

MODELOS DE FLUJO Y TRANSPORTE EN LA GEOSFERA: EL CÓDIGO TRANSIN

Medina A., Alcolea A., Carrera J.
E.T.S.I de Caminos, Canales y Puertos (Universidad Politécnica de Cataluña)

Resumen

El código TRANSIN ha sido diseñado por el Grupo de Hidrogeología de la ETSICCPB para simular el flujo de agua subterránea y el transporte de solutos bajo un amplio espectro de posibilidades. Su alcance se demuestra en los numerosos estudios de distinto tipo a los que se ha aplicado, entre los que destacan los enfocados a almacenamiento de residuos (Proyectos CABRIL y PA), a transporte en medios muy heterogeneos (Proyectos GAM y ÄSPÖ), a planificación de actuaciones (Proyecto de la cobertura de la FUA) y otros muchos. De este modo, además, con el uso continuado del código se consigue una gran fiabilidad.

El objetivo de este trabajo es mostrar las capacidades del código. Para ello, se presentan en primer lugar sus generalidades, describiendo posteriormente las ecuaciones de los dos tipos de problemas que es capaz de resolver: el problema directo o simulación y el problema inverso o calibración, resolviéndose este último de forma automática. Finalmente se presentan los resultados obtenidos en un ejemplo sintético homogéneo y en un caso real heterogéneo, la fractura del Proyecto GAM (GAs Migration).

Introducción

Si bien el uso de modelos matemáticos es una técnica comúnmente extendida para estudiar los procesos de flujo de agua subterránea y transporte de solutos, existen factores importantes que limitan la validez de los resultados. Uno de ellos es el desconocimiento del medio, dado que generalmente, sólo se cuenta con información de una pequeña parte del dominio a modelar, que no suele ser re-

presentativa del total. Si además se trata de un medio muy heterogéneo, esta limitación es aún más importante.

El primer paso en cualquier proceso de modelación (Galarza, 1993; Medina, 1993) requiere la conceptualización del medio, incluyendo los procesos relevantes y representándolos mediante una estructura del modelo adecuada. El resultado de esta etapa es la obtención de una visión global del comportamiento del sistema y su traducción a una serie de expresiones matemáticas. No obstante, de esta etapa suele surgir más de un modelo conceptual del medio por lo que posiblemente, el usuario necesitará planificar experimentos adicionales, que ayudarán a completar la información disponible.

El segundo paso consiste en discretizar el medio, lo que hará que dichas expresiones se presenten de una forma resoluble. De este modo, el medio quedará expresado en términos de una serie finita de parámetros que gobernarán el comportamiento del modelo (conductividades hidráulicas, porosidades, etc.).

El último paso consiste en la calibración de estos parámetros y la evaluación de sus incertidumbres. Esto se realiza por comparación entre las medidas disponibles y los resultados del modelo. TRANSIN realiza este proceso de forma automática, lo que supone una gran ventaja, dado que la realización manual de la calibración puede resultar tan anárquica como frustrante. La calibración automática libera al usuario de la manipulación de los valores de los parámetros (y de los errores que esto conlleva), así como de la subjetividad en la selección de los mejores ajustes, obteniéndose además información adicional acerca de la matriz de covarianzas, sensibilidad a los parámetros del modelo, etc. El código TRANSIN permite realizar tanto simulaciones

como calibraciones, obteniendo los resultados antes comentados, habiéndose aplicado a diversos casos reales como ya se ha dicho antes.

Generalidades del código

El conjunto de posibilidades que cubre el código se resume a continuación:

- ❑ El régimen de las ecuaciones puede ser estacionario y/o transitorio.
- ❑ El medio puede estar saturado y/o no saturado (o mezcla de ambos en espacio y tiempo).
- ❑ El código permite contemplar problemas en una, dos, tres dimensiones o mezclas de ellas. Esto último resulta muy útil en casos de modelación de fracturas embebidas en un medio tridimensional o para representar los sondeos como elementos unidimensionales.
- ❑ Pueden considerarse las hipótesis de acuífero confinado, semiconfinado o no confinado.
- ❑ Las condiciones de contorno pueden variar en el espacio y/o en el tiempo (incluso ser función de la/s variable/s de estado en algún caso).
- ❑ Es posible considerar condiciones iniciales (caso de tratarse de un problema en régimen transitorio) arbitrarias dadas o solución en régimen estacionario.
- ❑ En general, cualquier parámetro puede depender del espacio, del tiempo y de la variable de estado (nivel piezométrico, concentración, etc.) a través de una función no lineal. Dicha opción se encuentra operativa para la conductividad hidráulica, el coeficiente de almacenamiento y el coeficiente de goteo.
- ❑ Los datos necesarios para la calibración son medidas puntuales en el espacio y en el tiempo (niveles, presiones y concentraciones), si bien se está trabajando en otros tipos de medidas como, por ejemplo, medidas integradas en el espacio y/o en el tiempo y dependientes de la variable (contenidos volumétricos de agua, flujo másico de radionucleido, etc.). Esto puede resultar especialmente útil para la estimación de caudales de recarga río-acuífero a lo largo de un cauce, entre otros.
- ❑ Es posible resolver varios problemas de forma simultánea (varios ensayos hidráulicos o de trazadores considerados simultáneamente, cadenas de desintegración radioactiva, etc.) o

sucesiva (varios ensayos hidráulicos o de trazadores, por ejemplo). Además, se puede simular un régimen transitorio a partir de varios estacionarios, lo que conlleva una gran reducción del coste computacional asociado a las simulaciones y/o calibraciones de flujo de agua y transporte de radionucleidos.

Al nivel de resultados, el código ofrece un amplio espectro de posibilidades, entre las que destacan:

- ❑ Evolución temporal de la/s variables de estado, en determinados puntos (puntos de observación).
- ❑ Distribución espacial de la/s variables de estado, en determinados tiempos (tiempos de observación).
- ❑ Balance de masas y análisis de residuos del mismo.
- ❑ Valor de los parámetros estimados y su evolución a lo largo del proceso de calibración.
- ❑ Evolución de los parámetros del algoritmo de optimización que controla el problema inverso, lo que permite evaluar posibles estrategias de calibración, caso de no obtenerse un resultado aceptable.
- ❑ Análisis estadístico de las diferencias entre valores calculados por el código y valores medidos en los puntos de observación.
- ❑ La matriz de covarianza de los parámetros estimados, lo que ofrece una idea sobre la incertidumbre de los parámetros estimados. Asimismo, se lleva a cabo un análisis de los autovalores de dicha matriz.
- ❑ Si el problema a resolver es no lineal, el código emplea el método de Newton-Raphson completo, presentando la evolución de este proceso.

A partir de estos resultados, pueden obtenerse de forma sencilla, otros que resulten de interés al usuario.

Formulación del problema directo

El problema directo consiste en la resolución de una ecuación conocidos sus parámetros, obteniendo la evolución espacio-temporal de la variable de estado, que representa la respuesta del sistema.

El problema directo de flujo

El flujo de agua está gobernado por la ecuación de tipo difusión (Bear, 1972). En el caso tridimensional, se expresa como:

$$\nabla \cdot (K\nabla h) + q_r = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{en } \Omega \quad [1]$$

sujeto a la condición inicial

$$h = h_0; \quad t = t_0 \quad [2]$$

y la condición de contorno

$$-K\nabla h n = \alpha(H - h) + Q \quad \text{en } \Gamma \quad [3]$$

donde Ω es el dominio espacial del acuífero, Γ su contorno, ∇ el operador nabla, K el tensor de conductividad hidráulica, h el nivel piezométrico, q_r un término que engloba las fuentes y sumideros, S_s el almacenamiento específico, t el tiempo, n un vector unitario normal a Γ hacia el exterior de Ω , H y Q el nivel piezométrico y el flujo prescrito respectivamente y α el coeficiente de goteo, parámetro que controla el tipo de condición de contorno: representa flujo prescrito cuando $\alpha = 0$ (condición de contorno de Neuman), nivel piezométrico prescrito cuando $\alpha \rightarrow \infty$ (Dirichlet) o una condición mixta en caso contrario (Cauchy).

En caso de resolver varios problemas de flujo (simultáneos o sucesivos), las ecuaciones [1]-[3] se repiten para cada problema, pudiendo tener distintos valores de los parámetros y distintas condiciones de contorno. Esto resulta particularmente útil cuando se simulan varios ensayos hidráulicos a la vez, pudiendo tener en cuenta distintos valores de caudales de bombeo realizándose estos en puntos distintos, por ejemplo.

El problema directo de transporte

El transporte de radionucleidos, incluyendo los procesos de difusión, dispersión, advección y retardo del radionucleido, está gobernado por la ecuación (Bear, 1972):

$$\phi R_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c_i) - q\nabla c_i - \lambda_i \phi R_i c_i + \lambda_{i-1} \phi R_{i-1} c_{i-1} + q_r(c' - c_i) \quad \text{en } \Omega \quad [4]$$

sujeto a la condición inicial

$$c_i = c_0 \quad t = t_0 \quad [5]$$

y la condición de contorno generalizada

$$-D\nabla c_i n = \beta(c_e - c_i) + M \quad \text{en } \Gamma \quad [6]$$

donde Ω es el dominio espacial del acuífero, Γ su contorno y ∇ el operador nabla. D el tensor de dispersión (incluye el término correspondiente a la difusión molecular), c_i la concentración del radionucleido "i" en el acuífero, c_{i-1} la concentración del radionucleido "i-1", que tiene como producto de desintegración el radionucleido "i". q denota el flujo de Darcy, q_r un término de recarga de agua con una concentración determinada c' , M el flujo másico, t el tiempo, n un vector unitario normal a Γ y dirigido hacia el exterior de Ω . c_e representa un término de concentración prescrita y β es un parámetro que controla el tipo de condición de contorno: flujo másico prescrito cuando $\beta = 0$, concentración prescrita cuando $\beta \rightarrow \infty$ o una condición mixta en caso contrario.

Al igual que en el flujo, caso de resolverse varios problemas de transporte, pueden variarse los valores de todos los parámetros. Asimismo, la generalidad en la programación del código permite considerar una fuente natural (distinta de la de desintegración) para cada uno de los radionucleidos considerados.

La ecuación [4] está expresada en su forma más general, incluyendo el caso de una cadena de desintegración. Si en el modelo conceptual no se considera este proceso, el término del radionucleido "i-1" no aparece en dicha ecuación.

Formulación del problema inverso

El problema inverso consiste en obtener un estimador de los parámetros de la ecuación que representa el problema físico a modelar, utilizando información previa sobre los mismos (obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de campo o de laboratorio, o bien a partir de la experiencia del usuario), su estructura de correlación, así como información acerca de la variable de estado.

Existen distintas formulaciones del problema inverso (Carrera y Neuman, 1986 a, Cooley, 1985, etc.). En lo que sigue, se adopta la formulación basada en el método de la Máxima Verosimilitud, incorporando información previa (Carrera y Neuman, 1986 b,c).

La verosimilitud $L(p|z^*)$ de una hipótesis sobre los valores de los parámetros p , dados los datos $z^* = (h^*, c^*, p^*)$ y una estructura del modelo prefijada, se define como proporcional a $f(z^*|p)$, función de

densidad de probabilidad de haber observado z^* , dados los parámetros p , de acuerdo con algún modelo estadístico.

Así, la estimación por máxima verosimilitud consiste en hallar p de forma que el valor de $L(p|z^*)$ sea máximo.

Para completar los datos, es necesario especificar el vector z^* y la estructura de correlación o de error de las componentes de dicho vector. En adelante, se supondrá que la diferencia entre valores calculados y medidos sigue una distribución multigaussiana con media nula, con lo que dicha estructura queda completamente definida mediante la matriz de covarianza. La hipótesis de multinormalidad viene avalada por el teorema central del límite, el cual demuestra que un gran número de pequeños errores en la medida de las componentes de z^* se puede aproximar por una distribución multigaussiana de media nula. Por otra parte, la hipótesis de una distribución de probabilidad conocida permite el cálculo de intervalos de confianza de la estimación de parámetros y la realización de tests de hipótesis.

Es conveniente (sin pérdida de generalidad), suponer que la matriz de covarianza puede expresarse como (Neuman y Yakowitz, 1979):

$$\begin{aligned} C_h &= \sigma_h^2 V_h \\ C_c &= \sigma_c^2 V_c \\ C_i &= \sigma_i^2 V_i \end{aligned} \quad [7]$$

donde C_h , C_c y C_i son las matrices de covarianza de niveles, concentraciones y de la información previa asociada al i -ésimo tipo de parámetro, respectivamente. V_h , V_c y V_i son matrices conocidas y definidas positivas y σ_h , σ_c , y σ_i son escalares desconocidos. Las matrices V_h , V_c y V_i pueden obtenerse a partir de algún modelo geoestadístico, por ejemplo, mediante kriging.

Con las hipótesis anteriores y suponiendo multinormalidad, la verosimilitud de p dado z^* , se expresa como:

$$L(p|z^*) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} |C|^{-\frac{N}{2}} \exp[-(z - z^*)' C^{-1} (z - z^*)] \quad [8]$$

siendo N el número total de datos y z un vector que contiene los valores calculados (niveles, concentraciones, etc.). En general, las medidas de niveles y concentraciones y la información previa de los parámetros no están correlacionadas entre si. Así, sin pérdida de generalidad, puede suponerse que C es de la forma:

$$C = \begin{pmatrix} C_h & 0 & 0 \\ 0 & C_c & 0 \\ 0 & 0 & C_p \end{pmatrix} \quad [9]$$

En la expresión anterior, C_h y C_c representan las matrices de covarianza de los errores en las medidas de niveles y concentraciones, así como C_p de las referentes a los parámetros. Esta última puede considerarse diagonal por bloques, suponiendo que las estimaciones previas de los distintos parámetros no están correlacionadas.

En lugar de maximizar L , es más sencillo minimizar S , definida como:

$$S = -2 \ln(L(p|z^*)) \quad [10]$$

Sustituyendo [7], [8] y [9] en [10] y asumiendo conocida la estructura estadística del modelo, se obtiene:

$$S = S_h + \lambda_c S_c + \sum_i \lambda_i S_i + \beta \quad [11]$$

$$S_h = (h - h^*)' V_h^{-1} (h - h^*)$$

$$S_c = (c - c^*)' V_c^{-1} (c - c^*) \quad [12]$$

$$S_i = (p_i - p_i^*)' V_i^{-1} (p_i - p_i^*)$$

donde S_h y S_c son las componentes de la función objetivo referente a niveles y concentraciones, S_i la correspondiente al parámetro i -ésimo, β un término constante (dependiente de los parámetros estadísticos del modelo) y los escalares λ_c y λ_i y se definen como:

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \frac{\sigma_h^2}{\sigma_i^2} \\ \lambda_c &= \frac{\sigma_h^2}{\sigma_c^2} \end{aligned} \quad [13]$$

Así pues, la resolución del problema inverso en su formulación según el método de Máxima Verosimilitud, se transforma en la minimización de una función dependiente de los valores de los parámetros y niveles y concentraciones calculados y medidos y de la estructura de correlación entre los mismos. No obstante, pueden añadirse a la función objetivo otros términos, referentes a contenidos volumétricos de agua, caudales, etc.

Para la minimización del funcional S pueden emplearse distintos métodos de optimización. El algoritmo empleado en TRANSIN es el propuesto por Marquardt (1963), si bien se han realizado diversas pruebas con otros tipos de técnicas, intentando sos-

layar las dificultades de convergencia que el algoritmo original presenta en algunos problemas (Alcolea et al., 1999).

Ejemplos

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos aplicando TRANSIN a dos ejemplos. El primero de ellos es sintético, y en él se simula un problema de cadenas de desintegración radiactiva de dos solutos. El segundo se corresponde con un caso real de aplicación al Proyecto GAM (GAs Migration).

Ejemplo sintético

Como ya se ha comentado en el apartado *Formulación del problema directo*, una de las opciones que tiene el código TRANSIN es la de simular problemas de transporte de radionucleidos incluyendo cadenas de desintegración. Esta opción es importante, porque gran parte de los almacenamientos geológicos profundos están pensados para el almacenamiento de residuos radioactivos. No obstante, el código está pensado para la simulación de cualquier otro tipo de problemas en los que un soluto (padre) pueda generar un término fuente para la ecuación de otro soluto (hijo). En estos momentos, únicamente está programado el término fuente de la ecuación (4), las cadenas de desintegración.

Como muestra de aplicación, se presenta un ejemplo bidimensional con 40 elementos y 30 nudos. El ejemplo es muy sencillo, pretendiendo mostrar únicamente una de las últimas posibilidades añadidas al código TRANSIN. El dominio del ejemplo se muestra en la [Figura 1](#). El ejemplo es sintético y se simula el comportamiento de dos elementos radioactivos hipotéticos, A y B, cuyas características se reflejan en la [tabla 1](#). En dicha tabla casi todos los parámetros de transporte son iguales para los dos trazadores, cosa que es lo habitual en cuanto a porosidad y dispersividad, pero el código, por motivos de generalidad permite que estos parámetros sean distintos.

Las condiciones de contorno de flujo son de caudal prefijado en el lado izquierdo, igual a 1 m³/día por metro lineal de contorno, impermeable en los lados superior e inferior del rectángulo y de nivel fijo, H=0 m en el lado derecho. Además hay un arroyo interior en el que hay una condición de goteo y un pozo de bombeo (ver [Figura 1](#)) y un pozo del que se extraen 5.5 m³/día. El flujo se considera estacio-

nario. Por lo que respecta al transporte de solutos, el elemento A se introduce en el sistema a través del contorno izquierdo con el caudal de agua entrante (condición de contorno de flujo másico) con una concentración constante igual a 1 ppm. El elemento B aparece en el sistema como producto de desintegración del A.

En la [Figura 2](#) se observan las curvas de llegada del trazador en los puntos marcados en la [Figura 1](#). La curva del radionucleido B sería cero si no fuese por el aporte en la desintegración del elemento A.

Gas migration test

El laboratorio en roca de Grimsel (Suiza) consiste en una serie de galerías a 450 metros de profundidad en el seno de un macizo granítico. El experimento GAM se realizó en una fractura prácticamente vertical (bastante aislada de las demás) que buza paralelamente a la foliación de la roca madre ([Figura 3](#)). Dicha fractura se encuentra milonitizada, condicionando esto sobremanera el campo de transmisividades. Se excavaron 19 sondeos intersectando la fractura y dichas intersecciones fueron selladas mediante "packers". En ellas se llevaron a cabo ensayos de interferencia y de trazadores ([Figura 4](#)).

El dominio se modeló como un plano de 184 m², tomando el campo de transmisividades de trabajos previos ([Ramajo et al., 1999](#)), quedando dividido el dominio en 484 zonas. La estimación de dichos valores de transmisividad se llevó a cabo en base a datos de nivel piezométrico obtenidos mediante la realización de cuatro ensayos hidráulicos en el dominio de la fractura. Debido a la milonitización de ciertas partes de la fractura, ésta se comporta como un medio poroso equivalente ([Fischer et al., 1998](#)). Por este motivo no puede aplicarse una relación cúbica transmisividad-porosidad en todo el dominio. No obstante, se ha adoptado un modelo mixto donde la porosidad es función de la transmisividad en cada zona del dominio. Así, si se considera la zona como altamente conductiva, se le aplica una ley cúbica. En caso contrario, se le aplica la ley de Kozeny, considerando como valor umbral de transmisividad el de 10⁻⁸ m²/s). Una vez se ha definido la apertura de cada zona (a partir del valor de transmisividad) ([Alcolea et al., 2000](#)), se calcula la porosidad como el producto del valor "regional" de la porosidad (constante) por la apertura calculada: $\phi_i = \Phi b_i$.

El propósito del presente ejercicio es el de obtener una estimación de alguno de los parámetros de

transporte que caracterizan la fractura. Para ello se consideran dos ensayos de trazadores dipolo realizados en la fractura, entre los sondeos 98.02 y 98.04 el primero, y entre los sondeos 98.02 y 98.01 el segundo (Figura 5). Los dos conjuntos de datos de concentración se usaron de forma simultánea para calibrar la porosidad regional y la dispersividad de la fractura.

La calidad de los ajustes obtenidos se puede apreciar en la Figura 6, donde se presentan las comparaciones entre calculado y medido, en los puntos de observación, tras el proceso de calibración.

Conclusiones

Se han presentado las generalidades y alguna de las aplicaciones del código TRANSIN. Se ha hecho especial hincapié a la gran versatilidad del código, que abarca un amplio abanico de posibilidades.

Como una de sus principales ventajas, se destaca la posibilidad de poder estimar de forma automática los parámetros hidráulicos que caracterizan el medio.

Por otra parte, su versatilidad requiere un chequeo continuado de sus aptitudes, ya que no hay ningún proyecto en el que se puedan contemplar todas sus posibilidades, debiendo emplearlo por tanto en muchos problemas para abarcar el mayor número de opciones posible. Éste se lleva a cabo mediante la aplicación del mismo en distintos estudios, abarcando las distintas ramas de la Hidrogeología (almacenamiento de residuos, caracterización de acuíferos, diseño de redes de observación, etc.). Es además, este uso continuado lo que confiere una gran fiabilidad y robustez al código.

Bibliografía

- Alcolea, A., Jódar, J., Medina, A. (2000). "Geostatistical inversion of flow and transport parameters. Methodology and application to a synthetic example". Congreso Groundwater 2000. Balkema Pub., pp. 67-68.
- Alcolea, A., Carrera, J., Medina, A. (1999). "A hybrid Marquardt-Simulated Annealing method for solving the groundwater inverse problem". Congreso ModelCare99. IAHS Pub. 65., pp. 157-163.
- Bear, J. (1972). "Dynamics of fluids in porous media". Dover Publications.
- Carrera, J. y Neuman, S.P. (1986 a). "El problema inverso de la hidrología subterránea. Estado del arte y método de solución". *Revista internacional de métodos numéricos para el cálculo y el diseño en ingeniería*, Vol 2, pp. 3-25
- Carrera, J. y Neuman, S.P. (1986 b). "Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, I. Maximum Likelihood method Incorporating Prior Information". *Water Resources Research*, Vol 22., pp. 211-227
- Carrera, J. y Neuman, S.P. (1986 c). "Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, II. "Uniqueness, Stability and Solution Algorithms". *Water Resources Research*, Vol 22., pp. 211-227
- Cooley, R.L. (1985). "Regression modeling of groundwater flow". *U.S.G.S. Open File Report*, pp. 85-180
- Fischer, U., Kulli, B., Flühler, H. (1998). "Constitutive relationships and pore structure of undisturbed fracture zone samples with cohesionless fault gauge layers". *Water Resources Research*, Vol 34 (7).
- Galarza, G. (1993). "Calibración automática de parámetros en problemas no lineales de flujo y transporte". *Tesis Doctoral*, ETSICCPB-UPC.
- Marquardt, D. W. (1963). "An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters", *J. Soc. Indust. Appl. Math.* Vol. 11. nº 2.
- Medina, A. (1993). "Estimación conjunta de los parámetros de las ecuaciones de flujo y transporte". *Tesis Doctoral*, ETSICCPB-UPC.
- Neuman, S. P. Y Yakowitz, S. (1979). "A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology, 1. Theory". *Water Resources Research*, Vol. 15(4), pp. 845-860.
- Ramajo, H., Jódar, J., Carrera, J., Olivella, S. (1999). "Progress report on modelling of gas migration processes". NAGRA Internal Report 99-61, Wetingen, Switzerland.

Tabla 1

	ϕ	α_L (m)	α_T (m)	Retardo	Período semides. (días)
Elemento A	0.2	2	1	1	7
Elemento B	0.2	2	1	1	0.5

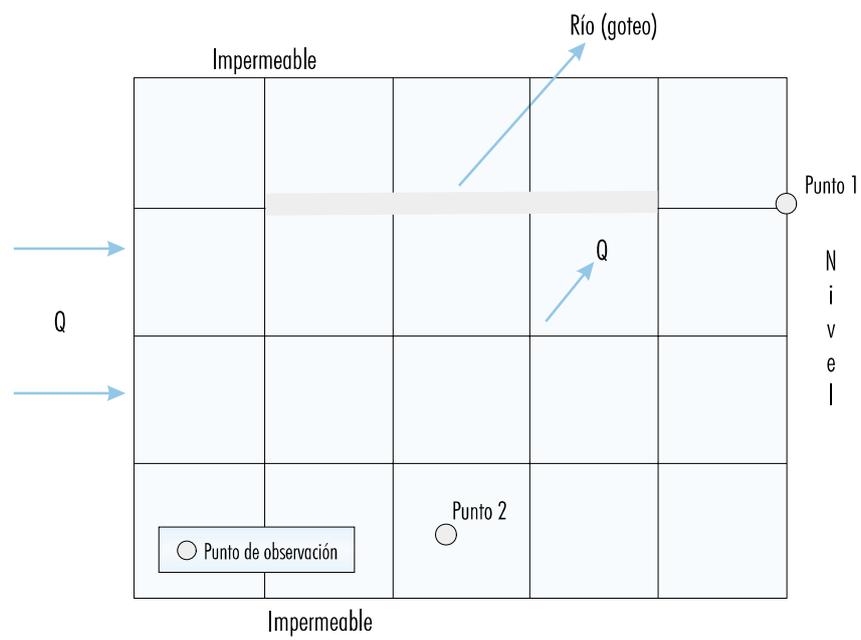


Figura 1. Dominio, condiciones de contorno y puntos de observación.

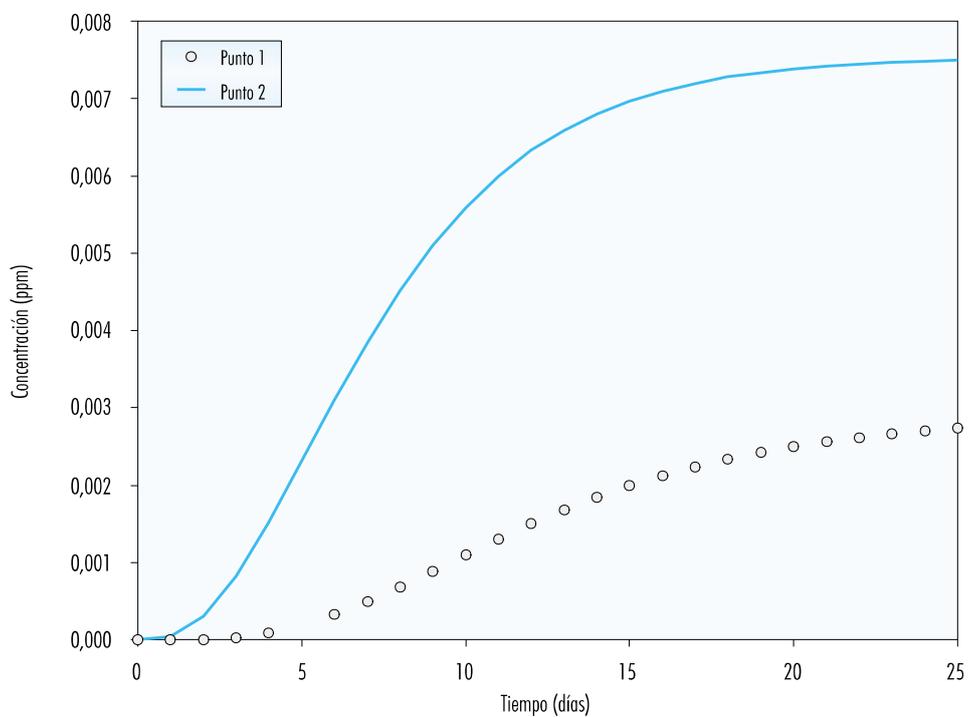
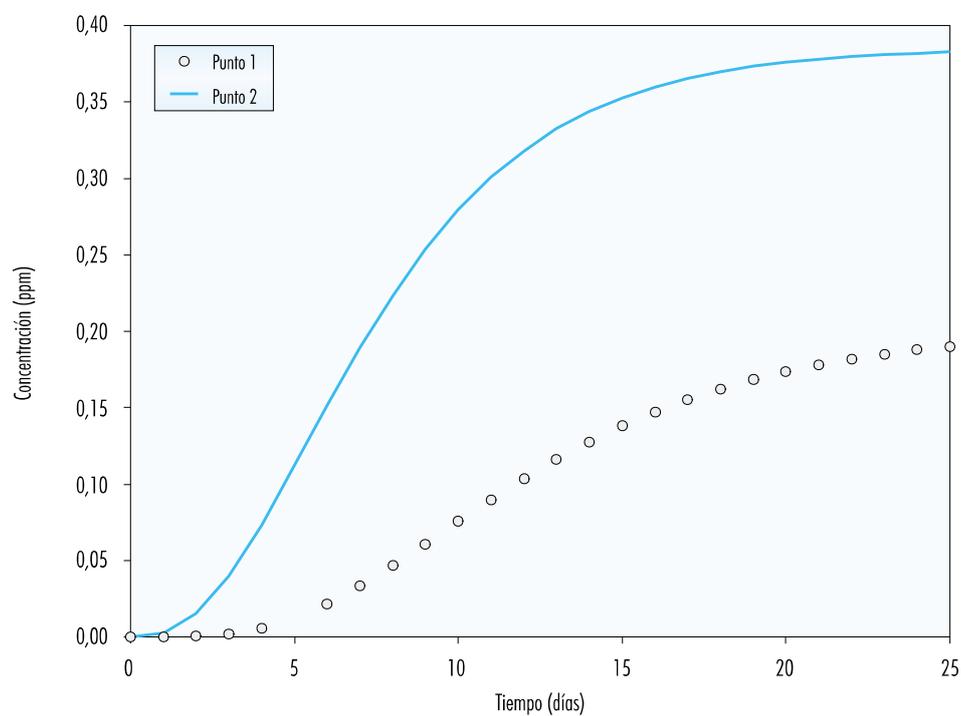


Figura 2. Concentraciones en los puntos 1 y 2 para el radionucleido A (arriba) y para el radionucleido B (abajo).

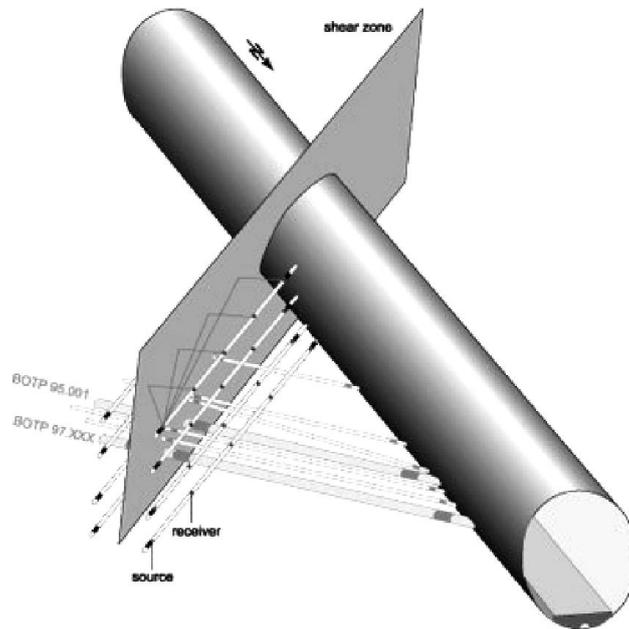


Figura 3. Croquis de situación de la fractura de estudio, en relación con la posición del laboratorio.

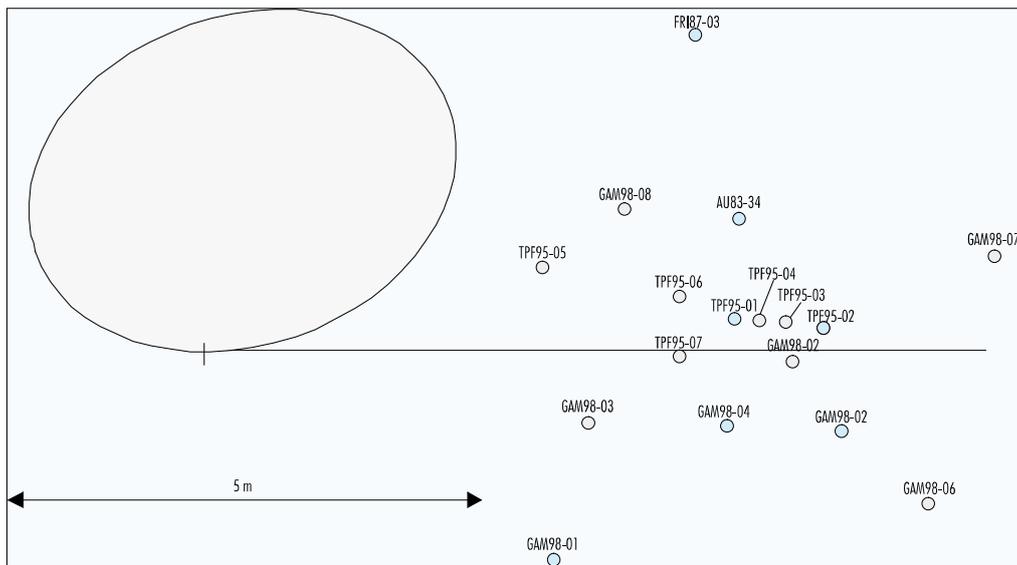


Figura 4. Situación de las intersecciones de los sondeos con el plano de la fractura.

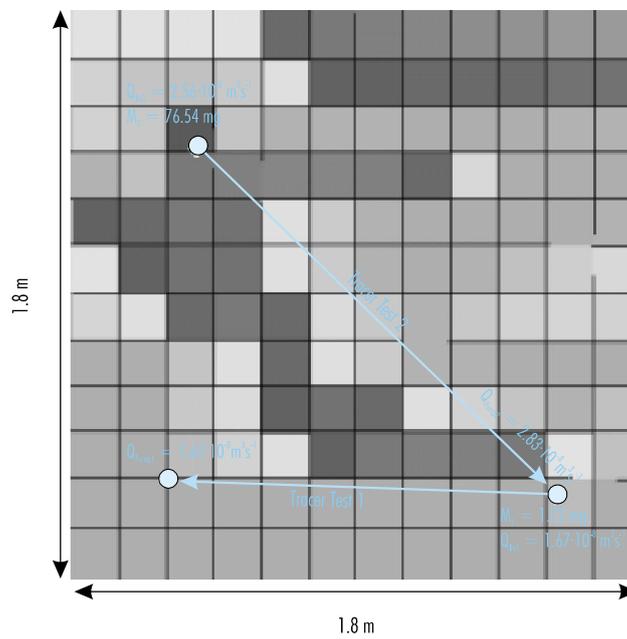


Figura 5. Localización de los pozos de inyección y bombeo, así como los valores de los parámetros utilizados en el ensayo.

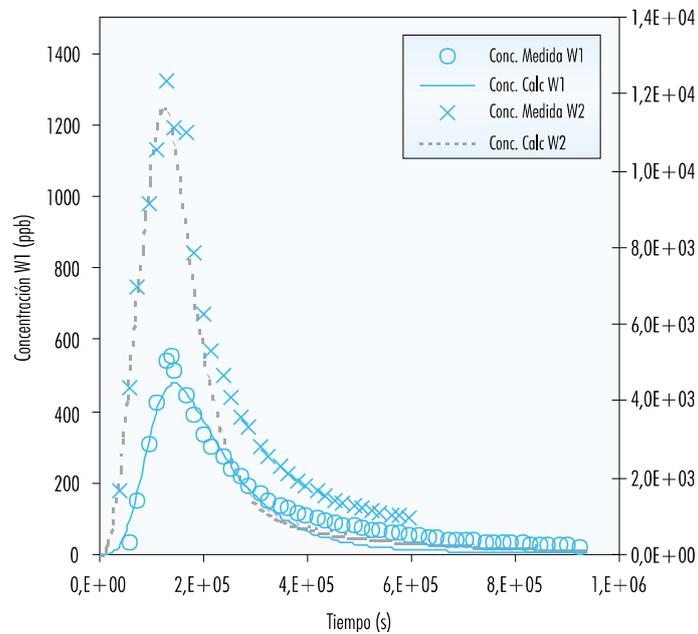


Figura 6. Comparación entre valores calculados y medidos en los puntos de observación, tras el proceso de calibración automática.

MODELOS DE TRANSPORTE REACTIVO: RETRASO

Carlos Ayora, Joaquín Salas
Instituto de Ciencias de la Tierra Jaume Almera (CSIC)

Maarten W. Saaltink, Jesús Carrera, Imma Benet, Francisco Batlle
Dpto. de Ingeniería del Terreno, Minería y Cartografía (UPC)

Introducción

El estudio de los riesgos del almacenamiento de residuos radioactivos se basa en la evaluación de los procesos de migración de los radionucléidos en las aguas subterráneas. Estos análisis sólo son posibles con herramientas de simulación del transporte de solutos y de las reacciones químicas que experimentan dichos contaminantes. Desde hace dos décadas existen códigos de ordenador que modelizan sofisticadamente los procesos químicos, aunque tratan al transporte de manera muy simplificada. Los ejemplos más conocidos de tales códigos son PHREEQE (Parkhurst et al., 1980) y EQ3 (Wolery et al., 1992), que calculan las concentraciones de todas las especies químicas mediante leyes termodinámicas a partir de datos analíticos (concentraciones totales, pH, Eh y composición mineralógica). Por otra parte, existen códigos que modelizan fielmente los procesos de transporte y las heterogeneidades del medio, aunque las reacciones químicas son tratadas de manera muy simplificada. En los últimos años se han desarrollado códigos que pueden simular tanto los procesos de transporte como las reacciones químicas de manera sofisticada. En este contexto, y como parte de las actividades de I+D promovidas por ENRESA, el Departamento de Ingeniería del Terreno de la UPC y el Instituto Jaume Almera del CSIC han desarrollado el código RETRASO (REactive TRANsport of SOLutes).

Este artículo presenta varios temas del código RETRASO. Se inicia con una breve descripción de las capacidades del código (Saaltink et al., 1997). Seguidamente, se discute la solución numérica de las ecuaciones matemáticas (Saaltink et al., 2000) y, en los últimos capítulos, se exponen dos ejemplos de aplicación (Salas y Ayora, 1999, y Salas et al.,

2000) enmarcados en proyectos del programa europeo de Análogos Naturales: Palmottu (Finlandia) y Oklo (Gabón). Aparte de los ejemplos descritos, se ha aplicado RETRASO a múltiples casos, como el proceso de dedolomitización (Ayora et al., 1998), el cambio de la calidad del agua subterránea por recarga artificial (Saaltink et al., 1998), la interpretación de experimentos de disolución de arcillas (Cama y Ayora, 1998) y la simulación de barreras geológicas (Guardiola, 2000).

Descripción del código

El código RETRASO simula el flujo de agua, los procesos de transporte de solutos y las reacciones químicas. El flujo de agua se basa en la ley de Darcy en medio saturado, bajo la suposición de que los procesos de transporte no influyen en el flujo. El código permite contornos irregulares en dominios bidimensionales, heterogéneos y anisótropos, mediante una red de elementos finitos triangulares (la discretización temporal se efectúa mediante el método de las diferencias finitas). Es capaz de implementar un esquema explícito, implícito o de Cranck-Nicholson, y las condiciones de contorno pueden ser de nivel o caudal prescritos, o mixta.

A partir del campo de flujo, se calcula el transporte. RETRASO simula la advección, la difusión molecular y la dispersión hidrodinámica, mediante elementos finitos para la discretización espacial y diferencias finitas para la discretización temporal. Las condiciones de contorno pueden ser de concentración y caudal másico prescritos o caudal másico asociado al caudal del agua.

RETRASO permite la modelización de reacciones homogéneas (complejación, ácido-base, redox), asor-