

SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN UN MEDIO SUBTERRÁNEO HETEROGENEO MEDIANTE EL RASTREO ALEATORIO DE PARTICULAS

SIMULATION OF CONTAMINANT TRANSPORT IN A HETEROGENOUS GROUNDWATER SYSTEM USING A RANDOM-WALK PARTICLE TRACKING ALGORITHM

Gómez Giraldo, Andrea¹; Álvarez-Villa, Oscar David²; Monsalve, Gaspar¹;
Vélez, Jaime Ignacio¹; Blessent, Daniela³

Resumen

Este trabajo presenta los resultados de simulación de flujo y transporte de agua subterránea en un medio poroso heterogéneo, mediante un algoritmo desarrollado para esta investigación y escrito en lenguaje Fortran 90. El algoritmo resuelve numéricamente la ecuación de flujo de agua subterránea a través de diferencias finitas, considerando el tensor completo de conductividades hidráulicas el cual permite capturar mejor los efectos de la heterogeneidad del medio. El transporte de solutos se simuló mediante la implementación del método Rastreo Aleatorio de Partículas (RAP), teniendo en cuenta la interpolación de velocidad bilineal y la dispersividad tensorial. El área de estudio para la simulación fue en la isla de de Olkiluoto – Finlandia dado que era el lugar de donde se contaba con información para poder realizar la validación, simulación que se realizó a partir de una aproximación de un medio fracturado a un medio poroso equivalente, empleando herramientas geoestadísticas, que utilizan la probabilidad de transición y el modelo de cadena de Markov como aproximación estocástica. La representación del medio poroso equivalente estocástico se definió según las facies de roca, que fueron definidas según su conductividad hidráulica y la densidad de fractura. Los resultados se compararon con una simulación de flujo y transporte implementada con el esquema de diferencias finitas (DF). Los escenarios de validación muestran que las concentraciones obtenidas por medio del RAP pueden diferir del esquema DF dependiendo de cómo se distribuyen las partículas en el tiempo de ejecución inicial. Los escenarios de simulación evidencian un transporte más rápido del contaminante a lo largo de direcciones preferenciales definidas, que coinciden con zonas de conductividades hidráulicas más elevadas; no obstante, se reportan fluctuaciones mínimas de concentraciones en algunos bloques analizados, efecto asociado directamente con la aleatoriedad del esquema RAP. Además se ha comprobado que el esquema DF es más ineficiente para la simulación del transporte, ya que ha mostrado ser inestable numéricamente incluso en el caso más sencillo de medio homogéneo.

Palabras Claves: Medio poroso heterogéneo, Diferencias Finitas, Rastreo Aleatorio de Partículas.

Abstract

This paper presents the results of groundwater flow and solute transport simulation in a heterogeneous porous medium, by implementing a code developed for this research and written in Fortran 90 language. The algorithm solves numerically the groundwater flow equation through finite differences, considering the complete tensor of hydraulic conductivities, which allows better capture of the effects of the heterogeneity of the medium. The solute transport simulation was performed by applying a Random Walk Particle Tracking (RWPT) algorithm, using a bilinear velocity interpolation and tensorial dispersivity. The area of study for the simulation on was the island of Olkiluoto - Finland since it was the place where information was available to carry out the validation. This simulation was performed based on an approximation of a fractured medium to an equivalent porous medium, using geostatistical tools that use the transition probability and the Markov chain model as a stochastic approach. The representation of the stochastic equivalent porous medium was defined according to the rock facies, which are defined according to hydraulic conductivity and fracture density. The results were compared with a flow and transport simulation implemented with the finite differences (FD) scheme. The validation scenarios show that the concentrations obtained through the RAP may differ from the FD scheme depending on how the particles are distributed at the initial run time. The simulation scenarios show a faster transport of the contaminant along preferential directions that coincide with the zones of highest hydraulic conductivities; however, small fluctuations in concentration are reported in some of the analyzed blocks, an effect directly associated with the randomness of the RAP scheme. It has also been shown that the DF scheme is more inefficient for transport simulation, since it has proven to be unstable numerically even in the simplest case of a homogeneous medium.

Keywords: Heterogeneous Porous Medium, Finite Differences, Random Walk Particle Tracking.

¹ Universidad Nacional de Colombia. andrea.gomez@gottaingenieria.com; gmonsalvem@unal.edu.co; jivelezu@unal.edu.co

² GOTTA Ingeniería, Colombia. oscar.alvarez@gottaingenieria.com

³ Universidad de Medellín. dblessent@udem.edu.co

1. INTRODUCCIÓN

Las aguas subterráneas constituyen una de las alternativas prometedoras para mitigar los desabastecimientos del recurso hídrico, principalmente en zonas áridas donde la mayoría de las fuentes superficiales no son suficientes para suplir las demandas o se encuentran altamente contaminadas. En este contexto, las fuentes de aguas subterráneas ofrecen una mejor calidad en comparación con las fuentes superficiales, y por tanto los tratamientos para potabilizarla son más económicos. A pesar de lo anterior, la calidad de las aguas subterráneas puede verse afectada por diferentes actividades antrópicas, por lo que resulta esencial evaluar la susceptibilidad y vulnerabilidad de las reservas de aguas subterráneas, a través de implementaciones eficientes de modelos de flujo y transporte, permitiendo establecer las direcciones y la velocidad de propagación de los contaminantes en un acuífero, para así dar pautas en la orientación de una gestión integral del recurso hídrico.

Existen diferentes estrategias para abordar la solución de la Ecuación en Derivadas Parciales (EDP) de transporte subterráneo. Estas técnicas se dividen en tres enfoques fundamentales: (i) el Euleriano, que se basa en asignar valores para las propiedades de fluido en un punto del espacio; (ii) el Lagrangiano, que se fundamenta en hacerle un seguimiento a las partículas en cada instante de tiempo; y (iii) el esquema denominado mixto, que presenta una combinación de los dos anteriores.

La adecuada modelación del transporte de soluto en el medio subterráneo presenta inconvenientes relacionados con la escala. Estudios previos (Carrera, 1993; Fetter, 2001; Cherblanc *et al.*, 2007), demuestran que la dispersividad puede variar abruptamente dependiendo de la escala de análisis y el tamaño de los poros. Por ejemplo, la dispersividad en las mediciones de laboratorio es del orden de centímetros, mientras que en una escala regional los valores son del orden de cientos de metros. Estas variaciones están afectadas por la heterogeneidad de las formaciones geológicas, las cuales presentan algún grado de variabilidad espacial de las propiedades hidráulicas dependiendo de la escala de observación (Sun y Sun, 1996; Golfier, 2011).

La variabilidad en las propiedades hidráulicas, principalmente la conductividad, puede considerarse a escala puntual, usualmente basada en mediciones de campo, y a escalas regionales, donde habitualmente se supone homogeneidad por capas (Zhou *et al.*, 2010). Los modelos que asumen esta segunda escala pueden ser viables cuando son utilizados en la predicción y toma de decisiones en la gestión del recurso hídrico para zonas de estudio bastante extensas y en donde la información de campo es escasa. Sin embargo, cuando se desea efectuar un estudio local para caracterizar en detalle la dinámica de los procesos de flujo y transporte,

la suposición de la homogeneidad de capas puede no ser adecuada, ya que en muchos casos no representa las condiciones reales del medio. Dado que la heterogeneidad del medio a escala local es una condición real, se hace importante evaluar qué implicaciones tiene la alta variabilidad de la conductividad hidráulica en escala espacial fina a medida que el contaminante viaja en el subsuelo, puesto que estas heterogeneidades generan alta variabilidad espacial en los campos de velocidad de Darcy, ocasionando la conformación de líneas preferenciales de flujo, en donde dicho efecto se podría ver reflejado en la propagación anómala de la pluma y/o en un incremento o decremento en la velocidad de dilución de determinado contaminante (Aggelopoulos y Tsakiroglou, 2012; Huang *et al.*, 2003; Salamon *et al.*, 2006a; Sánchez, 2009).

Obtener una representatividad adecuada del transporte de contaminantes de soluto debido a la heterogeneidad del medio, requiere implementar modelos numéricos que representen explícitamente dicha heterogeneidad. Una de las alternativas que se ha planteado ampliamente en los últimos años es la implementación de modelos numéricos estocásticos, ya que pueden describir mejor el flujo y el transporte de soluto en un medio muy heterogéneo, debido a la aleatoriedad del marco conceptual (Bechtold *et al.*, 2011; Boso *et al.*, 2013; Hsu, 2004; LaBolle *et al.*, 1996; Salamon *et al.*, 2006a; Sánchez, 2009). Dentro de este enfoque se ha propuesto como una de las mejores opciones el esquema de resolución Lagrangiano de Rastreo Aleatorio de Partículas (RAP), en vista de que conserva la masa y no presenta dispersiones numéricas.

Teniendo en cuenta lo anterior, el propósito de este trabajo es mostrar una implementación propia tridimensional del RAP para simular eficientemente el transporte de solutos en un medio subterráneo altamente heterogéneo y anisótropo, la cual no tiene límites en su aplicación, ya que incluso tiene importantes perspectivas para desarrollos computacionales posteriores en medio heterogéneo considerando más procesos de transporte a los acá mencionados. Se han considerado los siguientes aspectos: (i) un esquema de resolución de la EDP de flujo subterráneo para medio heterogéneo y anisótropo (Pérez, 2015; Ospina, 2015), (ii) los mecanismos de advección, dispersión y decaimiento de primer orden en la EDP de transporte, y (iii) técnicas geoestadísticas para generar realizaciones equiprobables de las conductividades hidráulicas, tal que se representen conjuntamente su variabilidad espacial y su incertidumbre. El código implementado se ha sometido a una validación indirecta, comparando los resultados obtenidos para diferentes tipos de acuíferos con las simulaciones generadas mediante la solución por Diferencias Finitas (DF) de la EDP de transporte, usando un código comercial ampliamente reconocido y aceptado en la comunidad científica (McDonald y Harbaugh, 1988).

2. MARCO CONCEPTUAL

El movimiento de las partículas del soluto es gobernado por diferentes mecanismos de transporte: advección, dispersión y reacciones químicas. El transporte advectivo es un proceso que consiste en el arrastre de partículas debido al movimiento del flujo. La advección es descrita matemáticamente por la dirección y la magnitud de la velocidad, dado que el centro de masa del elemento se mueve a la velocidad promedio del fluido, la cual se ve afectada directamente por la conductividad hidráulica del medio poroso y el gradiente hidráulico (Kresic, 2007). La dispersión hidrodinámica es el resultado de la combinación de dos procesos de transporte de masa en el medio poroso: dispersión mecánica y dispersión molecular. Aunque la dispersión hidrodinámica es un fenómeno macroscópico, este es causado en realidad por los movimientos microscópicos no uniformes del fluido (Fetter, 2001). El contaminante, como elemento disuelto en el agua subterránea, puede participar en reacciones químicas que se producen en el medio geológico, que ocurren en la fase líquida y son reguladas por la ley de acción de masas, en la que intervienen los mecanismos de advección y dispersión.

En este trabajo se consideran únicamente reacciones de primer orden, que representan la dinámica de reducción del contaminante en la parte líquida. Este mecanismo afecta a las moléculas orgánicas disueltas en el agua subterránea, las cuales quedan adheridas al terreno formando una película que ayuda al desarrollo de la actividad biológica (Martínez *et al.*, 2006). Los procesos de biodegradación son complejos y dependen de parámetros difíciles de evaluar. Por lo tanto para el caso de este estudio

solamente se ha considerado la componente de adherencia al terreno, en donde la concentración del contaminante disminuye siguiendo un decaimiento exponencial. Los tres procesos antes mencionados se incluyen en la EDP de transporte de solutos en medio subterráneo, como sigue (Salamon *et al.*, 2006a):

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} c) + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c) + \lambda c = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (1)$$

donde \mathbf{D} es el tensor de dispersión, c es la concentración, t es el tiempo, \mathbf{u} es el vector de velocidades obtenido de resolver la EDP de flujo subterráneo mediante alguna técnica numérica o analítica, y λ es la constante de decaimiento de primer orden. Aquí, la porosidad se asume constante y las fluctuaciones de la velocidad se asumen como producidas únicamente por la heterogeneidad de las conductividades hidráulicas.

2.1. Características generales del RAP

El marco conceptual del RAP propone la simulación del movimiento de los contaminantes desde una perspectiva Lagrangiana, es decir, realizando el seguimiento de las trayectorias de las partículas, las cuales representan la masa de soluto. La trayectoria seguida por cada una de ellas depende de la distribución espacio temporal de las velocidades y de la parametrización de la dispersividad del medio en un dominio espacial continuo. La ecuación que describe el movimiento de la partícula a lo largo de una línea de corriente es (Anderson y Woessner, 1992; Salamon *et al.*, 2006a):

$$X_p(t + \Delta t) = X_p(t) + [u(X_p, t) + D(X_p, t)]\Delta t + B(X_p, t)\varepsilon(t)\sqrt{\Delta t} \quad (2)$$

donde X_p es la posición de la partícula [L] en el tiempo [T]; Δt es el paso del tiempo t [T]; B es el desplazamiento de la matriz definido como el tensor dispersor [L^2T^{-1}]; u es el campo de la velocidad [LT^{-1}]; $\varepsilon(t)$ es el vector independiente, variable normalmente distribuida con media cero y varianza uno; y D es el tensor de dispersión, descrito de la siguiente forma:

$$D = (\alpha_T |u| + D_m)I + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{uu^t}{|u|} \quad (3)$$

donde α_T y α_L son las dispersividades transversal y longitudinal [L], respectivamente; u es el vector velocidad obtenido de la solución de flujo de régimen permanente [ML^{-1}]; $|u|$ es la magnitud del vector velocidad; y D_m es el coeficiente de dispersión molecular.

La relación que existe entre los tensores coeficiente de dispersión molecular y coeficiente de dispersión es . Para medios porosos la forma tridimensional de la matriz de desplazamiento se puede expresar como lo define Lichtner (2002):

$$B = \begin{bmatrix} \frac{u_x}{|u|} \sqrt{2(\alpha_L |u| + D_m)} & \frac{-u_x u_z}{|u| \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{2(\alpha_T |u| + D_m)} & \frac{-u_y}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{2(\alpha_T |u| + D_m)} \\ \frac{u_y}{|u|} \sqrt{2(\alpha_L |u| + D_m)} & \frac{-u_y u_z}{|u| \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{2(\alpha_T |u| + D_m)} & \frac{u_x}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{2(\alpha_T |u| + D_m)} \\ \frac{u_z}{|u|} \sqrt{2(\alpha_L |u| + D_m)} & \frac{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}}{|u|} \sqrt{2(\alpha_T |u| + D_m)} & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Para resolver la ecuación de transporte mediante el RAP debe plantearse una discretización del dominio espacial del acuífero. En este trabajo se considera una representación mediante prismas rectangulares pertenecientes a una malla de DF, utilizada para resolver la EDP de flujo subterráneo. El campo de velocidades debe cumplir con el balance de flujo de masa local en cualquier interface de celda dentro de la malla de DF (LaBolle *et al.*, 1996; LaBolle *et al.*, 2000; Salamon *et al.*, 2006a). Para lo anterior, se han planteado varios enfoques en la literatura, como son el método de la interpolación, el principio de reflexión y la ecuación diferencial estocástica generalizada (LaBolle *et al.*, 1996; LaBolle *et al.*, 2000; Salamon *et al.*, 2006a). No obstante, Salamon *et al.* (2006a) exponen que, para el caso de transporte de soluto en medios heterogéneos con transiciones abruptas entre diferentes unidades hidrogeológicas y una fuerte correlación espacial anisotrópica, posiblemente el método que proporciona simulaciones más adecuadas es el de la interpolación. Por consiguiente, en este trabajo se han generado campos de velocidad mediante la interpolación de velocidades sobre los campos de

alturas piezométricas obtenidos de resolver la EDP de flujo subterráneo.

2.2. Interpolación de velocidades

El método de interpolación actúa suavizando el tensor de dispersión en las proximidades de las interfaces con el fin de producir un término de gradiente continuo en el vector deriva de la interfaz de los bloques, para lo cual se hace necesario que el dominio del acuífero se encuentre bien discretizado y que los pasos de tiempo sean suficientemente pequeños, con el fin de minimizar los errores introducidos por el suavizado del tensor de dispersión (LaBolle *et al.*, 1996; Salamon *et al.*, 2006a,b).

Usando la ley de Darcy es posible obtener velocidades en las interfaces de las celdas a partir de las conductividades hidráulicas dadas en los centros de ellas. Finalmente, con la velocidad de las interfaces se pueden estimar las componentes de la velocidad en cualquier ubicación dentro de la celda por medio de la interpolación, como se esquematiza en la Figura 1, donde se presenta el esquema de interpolación lineal para los casos 2D y 3D.

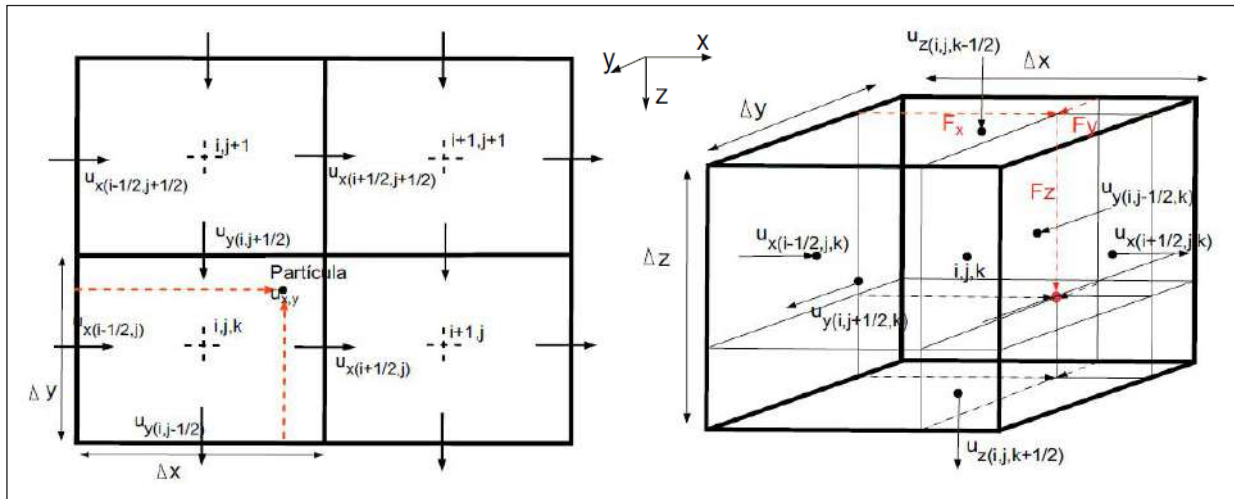


Figura 1. Esquema de interpolación lineal bidimensional (izquierda) y tridimensional (derecha).
Modificadas de LaBolle *et al.* (1996) y Salamon *et al.* (2006a)

Cuando se utiliza la interpolación lineal, las velocidades se calculan teniendo en cuenta sólo una dirección, por lo cual éstas no cambian con respecto a la dirección ortogonal dentro de una celda. En consecuencia, al acercarse a la interfaz entre dos celdas vecinas y asumir que se tienen diferentes velocidades horizontales en cada celda, se da lugar a diferentes flujos de masa de soluto dispersivo a través de la frontera. Este hecho ocasiona una acumulación artificial de partículas en las zonas de

baja conductividad (Kinzelbach, 1988). En el enfoque bilineal, las velocidades son interpoladas primero en una dirección y luego en la dirección ortogonal con sus celdas vecinas, obteniendo la velocidad para cada esquina de celda y así la velocidad en cualquier punto se puede calcular como un promedio ponderado. En la Tabla 1 se muestran las ecuaciones del esquema de interpolación para los casos lineal, bilineal y trilineal.

Tabla 1. Esquema de interpolación de velocidades.

Definición F_x, F_y y F_z		
$F_x = (x_p - x_{i-1/2})/\Delta x$	$F_y = (y_p - y_{j-1/2})/\Delta y$	$F_z = (z_p - z_{k-1/2})/\Delta z$
Lineal		
$u_x = (1 - F_x)u_{x(i-1/2,j,k)} + F_x u_{x(i+1/2,j,k)}$	$u_y = (1 - F_y)u_{y(i-1/2,j,k)} + F_y u_{y(i+1/2,j,k)}$	$u_z = (1 - F_z)u_{z(i-1/2,j,k)} + F_z u_{z(i+1/2,j,k)}$
Bilineal		
$u_x = F_y(1 - F_x)u_{x(i-1/2,j+1/2)} + F_x(1 - F_y)u_{x(i+1/2,j-1/2)} + F_x F_y u_{z(i-1/2,j-1/2)} + (1 - F_x)(1 - F_y)u_{x(i+1/2,j-1/2)}$ $u_y = F_x(1 - F_y)u_{y(i-1/2,j+1/2)} + F_y(1 - F_x)u_{y(i+1/2,j-1/2)} + F_x F_y u_{z(i-1/2,j-1/2)} + (1 - F_x)(1 - F_y)u_{y(i+1/2,j-1/2)}$		
Trilineal		
$u_x = (1 - F_z)(1 - F_y)(1 - F_x)u_{x(i-1/2,j+1/2,k-1/2)} + (1 - F_z)(1 - F_y)F_x u_{x(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + (1 - F_z)(1 - F_x)F_y u_{x(i-1/2,j-1/2,k-1/2)}$ $+ (1 - F_z)F_x F_y u_{x(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + F_z(1 - F_y)(1 - F_x)u_{x(i-1/2,j+1/2,k+1/2)} + F_z(1 - F_y)F_x u_{x(i+1/2,j+1/2,k+1/2)}$ $+ F_z F_y(1 - F_x)u_{x(i-1/2,j-1/2,k+1/2)} + F_x F_y F_z u_{x(i+1/2,j-1/2,k+1/2)}$		
$u_y = (1 - F_z)(1 - F_x)(1 - F_y)u_{y(i-1/2,j+1/2,k-1/2)} + (1 - F_z)(1 - F_x)F_y u_{y(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + (1 - F_z)(1 - F_y)F_x u_{y(i-1/2,j-1/2,k-1/2)}$ $+ (1 - F_z)F_x F_y u_{y(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + F_z(1 - F_x)(1 - F_y)u_{y(i-1/2,j+1/2,k+1/2)} + F_z(1 - F_x)F_y u_{y(i+1/2,j+1/2,k+1/2)}$ $+ F_z F_x(1 - F_y)u_{y(i-1/2,j-1/2,k+1/2)} + F_x F_y F_z u_{y(i+1/2,j-1/2,k+1/2)}$		
$u_z = (1 - F_x)(1 - F_y)(1 - F_z)u_{z(i-1/2,j+1/2,k-1/2)} + (1 - F_x)(1 - F_y)F_z u_{z(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + (1 - F_x)(1 - F_z)F_y u_{z(i-1/2,j-1/2,k-1/2)}$ $+ (1 - F_x)F_z F_y u_{z(i+1/2,j-1/2,k-1/2)} + F_x(1 - F_z)(1 - F_y)u_{z(i-1/2,j+1/2,k+1/2)} + F_x(1 - F_z)F_y u_{z(i+1/2,j+1/2,k+1/2)}$ $+ F_x F_z(1 - F_y)u_{z(i-1/2,j-1/2,k+1/2)} + F_x F_y F_z u_{z(i+1/2,j-1/2,k+1/2)}$		

3. CARACTERÍSTICAS DEL ALGORITMO IMPLEMENTADO

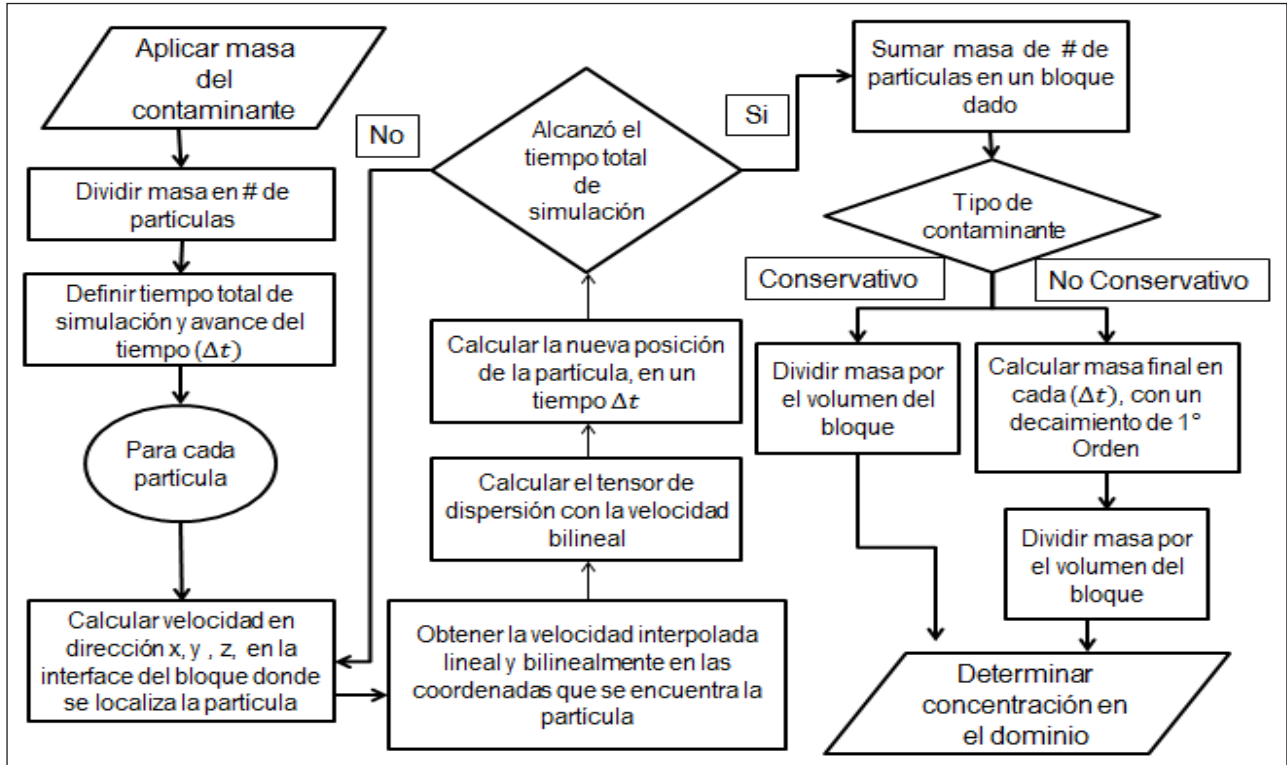


Figura 2. Estructura del algoritmo implementado para resolver la EDP de transporte de soluto en medio subterráneo mediante el RAP

El algoritmo general adoptado en este trabajo para la resolución de la EDP de transporte de soluto en medio subterráneo mediante el RAP, implementado en un código en lenguaje de programación Fortran 90, consiste en aplicar la siguiente secuencia de pasos:

- Definir las coordenadas de descarga del contaminante y el tipo de contaminante, ya sea conservativo o no conservativo.
- Obtener la velocidad interpolada de la partícula, lineal y bilinealmente, de acuerdo con las coordenadas correspondientes en un paso de tiempo.
- Calcular el tensor de dispersión con la velocidad interpolada bilinealmente.
- Se obtiene la nueva posición de la partícula a partir del avance generado por los efectos de la velocidad de flujo y el tensor de dispersión.

- Evaluar si el algoritmo ha llegado al tiempo final de la modelación o debe continuar realizando los pasos anteriores para la misma partícula hasta alcanzar el tiempo total.
- Sumar la masa de cada una de las partículas en un bloque dado, cuando ya se haya efectuado los pasos anteriores para cada una de las partículas y para todo el tiempo de modelación del programa.
- Finalmente, evaluar si el contaminante es conservativo o no. Si es conservativo, el siguiente paso es dividir la masa por el volumen del bloque para así determinar la concentración en ese y en el resto de los bloques en donde se registren partículas. Si por el contrario, el contaminante es no conservativo, calcula la masa final en cada con la ecuación de decaimiento de primer orden, y finalmente se divide la masa por el volumen del bloque para determinar la concentración en el dominio de simulación.

Los detalles de implementación se presentan en el algoritmo consignado en la Figura 2.

4. VALIDACIÓN DE LA IMPLEMENTACIÓN

Como se dijo antes, la implementación desarrollada en este trabajo se ha validado comparando los resultados obtenidos de simulaciones de transporte en un entorno de medio poroso homogéneo e isotrópico con respecto a las producidas mediante una solución por DF contenida en el código de MODFLOW (McDonald y Harbaugh, 1988). Realizar pruebas computacionales en un medio homogéneo se considera apropiado porque éste hace referencia a uno de los casos más sencillos y, al mismo tiempo, puede aportar información valiosa con respecto al comportamiento computacional de la implementación

desarrollada. Así pues, se plantean en el mismo medio homogéneo e isotrópico dos escenarios diferentes para evaluar la pertinencia de las diferentes simulaciones considerando separadamente los procesos que intervienen en el transporte de solutos en el medio subterráneo. El dominio espacial del estudio tiene una longitud de 400 m en direcciones Norte y Este, y 200 m en dirección vertical, con discretización regular de 5 m en cada dirección (ver Figura 3, izquierda). Se considera un soluto conservativo de masa de 25 kg, equivalente a una concentración de 200 mg/L, masa que se divide en 4000 partículas, las cuales son distribuidas uniformemente en el bloque de descarga 1641, definido por la columna 21, fila 21 y capa 1, en un tiempo inicial de . Esta distribución se realiza como se muestra en la Figura 3, derecha.

Los parámetros de entrada para cada uno de los escenarios de modelación se mencionan en la Tabla 2. El primer escenario presenta valores iguales de dispersividad transversal y longitudinal, mientras que el segundo reporta valores diferentes para ambas dispersividades.

Tabla 2. Parámetros de simulación para escenarios de validación

Parámetros	Escenario 1	Escenario 2
Conductividad hidráulica (m/d)	0.01	0.01
Dispersividad longitudinal (m)	10	10
Dispersividad transversal (m)	10	0.1
Coefficiente de dispersión molecular (m ² /s)	1x10 ⁻¹¹	1x10 ⁻¹¹
Masa del contaminante (Kg)	25	25

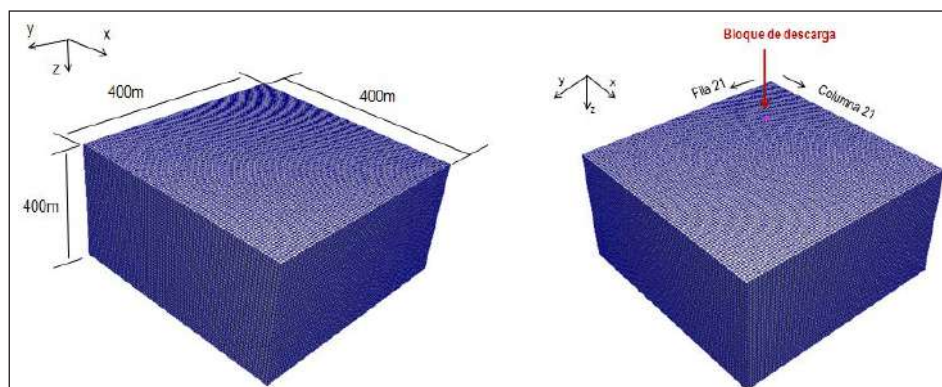


Figura 3. Discretización dominio espacial del acuífero de estudio (izquierda) y localización de la descarga del contaminante en dicho acuífero (derecha)

4.1. Comparación de casos de validación

La Figura 4 muestra las plumas de contaminante obtenidas al cabo de un año de simulación, mediante DF y RAP para los escenarios 1 (ver la Figura

4a, valores de dispersividad transversal iguales) y 2 (ver la Figura 4b, valores de dispersividad trasversal diferentes). En el escenario 1, como era de esperarse, se evidencia una simetría de la

pluma del contaminante rodeando el bloque de descarga, alrededor del eje dado por las líneas de flujo. En el escenario 2 se observa una distribución de concentraciones con una dirección preferencial

Noreste-Sureste a causa de un valor menor en el parámetro de dispersividad transversal, ocasionando mayores gradientes del transporte del contaminante en el sentido de las líneas de flujo.

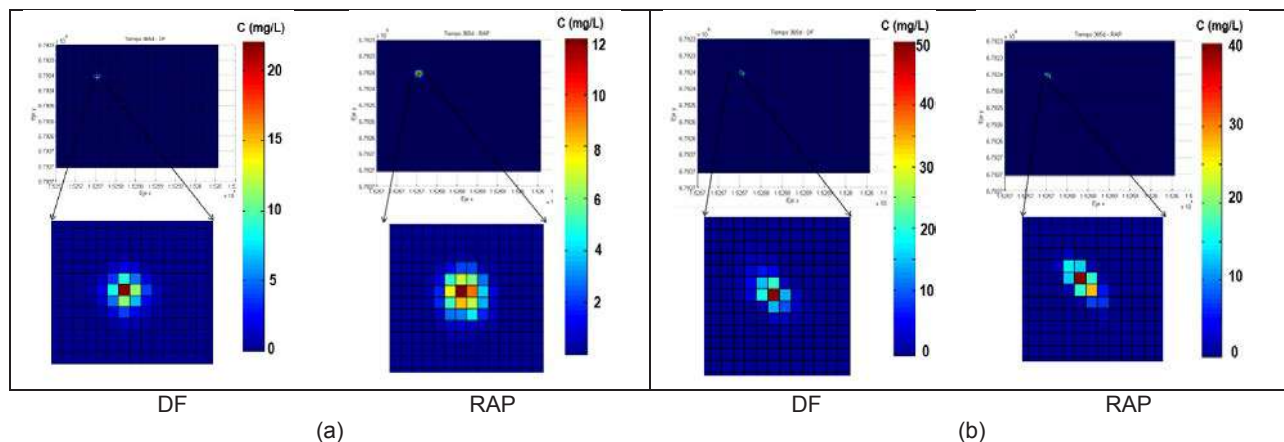


Figura 4. Evolución de la pluma de contaminante en el (a) Escenario 1 y (b) Escenario 2. Los resultados corresponden a un tiempo de simulación de 1 año

Apesar de obtenerse tendencias de concentraciones similares mediante ambos esquemas de resolución, las magnitudes de las mismas han resultado ser diferentes. Por ejemplo, se observa que para el escenario 1 en el esquema RAP (Figura 4a) se registra una concentración de 12 mg/L en un tiempo de 1 año, y para DF se reporta un valor de 30 mg/L en el mismo tiempo de simulación. Una situación similar se registra en el escenario 2 en el mismo tiempo de simulación. La concentración obtenida usando RAP (Figura 4b) es de 40 mg/L, y usando DF se obtuvieron 50 mg/L. Estos avances rápidos del contaminante se evidencian principalmente en el bloque de descarga, en donde los errores absolutos para el escenario 1 registran una diferencia de 10 mg/L, y para el escenario 2, registran una diferencia de 15 mg/L (Figura 5); mientras que para los bloques aledaños en donde se distribuye la concentración que sale del bloque de descarga se registran

errores menores a los obtenidos para el bloque de descarga.

Los avances rápidos de concentración, principalmente en el bloque de descarga, sugieren efectos de la aleatoriedad intrínseca al esquema numérico RAP sobre la localización de las partículas en un tiempo dado y, en este caso, influyen en la configuración inicial de ellas (Figura 5, derecha). Si inicialmente las partículas se ubican cerca de las interfaces de los bloques, podrían cruzar o no desde el bloque de descarga a uno de los bloques aledaños en los primeros tiempos de simulación, condicionando el cambio de concentración en dichos tiempos. Dadas las anteriores discrepancias entre los resultados obtenidos mediante el RAP y las DF, se consideró modelar por separado las diferentes dinámicas de transporte (advección y dispersión), separando los términos respectivos en la resolución de la EDP de transporte en el escenario 2.

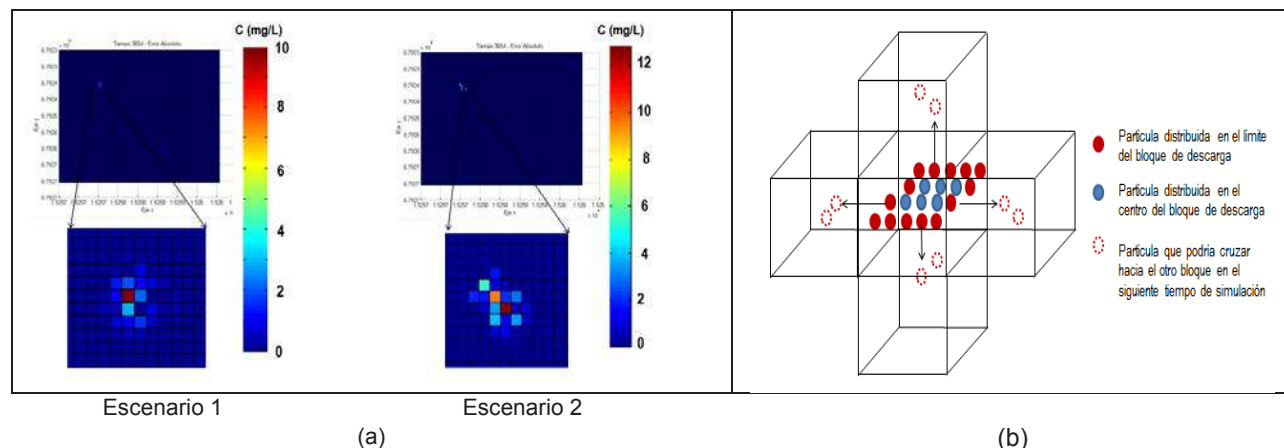


Figura 5. (a) Errores absolutos para las concentraciones simuladas por RAP con respecto a las obtenidas mediante DF, para los dos escenarios considerados al cabo de un año de simulación (izquierda). (b) Distribución inicial de las partículas en la simulación mediante RAP (derecha)

4.2 Simulación del componente advectivo

En la Figura 6 se muestran las plumas de contaminante simuladas en un tiempo de 2 años, con la parametrización dada por el escenario 2, mediante las DF (izquierda) y el RAP (derecha), considerando únicamente el término advectivo. Se observa que el avance de la pluma solamente se hace en dirección Sureste (dirección de disminución en la coordenada Y y aumento en la coordenada X) debido a la ausencia del mecanismo de dispersión. Por ello las partículas avanzan en dirección de las líneas de flujo. Los resultados obtenidos por ambas metodologías manifiestan variaciones mínimas de las concentraciones en los primeros días de simulación. Por ejemplo, las DF reportan concentraciones de 198.64 mg/L, 192.12 mg/L y 158.59 mg/L en los días de simulación 5, 30 y 180, respectivamente; mientras que para el esquema de RAP los valores registrados (200 mg/L, 187.55 mg/L y 158.45 mg/L) son muy similares para los mismos tiempos de simulación mencionados.

En cambio, a partir de un tiempo de simulación de 1 año, las variaciones de concentración entre los dos esquemas comienzan a ser más evidentes, pues se reportan valores de 125.00 mg/L y 78.16 mg/L para el primero y segundo año del esquema DF, respectivamente, mientras que para el esquema RAP, para los mismos años, se registran concentraciones de 112.05 mg/L y 53.25 mg/L, respectivamente. Estas diferencias de concentración indican avance de la pluma en mayor medida para el RAP, pero muestran que se produce un efecto acumulativo de las concentraciones a largo plazo.

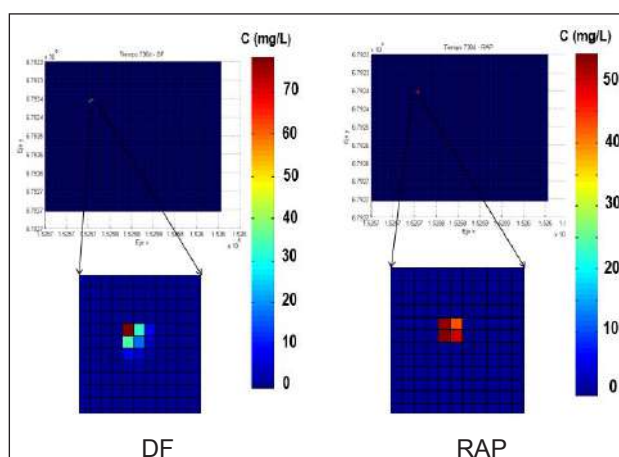


Figura 6. Plumitas de contaminante simuladas por DF (izquierda) y RAP (derecha) considerando sólo el término advectivo, para un tiempo de simulación de 2 años

4.3. Simulación del componente dispersivo

En la Figura 7a se muestran las plumas de contaminantes simuladas en un tiempo de 2 años, para los esquemas propuestos (DF y RAP), con la parametrización dada por el escenario 2 y considerando únicamente el término dispersivo en la simulación. Se observa mayor avance de la pluma mediante el esquema RAP ya que las concentraciones obtenidas en el bloque de descarga son mucho mayores con el esquema DF (70 mg/L) que con el RAP (22 mg/L).

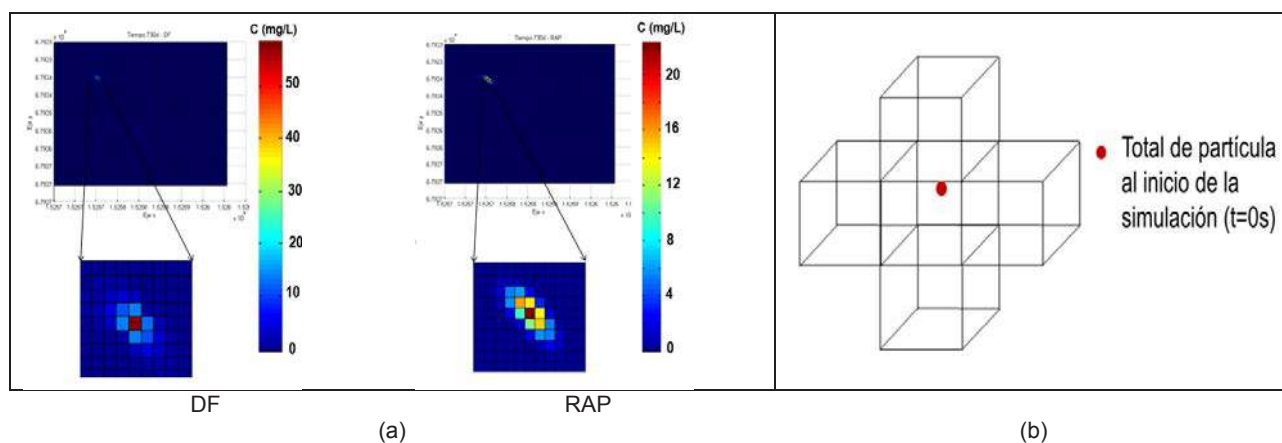


Figura 7. (a) Plumitas de contaminante simuladas por DF y RAP considerando sólo el término dispersivo, para un tiempo de simulación de 2 años. **(b)** Distribución inicial de las partículas en la simulación mediante el RAP para el componente dispersivo

Al comparar las simulaciones efectuadas considerando sólo el término dispersivo en diferentes tiempos, se ha encontrado que los resultados obtenidos en el bloque de descarga mediante los esquemas de resolución considerados exhiben un desfase espacio-temporal. Por ejemplo, mientras se encuentra una concentración simulada mediante el

RAP de 171.05 mg/L a los 5 días, una concentración similar para el esquema DF (177.12 mg/L) se reporta en un tiempo de 30 días. Lo anterior hace pensar que las concentraciones mantienen los órdenes de magnitud, pero que los desfases de éstas dentro de la pluma del contaminante son ocasionados por el esquema de solución del mecanismo de transporte

por dispersión en el RAP, y particularmente por la distribución inicial uniforme de las partículas que se asume dentro del bloque de descarga (Figura 5, izquierda). De acuerdo con esto, varias partículas situadas cerca de las interfaces del bloque de descarga podrían avanzar prontamente desde ésta hacia uno de los aledaños por efecto del término aleatorio involucrado en la expresión matemática del RAP, con lo cual se produciría un aumento artificial de las concentraciones en éstos bloques adyacentes. Teniendo en cuenta lo anterior, se modificó la distribución inicial de las partículas en el bloque de descarga, considerando que ellas se ubican en el centro de dicho bloque (Figura 7b).

4.4. Simulación considerando entrada del contaminante en el centro del bloque

En la Figura 8a se muestran las plumas de contaminante simuladas por las DF y el RAP, considerando nuevamente los términos de advección y dispersión; al tiempo que se implementa la nueva localización de las partículas en el centro del bloque de descarga en el tiempo inicial. El tiempo total de simulación fue de 2 años. En dichos resultados se observa una configuración de forma asimétrica de las concentraciones obtenidas para ambos esquemas

de resolución. Las concentraciones registradas en el bloque de descarga para el esquema de las DF son 194 mg/L, 184 mg/L, 171 mg/L, 135 mg/L, 94.61 mg/L, 50.23 mg/L y 20.35 mg/L para los tiempos de simulación 5, 15, 30, 90, 180, 365, y 720 días, respectivamente. Similarmente, para el esquema del RAP se registran concentraciones de 200 mg/L, 198 mg/L, 183 mg/L, 126.3 mg/L, 82 mg/L, 47 mg/L y 22.25 mg/L, en el bloque de descarga para los mismos tiempos de simulación. Teniendo como referencia de tendencia las concentraciones obtenidas mediante las DF, se puede concluir que la simulación mediante el esquema RAP es adecuada, dado que se presentan valores muy similares. Al respecto, la Figura 8b reporta los errores absolutos de las simulaciones obtenidas por el RAP, con respecto a las concentraciones calculadas mediante las DF. Las diferencias de concentraciones para los tiempos de simulación de 5, 15, 30, 90, 180, 365, y 720 días, en el bloque de descarga son de 5.6 mg/L, 14.30 mg/L, 12.71 mg/L, 9 mg/L, 12 mg/L, 2 mg/L, 1.89 mg/L, respectivamente. Para el resto de los bloques los errores son menores a los 4 mg/L, lo cual confirma que la implementación del código variando la distribución inicial de las partículas es adecuada para obtener tendencias de concentraciones similares a las simuladas mediante las DF.

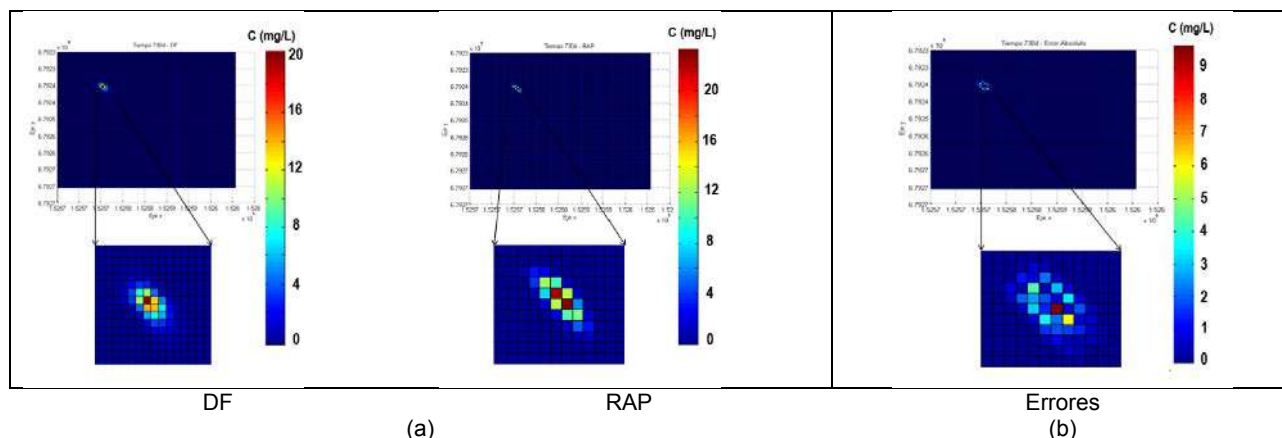


Figura 8. (a) Plumitas de contaminante simuladas por DF y RAP con partículas desde el centro de bloque inicial, considerando los términos de advección y dispersión, para un tiempo de simulación de 2 años. **(b)** Errores absolutos de las simulaciones obtenidas por el RAP, con respecto a los modelos por DF de referencia

5. APLICACIÓN DE LA IMPLEMENTACIÓN EN UN MEDIO HETEROGÉNEO

5.1. Área de Estudio

La información considerada en el presente trabajo corresponde a aquella utilizada por Blessent *et al.* (2011), la cual se ha levantado en la isla de Olkiluoto, Finlandia (Figura 9); sitio potencial para disponer residuos nucleares de alta actividad. Allí existe un suelo orgánico de bajo espesor que recubre un material no consolidado de origen principalmente glacial, que contiene en orden de abundancia arena fina, arena y limo. A su vez, este material recubre

un lecho de roca cristalina. Los datos de campo hacen alusión a un medio fracturado, donde las propiedades físicas de la roca madre, la geometría, la extensión y la conectividad de las fracturas fueron caracterizadas a partir de núcleos de perforación, pruebas hidráulicas, estudios geofísicos y datos de los pozos. Las principales zonas de fractura identificadas tienen una transmisividad mayor de $1 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ y una extensión de varios cientos de metros.

Blessent *et al.* (2011) reportan cinco pozos, KR14, KR15, KR16, KR17 y KR18 (Figura 9c y Figura 9d), espaciados horizontalmente aproximadamente 45 m,

con una profundidad variable entre 130 m y 500 m por debajo de la superficie, a los cuales se les realizan dos series de pruebas de interferencia hidráulica. Los pozos fueron entubados de la siguiente forma: para KR14 una profundidad de 10 m y para KR15-KR18 una profundidad de 40 m, esto para evitar el flujo desde la superficie hacia los pozos de sondeo. Pozos de agua poco profundas fueron perforados al lado de cada uno de los pozos de sondeo KR15-

KR18; las profundidades de los 4 pozos de agua (KR15B a KR18B) son de 45 m y la longitud de la carcasa de la superficie del terreno es de 10 m. Las fracturas de fondo, que tienen una extensión espacial menor que 100 m y una transmisividad inferior a $3 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, fueron identificadas a partir de caudales medidos con la herramienta Flujo de Registro Positivo (Rouhiainen y Pöllänen, 2003) durante las pruebas hidráulicas KR14-KR18.

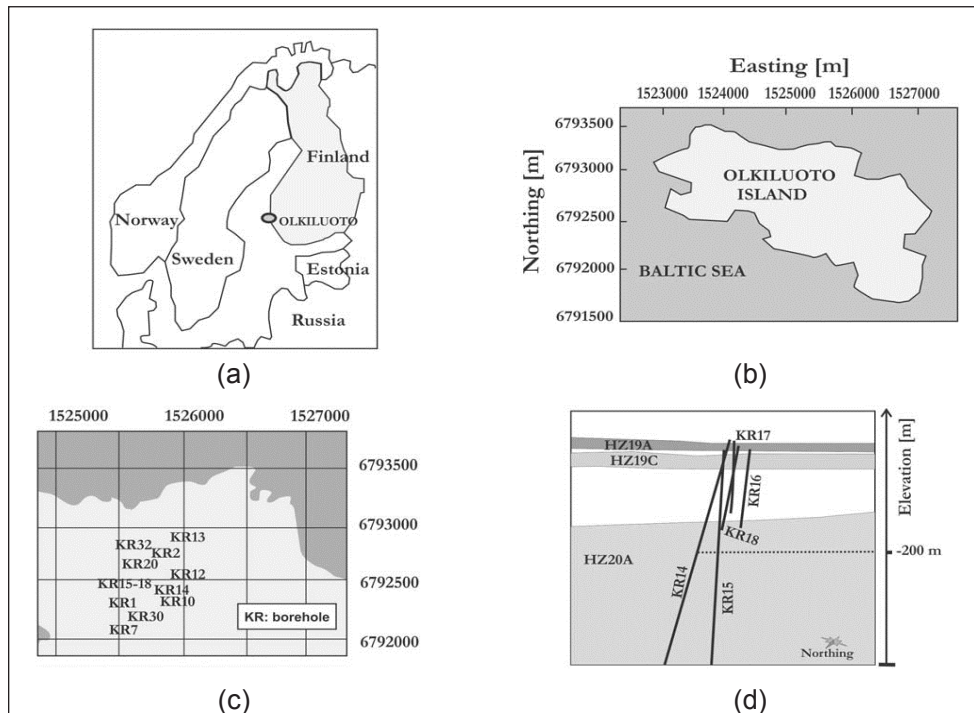


Figura 9. (a) Ubicación isla de Olkiluoto, (b) Área de la isla, (c) Zona de pozos, (d) Corte transversal en la zona de estudio y localización de los estratos y pozos. Tomada de Blessent *et al.* (2011)

5.2. Simulación estocástica de campos de conductividad hidráulica

La aplicación de métodos geoestadísticos para representar la heterogeneidad geológica es una práctica aceptada por la comunidad científica debido a la complejidad natural de las conformaciones geológicas y la escasez de datos medidos en campo. La caracterización de variabilidad que se considera habitualmente en la modelación espacial se basa en la estimación de variogramas indicadores o funciones de covarianza. Sin embargo, la integración de información geológica en direcciones laterales es limitada en dichas caracterizaciones, por lo que no se representan adecuadamente las tendencias espaciales básicas de los conjuntos geológicos. Alternativamente, la metodología de la probabilidad de transición con cadenas de Markov ha sido uno de los métodos desarrollados para representar las variaciones espaciales abruptas de las propiedades hidráulicas del subsuelo (Carle, 1997; Carle y Fogg, 1996; Carle *et al.*, 1998).

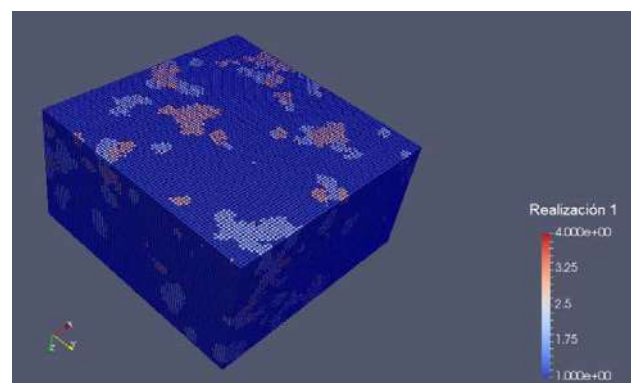


Figura 10. Realización de facies geológicas en el dominio considerado para el ejemplo de simulación en el depósito de residuos nucleares de Olkiluoto, Finlandia

Dadas sus ventajas tanto de índole conceptual como de orden práctico, se ha utilizado un algoritmo

de simulación secuencial que combina el marco conceptual de las probabilidades de transición con las cadenas tridimensionales de Markov para generar distribuciones espaciales de facies con base en los datos levantados en el repositorio de desechos nucleares de la isla de Olkiluoto. En otras palabras, se plantean modelos igualmente probables de facies para un Medio Poroso Equivalente (MPE) a partir de rocas fracturadas. El planteamiento de dichas facies ha requerido la definición de categorías de rocas, las cuales se obtuvieron analizando las conductividades hidráulicas obtenidas en los ensayos de interferencia y registros de densidad de fracturamiento. De acuerdo con lo anterior, los MPE generados por simulación secuencial se componen de las siguientes categorías o facies de roca (Figura 10):

- La roca madre poco fracturada (SFB).
- Lecho de roca escasamente a moderadamente fracturado (SMFB).
- Lecho de roca de moderado a altamente fracturado (MHFB).
- Lecho de roca altamente fracturado (HFB).

5.3 Análisis de resultados

De forma análoga al dominio usado para el ejercicio numérico de validación, en este ejemplo de simulación el dominio espacial del estudio tiene una longitud de 400 m en dirección Norte y Este, y 200 m en dirección vertical, con discretización regular de 5 m en cada dirección. Las conductividades hidráulicas (Tabla 3) fueron establecidas según la facies definida por Blessent *et al.* (2011), y se ha asumido un coeficiente de dispersión molecular de

$1 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, extraído del trabajo de Sánchez (2009). Las dispersividades longitudinal y transversal son de 10 m y 1 m respectivamente, de acuerdo con Blessent *et al.* (2011). El paso de tiempo es de 8640 s y el horizonte de simulación definido es de 33 años, intervalo necesario para poder observar el avance de la pluma del contaminante dado que las conductividades hidráulicas son relativamente bajas (Tabla 2).

Tabla 3. Conductividades hidráulicas (m/s) según las facies del dominio espacial

Facies	Conductividad hidráulica según las facies		
	K_x	K_y	K_z
Facies 1 – SFB	6.34×10^{-8}	3.17×10^{-9}	3.17×10^{-9}
Facies 2 – SMFB	5.77×10^{-7}	5.77×10^{-7}	5.77×10^{-7}
Facies 3 – MHFB	1.37×10^{-6}	1.37×10^{-6}	1.37×10^{-6}
Facies 4 – HFB	8.00×10^{-6}	8.00×10^{-6}	8.00×10^{-6}

Se definieron dos escenarios de simulación con el objetivo de comparar el comportamiento de las plumas de contaminantes y las curvas de llegada en diferentes zonas de descarga. El primer escenario se denomina Zona A y hace referencia a cambios suaves de conductividades (bloque de descarga en la columna 38, fila 26 y capa 3). El segundo escenario, definido como Zona B, hace alusión a cambios abruptos de conductividades (entre $6.64 \times 10^{-8} \text{ m/s}$ a $8.0 \times 10^{-6} \text{ m/s}$), implicando alta heterogeneidad en dicha zona (bloque de descarga en la columna 38, fila 26 y capa 15).

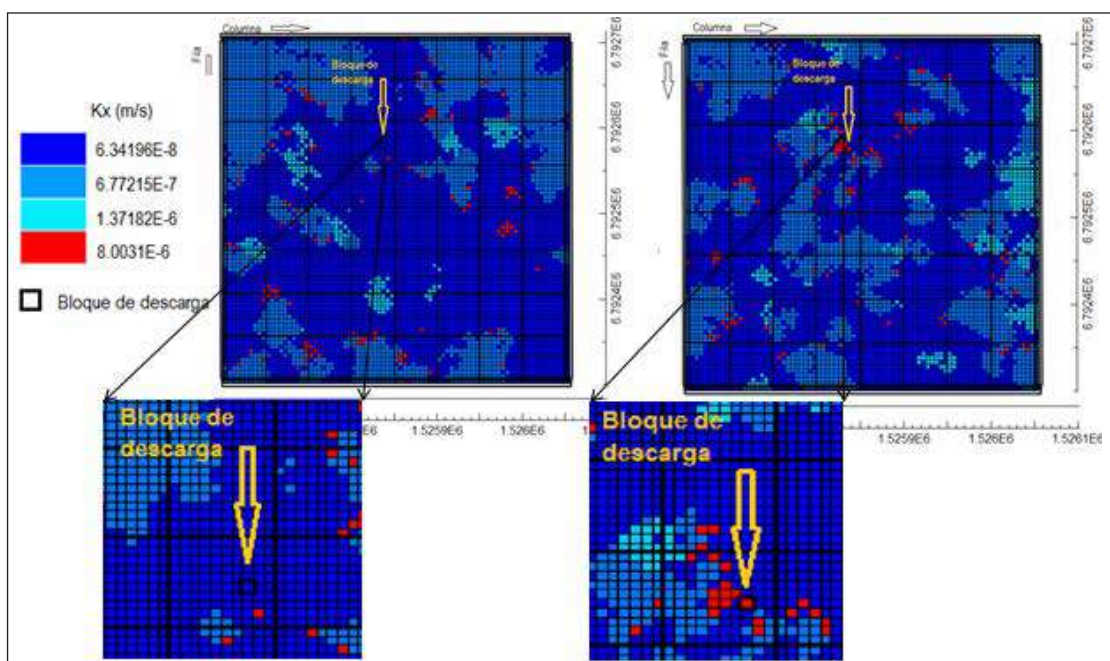


Figura 11. Valores de conductividad hidráulica en el dominio de estudio. Izquierda: escenario Zona A; derecha: escenario Zona B

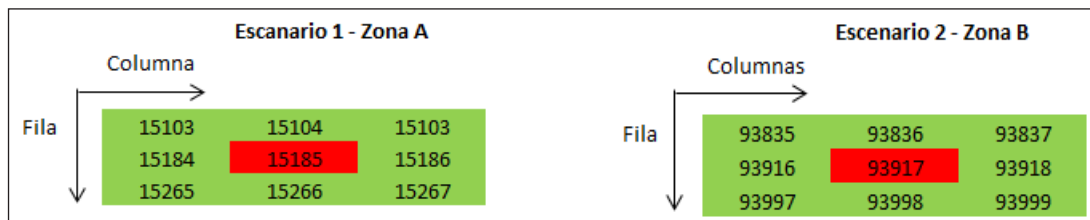


Figura 12. Numeración de los bloques de análisis para los escenarios de Zona A (izquierda) y Zona B (derecha)

En la Figura 11 se representa el contexto espacial de los bloques de descarga para las Zonas A y B (izquierda y derecha, respectivamente). Por su parte, la Figura 12 muestra la convención utilizada para numerar los bloques de interés, para los cuales se presentan los resultados de las diferentes simulaciones del transporte.

La Figura 13 muestra las curvas de llegada simuladas en la zona A para diferentes bloques de interés. La línea de color azul representa el comportamiento de los resultados de simulación mediante las DF, mientras que la línea roja representa lo mismo pero para el RAP. En general, las curvas muestran una tendencia de avance similar entre ambos esquemas de análisis, pese a que en los primeros tiempos de simulación el esquema DF evidencia un cambio

abrupto de concentraciones. Por el contrario, el esquema RAP muestra un avance gradual de la curva hasta alcanzar el tiempo final de modelación. Este comportamiento inicial en la curva obtenida mediante las DF se considera anormal y podría estar asociado a un problema del esquema de resolución de la EDP de transporte para vertimientos puntuales. Ello debido a que las DF implican el planteamiento de sistemas de ecuaciones que involucran a cada uno de los bloques del dominio espacial, con lo cual, al tratar de cumplir con la ecuación de continuidad al inicio de la simulación cuando la mayor parte de la masa a transportar se encuentra en el bloque de descarga, pueden presentarse cambios abruptos de concentración por efectos artificiales de índole numérico.

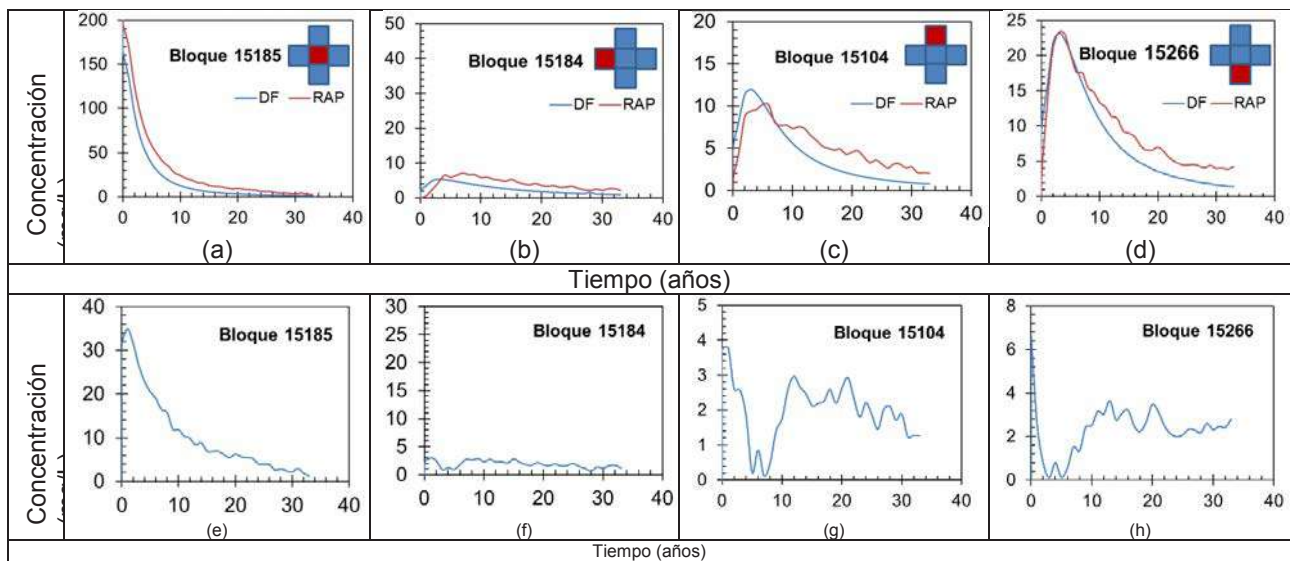


Figura 13. (a)(b)(c)(d) Curvas de llegada obtenidas para las simulaciones en la Zona A (arriba). (e)(f)(g)(h) Errores asociados para las simulaciones por el RAP, con respecto a las obtenidas por las DF (abajo). El bloque analizado es representado en rojo en el esquema de celdas que acompaña las figuras

El esquema DF produce menores concentraciones en el bloque de descarga a lo largo del tiempo de simulación, en comparación con el esquema RAP; diferencias que rondan los 34 mg/L al cabo de un año de simulación. A partir de ese momento, el error comienza a ser más pequeño hasta alcanzar valores menores a los 10 mg/L a partir del año 11 de simulación. Esto evidencia que el RAP es un método numérico estable, y que a grandes tiempos

de simulación disminuye el error con respecto al esquema DF, y por consiguiente se concluye que es una solución adecuada, ya que cumple la tendencia de los resultados. En el bloque 15184 (localizado al oeste del bloque de descarga, Figura 13b) se observan dos fenómenos importantes: (i) no existe un acoplamiento del pico de llegada entre ambas curvas, y (ii) la curva de llegada simulada mediante el RAP presenta fluctuaciones en comparación con

los resultados obtenidos del esquema DF. La primera observación se atribuye a que solo se cuenta con una realización para la trayectoria de las partículas, y debido a su esquema conceptual aleatorio, distintas realizaciones pueden generar, en algunos puntos, una representación ligeramente diferente del transporte del contaminante. La segunda se atribuye a que los cambios de concentración en un bloque pueden ocurrir abruptamente si el componente aleatorio de la solución por el RAP produce un avance dispersivo grande o si las partículas se encuentran muy cerca de los bordes del bloque. Ambos efectos son acumulativos en tiempo y en espacio, y hacen que las disparidades observadas en las curvas de llegada simuladas aumenten a medida que avanza el horizonte de simulación. Las características de transporte antes mencionadas son análogas a lo

que puede producirse en el bloque 15104, ubicado al Norte de la descarga (Figura 13c). La curva de llegada del bloque localizado en dirección Sur del bloque de descarga (bloque 15266, Figura 13d) muestra claramente: (i) el acoplamiento de la concentración al pico de la curva RAP con respecto a la de DF, (ii) la tendencia del esquema DF, el cual registra mayor avance del contaminante, y (iii) se observan fluctuaciones en la curva de concentración del RAP, pero no tan marcadas como en la curva del bloque 15184 (Figura 13b). El acoplamiento se atribuye a que las líneas de corriente apuntan en dirección Suroeste y la componente advectiva del transporte no tiene asociada el término aleatorio, con lo cual se esperan menores diferencias de las concentraciones simuladas y menores fluctuaciones de las mismas en la curva de llegada.

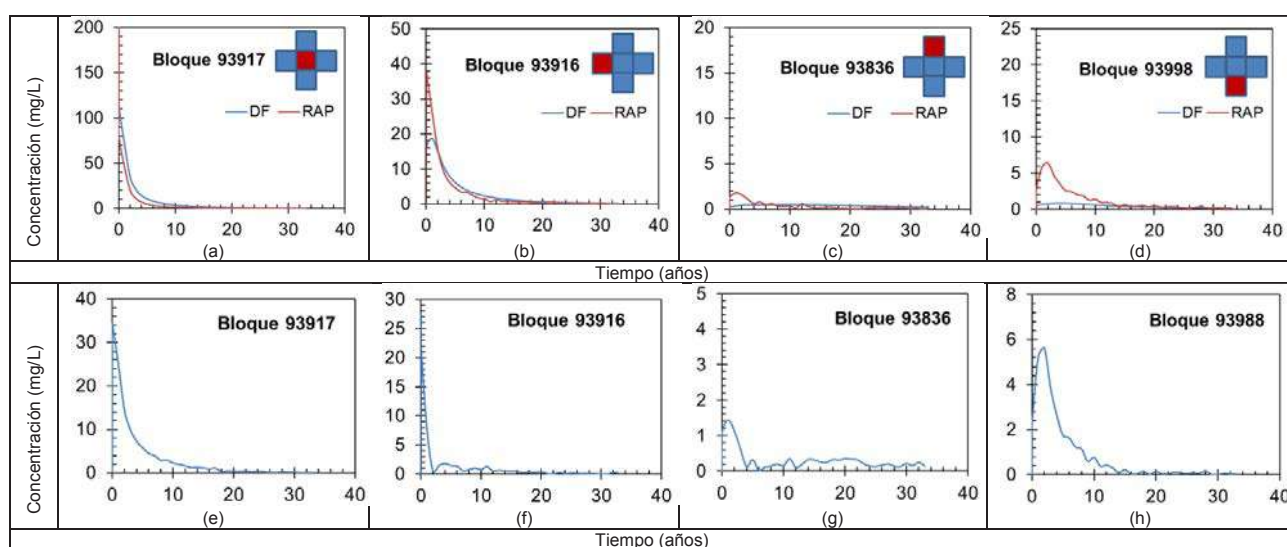


Figura 14. (a)(b)(c)(d) Curvas de llegada obtenidas para las simulaciones en la Zona B (arriba). (e)(f)(g)(h) Errores asociados para las simulaciones por el RAP, con respecto a las obtenidas por las DF (abajo). El bloque analizado es representado en rojo en el esquema de celdas que acompaña las figuras

En la Figura 14 se muestran las curvas de llegada simuladas en la zona B para diferentes bloques de interés, obtenidas por el RAP y las DF. Para estos dos esquemas de resolución de la EDP de transporte, dichas curvas registran un avance sustancialmente rápido en la pluma del contaminante, si se compara con los resultados reportados en la simulación de la zona A. Por ejemplo, de las curvas de la zona B, se observa que se alcanzan concentraciones menores de 50 mg/L en el año 2 de la simulación, mientras de las curvas de la zona A, se puede ver que alcanzan el mismo valor en el año 4 de simulación. Esta distribución espacial de la pluma se considera correcta, puesto que la influencia de la componente advectiva es mayor, conduciendo a que el contaminante salga del bloque de descarga a los 10 años. Análogamente a los demás bloques considerados, la curva de llegada del bloque ubicado al Norte de la descarga (93836, Figura 14c) muestra la tendencia del contaminante a avanzar

más rápidamente mediante el esquema DF. Allí, las concentraciones registradas por ambas metodologías son bastante pequeñas en comparación con los órdenes de magnitud del valor de la concentración inicial descargada (concentraciones entre 0 y 0.5 mg/L). Localmente, estos resultados indican que el proceso de dispersión es menos importante que la advección, dado que las líneas de corriente van en sentido Noreste-Sureste. Al mismo tiempo, para el bloque ubicado en la dirección Sur del bloque de descarga (bloque 93998, Figura 14d) se observan concentraciones mucho más altas para el esquema RAP (6.4 mg/L) al cabo de 2 años, mientras que para el DF los valores no superan una concentración de 1 mg/L. Este comportamiento también se puede asociar al avance más rápido del esquema RAP y a la mayor influencia del componente advectivo por las heterogeneidades locales de las conductividades. Estas características son pobremente representadas mediante las simulaciones por DF.

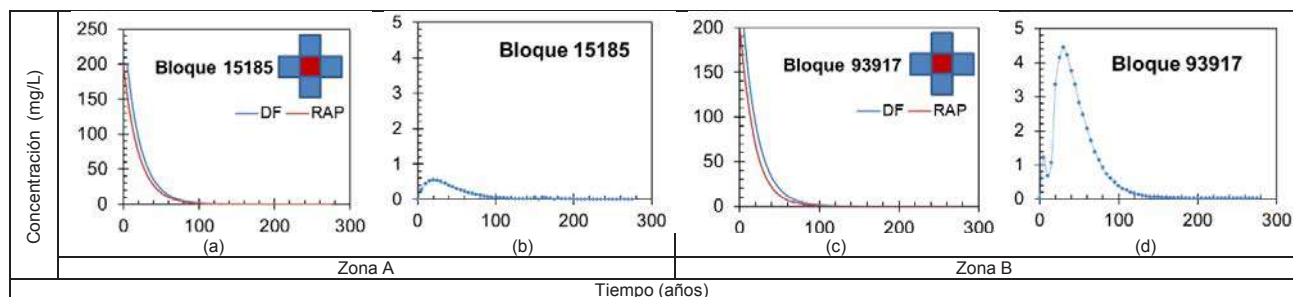


Figura 15. (a) (c) Curvas de llegada simuladas considerando el mecanismo de decaimiento de primer orden del contaminante. (b) (d) errores asociados para las simulaciones por el RAP, con respecto a las obtenidas por las DF

Finalmente, comparando ambas zonas de análisis, se observan concentraciones más bajas en la simulación en la zona B que en la A, lo cual se relaciona con las conductividades hidráulicas observadas en la Zona B, donde los bloques localizados hacia el Norte del bloque de descarga presentan conductividades bajas en comparación con los localizados hacia el Oeste. Debe recordarse que existen diferencias de conductividad de dos órdenes de magnitud entre las dos zonas, lo cual hace que en la Zona A el comportamiento del contaminante no se encuentre influenciado por zonas preferenciales creadas por las diferencias de conductividades hidráulicas, sino que obedece a las direcciones de las líneas de flujo establecidas por la modelación de flujo de agua subterránea, definidas como Noreste-Sureste. La Figura 15 representa el comportamiento del contaminante en el bloque de descarga tanto para la Zona A como para la Zona B, pero considerando el mecanismo de decaimiento de primer orden del contaminante. Se observa que ambos esquemas de simulación presentan un decaimiento del contaminante de forma similar, siendo la diferencia entre las concentraciones simuladas de alrededor de 0.5 mg/L.

5. CONCLUSIONES

Se ha implementado y validado un código tridimensional para resolver la EDP de transporte de contaminantes en medio subterráneo, el cual permite hacer una mayor discretización del dominio de estudio, favoreciendo el análisis a una escala de modelación pequeña y permitiendo el acercamiento a una solución más real de las direcciones preferenciales de un contaminante vertido en el suelo, para así dar respuestas a problemas asociados a las aguas subterráneas, ya sea evaluación de consecuencias debido a la extracción de agua y/o a la descarga de un vertimiento en el suelo (predicción), o definir posibles trayectorias del flujo y del contaminante, así como la estimación del tiempo requerido por el contaminante para salir del acuífero a ser auto-depurado.

La eficacia computacional del método implementado ha quedado demostrada mediante su aplicación en los siguientes casos: (i) en un ejemplo de validación en medio homogéneo, y (ii) en un ejercicio de

análisis en un medio heterogéneo y anisótropo. Así como también se comprobó que la influencia de la heterogeneidad del medio a escala local influye de manera significativa en la dirección de la pluma del contaminante, y por ende, sea ha confirmado que la herramienta tiene un alto potencial en la gestión del recurso hídrico ya que permite evaluar posibles consecuencias de un vertimiento en el suelo, definir la trayectoria de dicho contaminante y estimar el tiempo requerido para que el contaminante salga del acuífero o sea auto-depurado por sí mismo.

Algunas curvas de llegada en los bloques analizados evidencian fluctuaciones en las concentraciones simuladas por el RAP; consecuencia directa del marco conceptual aleatorio de dicha metodología. Ello ocasiona que, en un tiempo dado de la simulación, la partícula atraviese hacia un bloque aledaño y en el siguiente paso de simulación podría regresar nuevamente a la posición en donde se encontraba. Estas oscilaciones se podrían corregir realizando simulaciones de Montecarlo sobre el medio heterogéneo considerado y analizando las tendencias medias de las concentraciones. Fuera de lo anterior, se ha comprobado lo inadecuado de usar las DF para la simulación del transporte puesto que, incluso para el caso más sencillo de medio homogéneo, han mostrado ser inestables numéricamente y arrojar concentraciones artificiales en regiones no afectadas por los procesos de transporte. Esto es consistente con reportes de investigadores previos (LaBolle *et al.*, 1996; LaBolle *et al.*, 2000; Salamon *et al.*, 2006a).

Para terminar, este trabajo presenta una primera aproximación para el desarrollo de un código eficiente de simulación del transporte, donde pueden incluirse en el futuro procesos como decaimientos de orden superior y/o mecanismos de sorción, entre otros.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Aggelopoulos, C. a., & Tsakiroglou, C. D. (2012). Effects of micro-heterogeneity and hydrodynamic dispersion on the dissolution rate of carbon dioxide in water-saturated porous media. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 10, 341–350. <http://doi.org/10.1016/j.ijggc.2012.06.012>

- Anderson, M., & Woessner, W. (1992). *Applied Groundwater modeling*. San Diego, California.
- Bechtold, M., Vanderborght, J., Ippisch, O., & Vereecken, H. (2011). Efficient random walk particle tracking algorithm for advective-dispersive transport in media with discontinuous Dispersion coefficients and water contents. *Water Resources Research*, 47, 1–20. <http://doi.org/10.1029/2010WR010267>
- Blessent, D., Therrien, R., & Lemieux, J. M. (2011). Inverse modeling of hydraulic tests in fractured crystalline rock based on a transition probability geostatistical approach. *Water Resources Research*, (12), 1–19. <http://doi.org/10.1029/2011WR011037>
- Boso, F., Bellin, A., & Dumbser, M. (2013). Numerical simulations of solute transport in highly heterogeneous formations: A comparison of alternative numerical schemes. *Advances in Water Resources*, 52, 178–189. <http://doi.org/10.1016/j.advwatres.2012.08.006>
- Carle, S. (1999). T-PROGS: Transition probability geostatistical software. *University of California, Davis, CA*. Retrieved from <http://gmsdocs.aquaveo.com/t-progs.pdf>
- Carle, S. (2000). Use of a Transition Probability/Markov Approach to Improve Geostatistical Simulation of Facies Architecture. *American Association of Petroleum Geologists (AAPG) Hedberg Symposium: Applied Reservoir Characterization Using Geostatistics*. Retrieved from ftp://geologyftp.gg.uwo.edu/YeZhang/Geosta_Readings/Environmental/TransitionProbability.pdf
- Carle, S. F. (1997). Integration of Geologic Interpretation into Geostatistical Simulation.
- Carle, S. F., & Fogg, G. E. (1996). Transition probability-based indicator geostatistics. *Mathematical Geology*, 28, 453–476. <http://doi.org/10.1007/BF02083656>
- Carle, S. F., Labolle, E. M., Weissmann, G. S., Brocklin, D. Van, & Fogg, G. E. (1998). Conditional Simulation of Hydrofacies Architecture. *Hydrogeologic Models of Sedimentary Aquifers*, 147–170. <http://doi.org/10.2110/sepmcheg.01.147>
- Carle, S., & Fogg, G. (1997). Modeling Spatial Variability with One and Multidimensional Continuous-Lag Markov Chains. *Mathematical Geology*, 29, 891–918. <http://doi.org/10.1023/a:1022303706942>
- Carrera, J. (1993). An overview of uncertainties in modelling groundwater solute transport. *Journal of Contaminant Hydrology*, 13, 23–48. [http://doi.org/10.1016/0169-7722\(93\)90049-X](http://doi.org/10.1016/0169-7722(93)90049-X)
- Cherblanc, F., Ahmadi, A., & Quintard, M. (2007). Two-domain description of solute transport in heterogeneous porous media: Comparison between theoretical predictions and numerical experiments. *Advances in Water Resources*, 3, 1127–1143. <http://doi.org/10.1016/j.advwatres.2006.10.004>
- Fetter, C. W. (2001). *Applied hydrogeology (4th ed.)*. Upper Saddle River, N.J: Prentice Hall.
- Golfier, F., Quintard, M., & Wood, B. D. (2011). Comparison of theory and experiment for solute transport in weakly heterogeneous bimodal porous media. *Advances in Water Resources*, 34, 899–914. <http://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.04.019>
- Hsu, K.-C. (2004). Flow and Solute Transport in Strongly Heterogeneous Porous Media. *Practice Periodical of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste Management*. <http://doi.org/10.1061/~ASCE!1090-025X~2004!8:3~148!>
- Huang, H., Hassan, A. E., & Hu, B. X. (2003). Monte Carlo study of conservative transport in heterogeneous dual-porosity media. *Journal of Hydrology*, (3–4), 229–241. [http://doi.org/10.1016/S0022-1694\(03\)00045-3](http://doi.org/10.1016/S0022-1694(03)00045-3)
- Kinzelbach, W. (1988). The Random Walk Method in pollutant transport simulation, (1), 227–245.
- Kresic, N. (2007). *Hidrogeology and Groundwater modeling (2do ed.)*. CRC Press.
- LaBolle, E. M., Fogg, G. E., & Tompson, a. F. B. (1996). Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media: Local mass-conservation problem and implementation methods. *Water Resources Research*, 32, 583–593. <http://doi.org/10.1029/95WR03528>
- Labolle, E. M., Quastel, J., Fogg, G. E., & Gravner, J. (2000). Differential Equations with Discontinuous Coefficients. *Water Resources Research*, 36, 651–662.
- Li, L., Zhou, H., & Gómez-Hernández, J. (2010). Steady-state saturated groundwater flow modeling with full tensor conductivities using finite differences. *Computers and Geosciences*, 36, 1211–1223. <http://doi.org/10.1016/j.cageo.2010.04.002>
- Lichtner, P. C. (2002). New form of dispersion tensor for axisymmetric porous media with implementation in particle tracking. *Water Resources Research*, 38(8), 1–16. <http://doi.org/10.1029/2000WR000100>
- Martinez, P., Martinez, P., & Castaño, S. (2006). *Fundamentos de Hidrogeología*. Ediciones Mundi-Prensa.
- McDonald, M. G., & Harbaugh, A. W. (1988). *A modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model: Techniques of Water-Resources Investigations of the United States*. United States Government.
- Ospina, S. (2015). *Evaluación de técnicas de acondicionamiento para la solución de la ecuación de flujo subterráneo en medios heterogéneos*. Tesis de Grado. Universidad Nacional de Colombia.
- Pérez, K. A. (2015). *Solución numérica de la ecuación de flujo subterráneo en tres dimensiones, utilizando*

el tensor anisótropo de conductividades para estado transitorio. Tesis de Grado. Universidad de Antioquia.

Rouhiainen, P., & Pöllänen, J. (2003). Hydraulic crosshole interference test at the Olkiluoto site in Eurajoki, boreholes KR14-KR18 and KR15BKR18B. *Work. Rep. 2003-30*.

Salamon, P., Fernández-García, D., & Gómez-Hernández, J. J. (2006a). A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method. *Journal of Contaminant Hydrology*, *87*, 277–305. <http://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2006.05.005>

Salamon, P., Fernández-García, D., & Gómez-Hernández, J. J. (2006b). Modeling mass transfer processes using random walk particle tracking. *Water Resources Research*, *42*, 1–14. <http://doi.org/10.1029/2006WR004927>

Sánchez, L. (2009). Modelación de efectos anómalos del transporte de masa en tanque de laboratorio: Análisis comparativo de la aplicación de distintas metodologías. Tesis de Grado. Universidad Nacional de Colombia.

Sun, N.-Z., & Sun, A. (1996). *Mathematical modeling of groundwater pollution*. Zheng1996: Springer Science & Business Media.

Weissmann, G., Carle, S., & Fogg, G. (1999). Three-dimensional hydrofacies modeling based on soil surveys and transition probability. *Water Resources Research*, *35*, 1761–1770. <http://doi.org/10.1029/1999WR900048>

Zhou, H., Li, L., & Gómez-Hernández, J. J. (2010). Three-dimensional hydraulic conductivity upscaling in groundwater modeling. *Computers and Geosciences*, *36*, 1224–1235. <http://doi.org/10.1016/j.cageo.2010.03.008>