo bajo diferentes condiciones. Permite asimismo obtener una visión de conjunto de los procesos naturales que en él pueden actuar, y analizar la incidencia de cada uno de los factores o variables presentes, pudiendo predecir su comportamiento y respuesta cuando es sometido a unas situaciones de estrés determinadas.

En definitiva, un modelo es una reproducción simulada de un sistema en el que se idealizan y se simplifican en mayor o menor medida las condiciones y los procesos más importantes que ocurren en el lugar de interés. Ello tiene una gran utilidad, ya que si se tiene una reproducción simplificada del sistema, se puede experimentar con él, prediciendo su comportamiento ante posibles cambios o actuaciones que sobre él se realicen o produzcan.

2. TIPOS DE MODELOS EN HIDROGEOLOGÍA Y CONTAMINACIÓN DE AGUAS SUBTERRÁNEAS

Desde el punto de vista de la aplicación de la modelización para sistemas hidrogeológicos, existen diferentes tipos de modelos, así como diferentes soportes sobre los que simular los procesos naturales objetos de estudio:

- Modelos físicos: reproducción a escala de un fenómeno natural. (ej. modelos de tanques de arena y agua para la simulación de corrientes de flujo). El problema que presentan es que el comportamiento de los materiales utilizados, así como su escala, no reflejan en muchos casos el comportamiento natural real.
- Modelos analógicos: se valen de leyes físicas parecidas a las que rigen el comportamiento del sistema para caracterizar y/o interpretar el fenómeno natural (ej. modelos de membrana elástica, en la que la forma de una membrana elástica tensada se deforma exactamente igual que un cono de bombeo de agua, por lo que su ecuación coincide con la ecuación de dicho cono de bombeo). Se basan en fórmulas simples, no admiten heterogeneidades y ofrecen una solución exacta en el punto de cálculo. Actualmente no se utilizan.
- Modelos digitalizados o numéricos: Requieren una discretización espacial y temporal y soportan heterogeneidades. Resuelven la ecuación diferencial de la continuidad mediante matrices en cada una de las unidades (celdas) en la que se ha discretizado el sistema a simular. Son los más utilizados en hidrogeología e investigación y gestión de acuíferos contaminados. Pueden ser utilizados para simular diferentes procesos:
 - a) Modelos de flujo: son los modelos hidrogeológicos clásicos, que informan acerca de la distribución del potencial hidráulico en el espacio y en el tiempo para cada una de las celdas definidas en el modelo (ej. Cálculo de radios de influencia de los conos de bombeo de un campo de extracción)

- b) Modelos de transporte de masa: se basan en el sistema de flujo definido anteriormente, y permiten calcular la concentración y establecer la evolución de una determinada especie química en el espacio y en el tiempo (ej. evolución de una pluma de contaminante provocada por la rotura de un tanque subterráneo).
- c) Modelos de transporte de calor: a partir del modelo de flujo establecido, permite obtener la evolución de las temperaturas (intercambio de calor) de cada una de las unidades discretizadas del sistema en el espacio y en el tiempo. Su aplicación en hidrogeología es más limitada, no así en el campo de la geotermia o el aprovechamiento del gradiente geotérmico terrestre y de sistemas hidrotermales para el aprovechamiento energético.

En los modelos digitales o numéricos, existen dos aproximaciones o métodos básicos mediante los cuales puede resolverse la ecuación de la continuidad:

- Modelos de resolución mediante diferencias finitas.
- Modelos de resolución mediante elementos finitos:

Método	Ventajas	Inconvenientes
Diferencias Finitas	<ul style="list-style-type: none"> • Conservan la masa • Intuitivo, simple, conocido y comprobado. Fácil de programar • Más programas disponibles en el mercado 	<ul style="list-style-type: none"> • Red rectangular necesaria para la discretización. • Dificil adaptación a sistemas geológicos muy complejos con capas muy deformadas o irregulares. • Pozos ocupan toda la celda.
Elementos Finitos	<ul style="list-style-type: none"> • Discretización más versátil/eficiente en zonas de interés solamente. • Pozos pueden ser representados como nodos discretos. • Buena adaptación a geología compleja. • Tensor de K totalmente representado 	<ul style="list-style-type: none"> • No intuitivo, teoría más compleja. • Conserva masa sólo globalmente. Pueden ocurrir errores locales en el balance de aguas.

3. ETAPAS PARA LA CONSTRUCCIÓN DE UN MODELO: VISIÓN GENERAL

Para la construcción de un modelo matemático de flujo y transporte de contaminantes en agua subterránea que pueda ser aplicado con éxito al diseño y ejecución de una remediación del acuífero han de completarse una serie de etapas. En primer lugar hay que definir los objetivos a alcanzar, que serán en última instancia la simulación de los flujos de agua subterránea y/o los procesos de transporte de contaminantes en las mismas, para más tarde someter al sistema natural simulado a un estrés determinado (bombeos, inyecciones, barreras hidráulicas o físicas, etc) y predecir el resultado, obteniendo mediante la consideración de las diferentes opciones disponibles una solución óptima desde el punto de vista de la efectividad de la descontaminación y de la viabilidad económica de la misma.

Como un segundo paso está la obtención de datos para la construcción más fiable del modelo. De tal manera, debe obtenerse una visión tridimensional de la zona de estudio, caracterizando espacio-temporalmente y en la medida de lo posible, los parámetros geológicos, hidrogeológicos e hidrodinámicos del subsuelo: forma, distribución y extensión de las unidades geo-hidrogeológicas y propiedades de las mismas, tales como la permeabilidad, transmisividad, coeficientes de almacenamiento, porosidades efectivas, elevaciones del agua subterránea, direcciones de flujo subterránea, dispersividad, etc. así como las características físico-químicas de las aguas subterráneas del emplazamiento como la distribución espacio-temporal de los contaminantes implicados y sus propiedades (tasas de degradación, coeficientes de adsorción, fracción de materia orgánica, etc). Se deben obtener, asimismo, datos referentes a los factores extrínsecos al sistema, tales como precipitación e infiltración, presencia y características de las masas superficiales de agua (ríos, lagos, recargas naturales y/o artificiales), tasas de evapotranspiración, etc.

Hay que destacar que en la mayoría de los casos la etapa de adquisición de datos puede consumir la mayor parte de los recursos disponibles, tanto desde el punto de vista temporal como desde el económico. La adquisición de dichos datos se realiza normalmente durante la fase de investigación y caracterización del acuífero contaminado, y en la que se procederá a la realización de una campaña de perforación e instalación de piezómetros de control, toma de muestras de suelo y agua subterránea, realización de ensayos hidrogeológicos y de bombeo, ensayos con trazadores, análisis químicos detallados de suelos y aguas, etc. Es muy importante tener en cuenta que un modelo será tanto más perfecto cuanto mejores y más numerosos sean los datos de partida disponibles.

Una vez se ha caracterizado el sistema a modelizar se procede a la construcción de un modelo conceptual que simplifique las características del mismo, para así pasar del modelo conceptual a un modelo matemático, en el que todos los parámetros se encuentren discretizados mediante un mallado tridimensional que estructure el sistema en celdas, cada una de ellas con sus características definidas (potencial hidráulico, permeabilidad, concentración, etc.). Hay que definir unas condiciones de contorno que delimiten el sistema (presencia de bordes de recarga constante como ríos o lagos, bordes impermeables, etc), tras lo cual se procede a la ejecutar, calibrar (cualitativa y cuantitativamente) y validar el modelo mediante iteraciones y modificación de variables para finalmente obtener un resultado acorde con los datos de campo actuales e históricos disponibles.

Una vez construido y validado el modelo se pueden simular los efectos de diferentes situaciones de estrés, tales como el sometimiento del acuífero a extracciones de agua (bombeos) mediante campos de pozos, implantación de barreras hidráulicas o físicas, drenajes, liberación de contaminantes y visualización de su evolución espacio-temporal, y un largo etcétera.

4. CASO DE ESTUDIO: APLICACIÓN DE MODELOS MATEMÁTICOS PARA EL DISEÑO DE UNA REMEDIACIÓN EN UNA PLANTA PETROQUÍMICA AFECTADA POR LA PRESENCIA EN AGUA SUBTERRÁNEA DE ARSÉNICO, HIDROCARBUROS DEL PETRÓLEO E HIDROCARBUROS POLIAROMÁTICOS

4.1 Introducción

El emplazamiento objeto de estudio, y en este caso de modelización, es una planta petroquímica (destilería de alquitrán) situada en el norte de España, entre cuyas instalaciones, además de varias torres de destilación, se encontraba una línea de producción de arseniato de plomo. En emplazamiento se encuentra afectado por la presencia de arsénico en muy altas concentraciones (hasta 30.000 $\mu\text{g/l}$) en un sector determinado del mismo (sector PC-1), así como por hidrocarburos del petróleo (TPH) e hidrocarburos poliaromáticos (PAH) en otros dos sectores (sectores PC-3 y PC-7, con concentraciones de 3000 y 4800 $\mu\text{g/l}$ de TPH y PAH respectivamente). El emplazamiento se sitúa sobre un acuífero aluvial localizado en el margen cóncavo de un meandro de un gran río, que se apoya lateralmente y sobre un sustrato rocoso de naturaleza calcárea. El subsuelo del emplazamiento está formado básicamente por un relleno superficial de naturaleza heterogénea y de espesor variable que se encuentra sobre materiales aluviales de granulometría gruesa (gravas y arenas) y que en algunas zonas del emplazamiento presenta hacia techo una evolución hacia materiales de naturaleza arcillosa.

Se dispone de una red de 9 piezómetros de control en la planta y de otros 5 en los exteriores de la misma, resultados analíticos procedente de varias campañas de muestreo superficial y profundo de suelos y aguas subterráneas repartidas en un año, que incluyen el muestreo de las aguas del río (tanto aguas arriba de la fábrica como aguas abajo) y de dos manantiales cercanos, datos topográficos, tres ensayos de bombeo en otras tantas zonas, dos análisis de riesgos cuantitativos, un inventario exhaustivo de receptores sensibles, datos topográficos de los sondeos y del río, así como otros datos de naturaleza variada.

Para las tres zonas contaminadas, y dadas las características del emplazamiento, se propone la implantación de otros tres sistemas de extracción de agua subterránea mediante campos de bombeo complejos en cada una de ellas para su posterior tratamiento en superficie. Las aguas afectadas por arsénico del sector PC-1 son tratadas mediante una planta de tratamiento en superficie por precipitación en sales a través de sistemas de oxidación – neutralización – floculación, mientras que las aguas afectadas por TPH y PAH de los sectores PC-3 y PC-7 son tratadas asimismo en la planta de tratamiento de aguas residuales e hidrocarbурadas de la propia planta.

Con los datos procedentes de la interpretación de los ensayos de bombeo (transmisividad y permeabilidad), así como con la información geológica extraída de los sondeos realizados en el emplazamiento se ha procedido a la construcción de un modelo matemático en soporte informático de las condiciones hidrogeológicas del subsuelo de la zona de estudio, que nos permite simular de una manera aproximada las diversas posibilidades de bombeos

que permitan establecer zonas de influencia de los bombeos lo suficientemente amplias como para abarcar las diferentes superficies objeto de descontaminación, esto es, que los radios compuestos (pertenecientes a varios pozos) de los campos de pozos tuvieran la suficiente amplitud como para que cualquier partícula de agua que entrase en dichas áreas modificase su trayectoria para terminar en alguno de los pozos de bombeo, pasando así al sistema de tratamiento.

El diseño de estos campos de pozos debía ser tal que, por un lado, se minimizara el número de pozos a instalar, que los caudales de extracción fueran lo más reducidos posible y que ninguno de los pozos llegase a agotarse en ningún momento debido a un sobrebombeo.

Una vez construido el modelo se procede a la simulación sistemática de las diferentes posibilidades de bombeo en cada una de las zonas, modificando el número de pozos, situación de los mismos, caudales de extracción, etc, valorando los resultados y considerando sus ventajas e inconvenientes, hasta obtener diseño óptimo del sistema de bombeo.

Hay que tener en cuenta que los objetivos de la modelización no son la simulación exacta de todos los procesos hidrogeológicos y relativos al transporte de contaminantes en la totalidad del emplazamiento, si no tan sólo el comportamiento del sistema ante extracciones de agua en las tres zonas afectadas por la presencia de contaminantes en agua, con el objeto final de obtener unos parámetros muy concretos relativos al diseño de la remediación, básicamente el número óptimo de pozos de extracción, situación de los mismos, caudales de bombeo y radios de influencia compuestos de los mismos. Es por ello que los límites del modelo se han ampliado lo suficiente como para que los posibles efectos de borde del mismo no afecten los procesos a simular (bombeos).

4.2 Sistema informático de modelización

Se ha utilizado un modelo en diferencias finitas que permite resolver de forma numérica la ecuación de la difusividad obtenida a partir de la ley de Darcy y la ecuación de la continuidad. Se trata de una ecuación diferencial elíptica cuya solución por métodos numéricos se puede obtener mediante el método de las diferencias finitas (MDF). El programa informático utilizado ha sido el Visual Modflow 2.8.2.

4.3 Mallado

Al no tratarse de la modelización de un sistema acuífero completo, sino de una porción limitada, se han tenido que observar algunos criterios específicos. Para la realización del modelo numérico se procede en primer lugar a la discretización del medio en un mallado regular general cúbico, con tamaño 10 x 10 m, con un refinado en las zonas de interés de 2,5 x 2,5 metros que son las zonas donde se ha procedido a la modelización de los sistemas de extracción (sectores PC-1, PC-3 y PC-7). Las dimensiones del modelo son de 600 x 350 metros. Se ha distribuido el modelo en 4 capas de superficie irregular, en

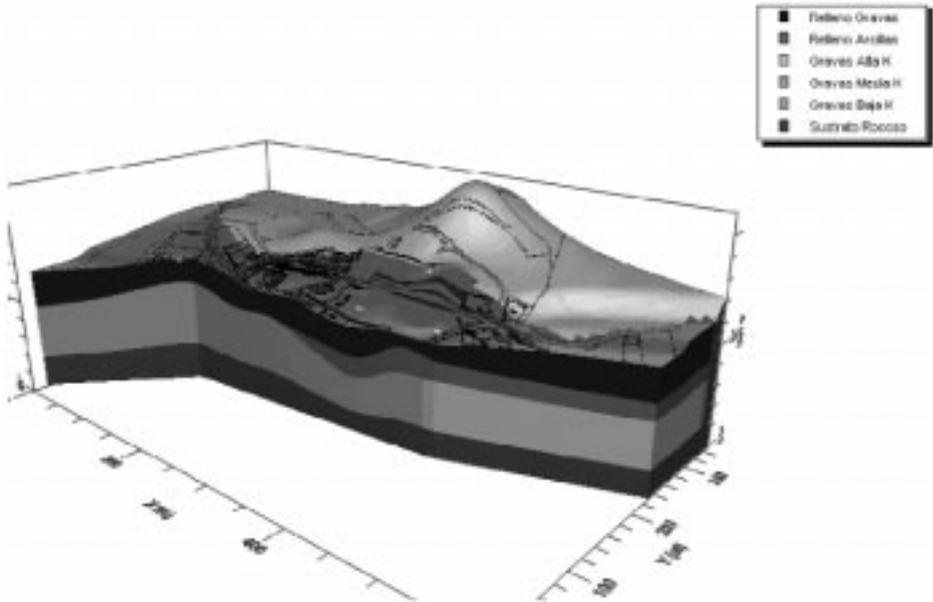


Figura 1. Bloque-Diagrama del emplazamiento con las unidades geohidrogeológicas diferenciadas.

función de las disposición geo-métrica tridi-mensional de las diferentes capas geológicas presentes en el subsuelo del emplazamiento y que son las siguientes (de arriba abajo): Capa 1: Relleno antrópico heterogéneo y grueso (gravas arenosas); Capa 2: Relleno antrópico heterogéneo y arcilloso; Capa 3: Sedimentos aluviales naturales gruesos (gravas fluviales); Capa 4: Sustrato rocoso: calizas.

Como base física del modelo se ha tomado la capa 4, considerada en este caso y como simplificación impermeable. Asimismo se ha considerado los afloramientos calcáreos situados al sur y suroeste del emplazamiento impermeables.

4.4 Condiciones de contorno

Para la construcción del modelo se han tenido que asumir una serie de simplificaciones. Así, se ha impuesto un nivel piezométrico constante (valor 0 m.) en el borde suroriental del modelo, mientras que en el borde noroccidental se le ha asignado un nivel constante de -6 m. Por otro lado, se ha tenido en cuenta la presencia del río, así como su geometría, su importante influencia en la recarga del acuífero, asignándole las correspondientes cotas topográficas en varios de sus puntos. Se ha estimado un conductancia (permeabilidad vertical de recarga) para el lecho del río de 100 m/día. La base del acuífero, así como el borde suroccidental lo constituyen las calizas carboníferas, consideradas en el modelo como impermeables. La recarga de agua desde la masa calcárea suroccidental al acuífero se ha simulado con la presencia de un borde de recarga adosado a su zona de contacto

con el mismo, que decrece paulatinamente de sureste a noroeste desde los 0 a los -6 metros.

A cada una de las capas geológicas presentes bajo el emplazamiento se le ha asignado unos valores de porosidad, permeabilidad y coeficiente de almacenamiento, de acuerdo con los valores más probables y según la bibliografía disponible. Para atribuir la permeabilidad a la capa de gravas fluviales (capa 3) se ha procedido a una zonación de la misma en función de los ensayos de bombeo disponibles, diferenciando 3 zonas básicas, que de sur a norte presentan un aumento de la permeabilidad. Se han tenido en cuenta los valores de los ensayos de bombeo llevados a cabo con en la zona noroccidental del emplazamiento

En la Figura 1 se muestra la distribución espacial de las capas geológicas en el subsuelo del emplazamiento. Puede apreciarse el cambio lateral de facies observado en el comportamiento hidrogeológico diferencial en las gravas fluviales de base.

4.5 Resultados de la modelización de los sistemas de extracción

Se han localizado una serie de posibles puntos de extracción, y se han aplicado distintos caudales de bombeo, observando las depresiones obtenidas en cada una de las zonas a tratar. Mediante la valoración iterativa de diferentes configuraciones de los sistemas de extracción se ha obtenido el número de pozos y los caudales de extracción óptimos, para un régimen permanente.

Para el sector PC-1 el sistema óptimo de extracción consistiría en un campo de pozos de bombeo compuesto por 6 pozos de extracción según la disposición de la Figura 3, tres de los cuales (PC-1A, PC-1B y PC-1C), situados aguas abajo, trabajarían ininterrumpidamente

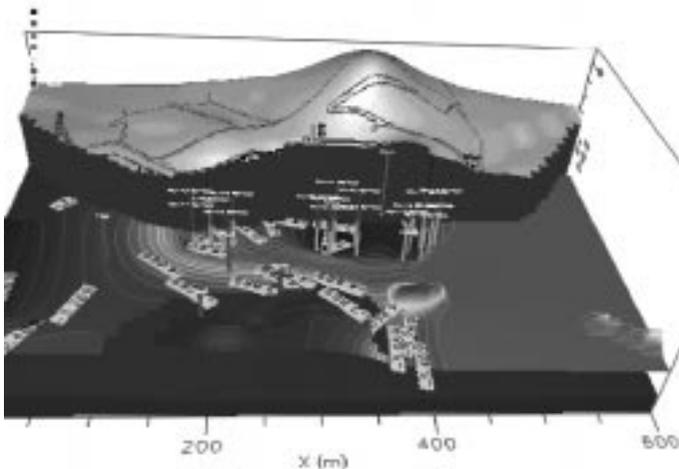


Figura 2. Superficie piezométrica del emplazamiento con los campos de bombeo activos. Puede apreciarse el efecto de recarga del río en el mismo, así como su depresión global en las zonas de extracción.

a un caudal de 50 m³/día (0,6 l/seg), mientras que los tres restantes (PC-1D, PC-1E y PC 1F), localizados aguas arriba, bombearían a un caudal de 25 m³/día (0,3 l/seg).

Para el sector PC-3 el sistema óptimo de extracción consiste en un campo de pozos de bombeo compuesto por 5 pozos de extracción según la figura 4, dos de los cuales (PC-3A y PC-3B) trabajarían a un caudal de bombeo de 15 m³/día (0,17 l/seg), mientras que los tres restantes (PC-3C, PC-3D y PC-3E) lo harían a 10 m³/día (0,12 l/seg).

En el sector PC-7 el sistema óptimo de extracción consiste en un campo de 4 pozos de bombeo de acuerdo con la figura 5, y en el que los cuatro pozos (PC-7A, PC-7B, PC-7C y PC-7D) estarían bombeando agua constantemente a un caudal de 15 m³/día (0,17 l/seg).

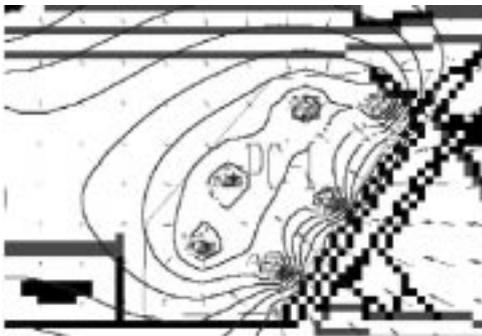


Fig. 3

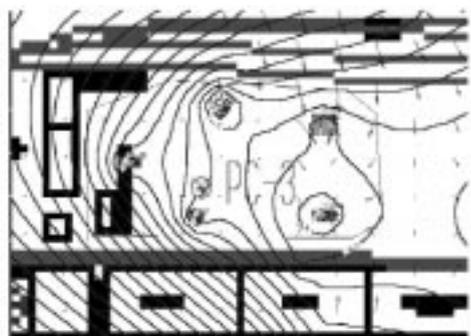


Fig. 4

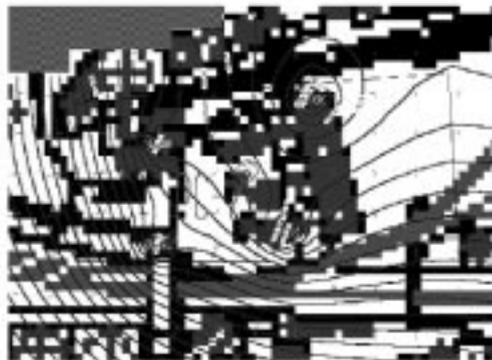


Fig. 5

Figuras 3, 4 y 5. Superficie piezométrica de los sectores PC-1, PC-3 y PC-7 respectivamente, en los que se parecía las zonas de influencia de los bombes. Se han representado los vectores velocidad

Es preciso comentar que el hecho de que el acuífero tenga unos recursos hídricos limitados, según pudo observarse en los ensayos de bombeo (efectos de vaciado), es por ello que los caudales de bombeo aquí obtenidos son caudales máximos, pudiendo obtenerse caudales de operación continua menores. En cualquier caso, el sistema de extracción debe tener en cuenta estos caudales.

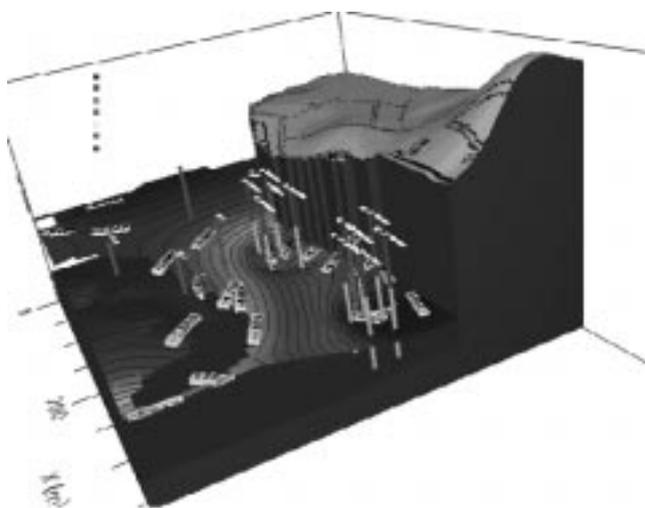


Figura 6. Corte transversal del modelo en el que pueden apreciarse los campos de bombeo en dos de las zonas afectadas (PC-3 y PC-7).

CONCLUSIONES

La modelización hidrogeológica aplicada a los sistemas de remediación de aguas subterráneas mediante extracciones por bombeo es una poderosa herramienta que permite la simulación iterativa de las diferentes posibilidades de extracciones de agua para su posterior tratamiento en superficie. Permite establecer el número mínimo de pozos, su localización óptima y los caudales más adecuados para extraer los volúmenes de agua deseados y abarcar las zonas del acuífero impactadas por sustancias contaminantes. Permiten asimismo obtener una visión temporal de la extracción, así como evaluar las posibles variaciones a las que puede estar sometido el sistema durante su funcionamiento.

Mientras que la etapa de adquisición de datos puede consumir gran parte de los recursos del proyecto, una vez que el modelo se encuentra construido y calibrado se muestra como un medio muy rápido y fiable para obtener la solución más económica a la implantación de un sistema de extracción complejo.

BIBLIOGRAFÍA

- Waterloo Hydrogeologic, Inc. Workshop of groundwater flow and transport mathematical models. Fundación Gómez-Pardo. Noviembre 2000. Madrid.
- M.G. McDonald, A.W.Harbaugh. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Techniques of water-resources Investigations of the U.S.G.S. U.S. Department of Defense. 1998.
- M.G. McDonald, A.W.Harbaugh. A method of converting no-flow cells to variable-heads cells for the U.S.G.S. Modular Finite-Differences groundwater flow model. U.S.G.S Department of Defense. 1998.