

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA

XI CONGRESO CHILENO

APLICACION DE UN MODELO EULERIANO-LAGRANGIANO DE
TRANSPORTE DE MASAS EN AGUAS SUBTERRANEAS
AL EFECTO DE UN TRANQUE DE RELAVES

GUILLERMO CABRERA F. (1)

FELIX PEREZ S. (1)

EDUARDO MENDEZ V. (2)

En este trabajo se presenta la aplicación de un algoritmo de transporte de masas basado en el enfoque Euleriano-Lagrangiano, para modelar el efecto que produce un tranque de relaves en las aguas subterráneas. En el proceso de calibración se han utilizado análisis químicos de pozos y norias de la zona correspondientes a campañas de terreno realizadas para complementar la información histórica disponible.

Pudo demostrarse que en este tipo de sistemas, además de las filtraciones desde el muro del embalse, existe un efecto importante de las filtraciones producidas a través del lecho del río.

Dado que en esta aplicación no han sido considerados los factores que tienden a atenuar el avance de solutos en suelos finos, tales como la adsorción y el transporte a través de la zona no saturada, los resultados de la predicción del comportamiento de este sistema tienden a sobreestimar las concentraciones a lo largo del tiempo. Para un análisis más realista del proceso, sería conveniente incorporar estos aspectos en la modelación.

(1) Ingeniero Civil y Profesor de Jornada Parcial, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile

(2) Ayudante de Investigación, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

1. INTRODUCCION

El estudio del movimiento e interacción de sustancias en flujos de agua subterránea ha recibido especial atención en los últimos años, puesto que su origen puede representar una fuente de contaminación del recurso hídrico subterráneo. En efecto, el uso excesivo de fertilizantes y pesticidas en la agricultura, la disposición de efluentes industriales y la infiltración de aguas provenientes de relaves de la minería, son algunas de las numerosas fuentes de contaminación posibles.

Con el fin de lograr una efectiva evaluación del efecto de sustancias introducidas natural o artificialmente en el agua subterránea, se requiere modelar matemáticamente el fenómeno correspondiente al transporte de masas en un medio poroso permeable, para lo cual es necesario plantear modelos confiables y flexibles, de manera que sus resultados reflejen lo mejor posible el nivel de alteración que puedan sufrir las aguas bajo diferentes condiciones y a través del tiempo.

El análisis más general del fenómeno debe incluir las reacciones químicas que ocurren entre el soluto, la solución (agua y soluto) y el suelo. Ello, junto con las complejidades de un problema real, hacen que la solución analítica de las ecuaciones que gobiernan el problema resulte prácticamente imposible, siendo más factible su resolución numérica.

La mayor parte de los métodos numéricos convencionales para resolver la ecuación de advección-dispersión pueden ser clasificados en dos grandes categorías, Eulerianos o Lagrangianos, dependiendo del énfasis que se hace en la naturaleza hiperbólica o parabólica de la ecuación de transporte de soluto. Un tercer grupo de métodos de resolución corresponde a los denominados Euleriano-Lagrangianos, los que hacen uso de las ventajas principales que cada uno de los anteriores presenta en la resolución de la ecuación diferencial que gobierna el proceso de transporte.

En el presente trabajo se muestra la aplicación a un caso real de un modelo ya desarrollado y validado con casos teóricos (Espinoza, Cabrera y Andrade, 1992). El problema de aplicación se refiere al estudio del impacto que genera en las aguas subterráneas de una cuenca pequeña ubicada al Sur-Oeste de Santiago el emplazamiento de un tranque de relaves provenientes de la actividad residual de uno de los principales minerales de cobre del país.

2. MÉTODOS DE SOLUCION

Los métodos de tipo Euleriano resuelven la ecuación de transporte utilizando una malla de discretización espacial fija, aplicando un esquema numérico tipo diferencias finitas o elementos finitos fundamentalmente.

Ultimamente se ha tenido la creencia de que una aproximación Euleriana, que típicamente presenta problemas de convergencia, estabilidad y dispersión numérica, especialmente en la zona del frente de la nube de dispersión, puede ser mejorada por medio del uso de técnicas de elementos finitos de alto orden. No obstante, para problemas reales, estas técnicas no son de fácil y factible aplicación, por lo cual su uso es limitado.

De acuerdo con lo anterior se hace interesante examinar los métodos Lagrangianos que se basan en una grilla deformable o en una grilla fija en coordenadas deformables, sobre la cual se resuelve la ecuación, separándose la componente advectiva de la dispersiva. De esta manera, las ecuaciones de elementos finitos se liberan del término advectivo, transformándose en un problema de tipo netamente dispersivo de relativamente buena resolución con cualquier método numérico. Sin embargo, aunque los métodos Lagrangianos son en muchos aspectos más poderosos que las técnicas Eulerianas, ellos sufren de varias limitaciones. En efecto, la existencia de interfases entre zonas de distinta permeabilidad, en las cuales el movimiento de puntos nodales a través de dichas interfases puede causar dificultades en el manejo de los parámetros de la ecuación, especialmente si la adsorción y las reacciones químicas son importantes, es una de sus limitaciones. Dicho movimiento puede conducir a importantes deformaciones de la grilla debido a la refracción de las líneas de corriente entre medios distintos y conduciendo a errores e inestabilidad numérica.

La revisión bibliográfica de los métodos Euleriano-Lagrangianos condujo, en una primera etapa de la investigación al desarrollo de un modelo (Espinoza, Cabrera y Andrade, 1992) validado teóricamente con excelentes resultados y perspectivas para su aplicación práctica, objetivo principal del presente trabajo.

3. MODELO NUMERICO EMPLEADO

3.1 Consideraciones Generales

El esquema numérico consiste, en su componente Lagrangiana, en hacer uso del seguimiento de partículas mediante el método de las características y bajo criterios que permiten obtener la variación de la componente advectiva de la concentración. Posterior a esto, las concentraciones advectivas se proyectan sobre una grilla fija de elementos finitos, con lo cual y mediante un método Euleriano tradicional de tipo residual, se resuelve el problema dispersivo, obteniéndose la concentración final de cada nudo de la grilla en cada intervalo de tiempo.

La ecuación de transporte de masas puede ser desarrollada de tal modo que incluya además de los procesos de advección y dispersión tradicionales, los

efectos de retardo en el transporte del soluto, a través de la adsorción, reacciones químicas, transformaciones biológicas o decaimientos radioactivos. Además de lo anterior, es conveniente extender la ecuación de modo que quede incorporada la posibilidad que existan recargas de soluto, o pozos en los cuales la extracción incluya la presencia de soluto.

Considerando lo anterior, la ecuación de transporte de masas puede ser escrita mediante la siguiente expresión:

$$(1+s) \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c - vc) - \lambda c + q \quad (1)$$

donde ∇ : Operador Gradiente, c : concentración, t : tiempo, D : Tensor de dispersión hidrodinámica; v : vector velocidad del flujo; s : coeficiente de retardo; λ : coeficiente de decaimiento radioactivo; q : concentración del soluto considerado en las fuentes o pozos por unidad de tiempo.

- El factor de retardo se define como:

$$s = \frac{(1-n) \rho_s K_d}{n} \quad (2)$$

donde n : porosidad efectiva del medio; ρ_s : densidad del sólido del medio poroso; K_d : coeficiente de distribución.

- Los parámetros de (1), debe satisfacer, $s \geq 0$ y $\lambda \geq 0$.

La ecuación de transporte de masas (1) puede ser transformada a coordenadas Lagrangianas mediante el uso de la derivada hidrodinámica o derivada material. De acuerdo a esto, se puede reescribir la ecuación en su forma Lagrangiana de esta forma:

$$\frac{dc}{dt} + s \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) - fc + q \quad (3)$$

en que $f = \nabla \cdot v + \lambda$

Para el desarrollo de estas ecuaciones, es conveniente hacer una descomposición de la concentración en términos de la concentración producto del transporte advectivo y del transporte dispersivo, de tal forma, que la concentración total sea igual a la suma de ambas. Para lograr que la concentración advectiva no varíe por procesos dispersivos, se hace nula la derivada material de la concentración advectiva, lo que significa que la concentración de una partícula que es trasladada por la línea de corriente correspondiente, no varía producto de su movimiento. Para resolver el problema advectivo-dispersivo se debe, en primer término, abordar el problema advectivo, para luego de haberlo resuelto, utilizar la ecuación Lagrangiana (3) para la

obtención directa de la concentración total c , considerando los valores ya obtenidos de la concentración advectiva.

3.2 Esquema Numérico

Primeramente se resuelve el problema advectivo, de tal forma, que si en el instante de tiempo t_k ya se conoce la concentración total c , y se desea obtener la concentración en el instante t_{k+1} , se debe hacer las siguientes asignaciones:

$$\bar{c}(x, t_k) = c(x, t_k) \quad y \quad c^0(x, t_k) = 0 \quad (4)$$

Luego se resuelve el problema advectivo propiamente tal, mediante un método de seguimiento de partículas adecuado, para así obtener $c(x, t_{k+1})$. A continuación se resuelve el problema dispersivo, dado por la ecuación (3), para la obtención de la concentración total mediante algún esquema numérico, como por ejemplo el de elementos finitos. Finalmente se vuelve a proyectar estos resultados sobre las partículas que se utilizarán para resolver el problema advectivo del siguiente intervalo de tiempo.

La grilla de elementos finitos tiene elementos triangulares con funciones de interpolación lineales de tal forma que la concentración quede expresada por la siguiente aproximación:

$$c(X, t) = c^N(X, t) = \sum_{j=1}^N \xi_j(X) c_j(t) \quad (5)$$

donde N : número de nodos de la grilla; c_j : concentración del nodo j ; ξ_j : función de interpolación asociada al nudo j .

a) Problema Advectivo

Para el seguimiento de partículas se utilizan dos métodos. En la totalidad de la grilla, se usa el método denominado "Paso único hacia atrás", y en las zonas con fuertes gradientes de concentración (frente de la nube de soluto), en las cuales el "Paso único hacia atrás" es insatisfactorio, se usa un "Seguimiento continuo de partículas hacia adelante", que entrega mejores resultados en esas zonas.

b) Problema Dispersivo

Para el problema dispersivo, se sigue el procedimiento tradicional de hacer uso del método residual de Galerkin acoplado con una malla de elementos finitos (Cabrera y Mariño, 1975). En este caso particular, el operador diferencial que se utiliza corresponde a la ecuación (3).

La aplicación de la metodología conduce a la ecuación matricial que se indica en (6):

$$[A + F + \frac{1}{\Delta t} (W + S)] \{ c^{k+1} \} = Q + \frac{1}{\Delta t} \{ W \{ c^k \} + S \{ c^k \} \} \quad (6)$$

La ecuación (6) proporciona entonces un sistema matricial, el cual al ser resuelto entrega los N valores de la concentración (c^{k+1}) para el instante t_{k+1} . Las matrices A, F, W y S quedan definidas de la siguiente forma:

$$A_{ij} = \int_R D \nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_j dR \quad (7a)$$

$$F_{ij} = \int_R f \xi_i \xi_j dR = \int_R (\nabla \cdot v + \lambda) \xi_i \xi_j dR \quad (7b)$$

$$W_{ij} = \delta_{ij} \int_R \xi_i dR \quad (7c)$$

$$S_{ij} = \delta_{ij} \int_R S \xi_i dR \quad (7d)$$

En lo que respecta al lado derecho de la ecuación (6), los términos quedan expresados como sigue a continuación:

- Q es un vector de rango N, que queda como: $Q_i = \int_R q \xi_i dR$
- c^k es un vector de orden N que contiene los N valores de la concentración total en el instante t_k .
- ${}^k c$ es un vector de orden N que contiene los N valores de la concentración advectiva ${}^k c_j$ del instante t_k .

4. APLICACION EN CASO REAL

4.1 Caracterización de la Zona

El modelo se ha aplicado a una zona de 10 Km de extensión, esquematizada en la figura N°1, en la cual se puede ver la presencia de un embalse de relaves en una garganta del río A, afluente del río B.

Los niveles freáticos naturales en el área se presentan a unos 3 m. de profundidad en el valle del río A y un poco más superficiales en el valle del río B, y varían a lo largo del año, en un rango aproximadamente de 1 m. según las precipitaciones.

El acuífero está compuesto por arenas finas y por algún contenido de material más fino, formación típica de este tipo de cuencas pluviales pequeñas, y tiene una potencia estimada de algunas decenas de metros. La zona del valle del río A tiene una escasa actividad agrícola de riego, pero en el valle del río B ésta adquiere mayor importancia.

En el área de estudio existen norias y sondajes de los cuales algunos fueron escogidos para la utilización del modelo. Se han caracterizado permeabilidades en el rango de 9×10^{-6} m/s y 4×10^{-5} m/s para el valle del río A y entre 3×10^{-5} m/s y 2×10^{-4} m/s en el valle del río B, aguas arriba de la confluencia, mientras que aguas abajo puede llegar hasta 7×10^{-4} m/s y hasta 7×10^{-6} m/s en sectores alejados del lecho del río. El coeficiente de almacenamiento, dado que las napas están en condiciones confinadas y semiconfinadas, se ha estimado que varía entre 0.005 y 0.010.

Para la aplicación del algoritmo desarrollado, se ha escogido el anión sulfato como parámetro de estudio, cuya concentración en las aguas subterráneas naturales en la zona varía entre 5 mg/l y 50 mg/l en ambos valles, presentándose eso sí, más cercanas al valor mínimo en el valle del río A.

4.2 Aplicación a la Zona de Estudio

La metodología para la aplicación del modelo consistió en elegir un sondaje para realizar el ajuste del tensor de dispersión hidrodinámica para después generar concentraciones con el modelo en otros sondajes y norias que fueron muestreados en campañas a terreno. Se ha supuesto inicialmente que el aumento de concentración de solutos en la napa proviene exclusivamente de las filtraciones a través del tranque de relaves.

Se ha escogido así, el sondaje 3 ubicado a 3.200 m. aguas abajo de la confluencia de los ríos A y B, en virtud de que para este sondaje se sumó a la información recogida en terreno, los datos históricos facilitados por la Dirección General de Aguas, según análisis químicos realizados desde el año 1985. Al graficar las concentraciones de sulfatos en este punto en función del tiempo, se puede apreciar en forma clara una tendencia al alza a partir del año 1987, fecha de la puesta en marcha del tranque de relaves.

Sobre la base del aumento del contenido de sulfatos en el agua de este pozo, se determinaron valores para el tensor de dispersión hidrodinámica que incluidos en el modelo reprodujeran o tuviesen un mejor ajuste a las concentraciones analizadas.

Estos valores encontrados a través de pruebas sucesivas en la operación el modelo para intervalos de tiempo de 1 mes, resultaron ser del orden de 2×10^{-4} m²/s para los términos de la diagonal del tensor de dispersión y de 4×10^{-3} m²/s para el resto. Esta calibración corresponde al caso 1 (figura N°2).

Al comparar los valores modelados en los puntos representativos del resto de los sondajes y norias con análisis químicos disponibles (figuras N°4, N°5, N°6 y N°7), se observó que las dispersiones resultaron demasiado altas,

excepto en el sondeo 4 y en la noria 1 (figuras N°6 y N°7 respectivamente), no reproduciendo en ninguno de los casos los rangos de concentraciones de las muestras obtenidas en terreno.

Lo anterior da origen a dos hipótesis posibles. La primera es que la zona en estudio puede tener valores para la dispersión diversificados por sectores notoriamente diferentes, para lo cual se haría necesario una calibración del modelo para cada uno de estos sectores. La segunda se basa en el hecho de que en el transporte de masas en la zona estudiada, pueden también adquirir importancia las filtraciones desde el lecho del río hacia las napas subterráneas, además de las filtraciones desde el embalse propiamente tal. Esta última hipótesis se vería avalada por las altas concentraciones de sulfatos determinadas en diversos puntos a lo largo del río, a través de los análisis químicos realizados y habría sido también puntualizado por profesionales de la Dirección General de Aguas del M.O.P. hace algún tiempo.

Dado que ambos valles tienen formaciones geológicas similares, se trabajó en la calibración del modelo considerando también el efecto de las filtraciones desde el río.

A partir de la estadística de caudales disponible en una estación en el río B, aguas abajo de la confluencia, se determinó el caudal por cada río según el tamaño de las cuencas aportantes. Utilizando la información de estudios previos, se tomó en cuenta una concentración de sulfatos desde el río A, antes del tranque de relaves de 15 mg/l y de 1500 mg/l para el caudal vertido por el tranque, que corresponde a $1.3 \text{ m}^3/\text{s}$, como promedio. La concentración propia del río B, se determinó como el promedio de los valores obtenidos en los muestreos realizados en terreno y correspondió a 48 mg/l.

Efectuando balances de masa, se determinaron las concentraciones en el río A entre el tranque y la confluencia, y en el río B aguas abajo de la misma. Los valores encontrados fueron 1020 mg/l y 601 mg/l, respectivamente. Estos valores son comparables con los obtenidos en terreno como resultado de los análisis químicos efectuados sobre las muestras tomadas superficialmente desde los ríos.

Los ríos A y B fueron representados en la malla a través de los nudos en secuencia cercanos, y los valores de concentración calculados se introdujeron en el modelo imponiendo sobre estos nudos representativos, condiciones de borde del tipo Dirichlet de concentración constante y conocida.

Se procedió a calibrar el modelo en esta nueva situación, que se denominó caso 2, de la misma forma en que se calibró para el caso 1, esto es,

utilizando el sondeaje 3, y los valores encontrados resultaron ser del orden de 1×10^{-5} m²/s para los términos de la diagonal del tensor de dispersión y de 1.5×10^{-4} m²/s para el resto (figura N°3).

Utilizando estos valores para el resto de los sondeos con información disponible se encontró que el modelo reproduce la tendencia de los valores muestreados en otros sondeos y norias (figuras N°4, N°5, N°6 y N°7), exceptuando nuevamente las muestras correspondientes al sondeo 4 (figura N°6), en el cual los valores modelados sobreestiman los de los análisis químicos, al igual que en el caso 1. Esto tiene respuesta dada la gran altura con respecto al lecho del río en la cual se ubica este sondeo, de lo que se puede deducir que no se encuentra afectado ni por las filtraciones desde el embalse, ni por las filtraciones desde el río.

Es posible observar además, que el modelo se comporta en forma estable en cuanto a los valores generados en cualquier sector de la zona estudiada.

Aplicando el modelo para un período de tiempo de 80 años, comparable con el período de vida útil pronosticado para el tranguero, es posible efectuar una predicción en la zona de estudio. Estos resultados pueden apreciarse en las figuras N°8, N°9 y N°10.

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En el presente trabajo se ha utilizado un algoritmo basado en el enfoque Euleriano-Lagrangiano, que supera los problemas de inestabilidad característicos de los enfoques tradicionales, para modelar el transporte de un soluto en una zona ubicada aguas abajo de un embalse de relaves.

La utilización del modelo para este caso hace resaltar su versatilidad en cuanto a su aplicación. Así, este algoritmo resulta recomendable para cualquier tipo de sistemas reales con condiciones de borde bien definidas, sin ofrecer problemas de operación.

En cuanto a este caso particular, ha sido posible establecer que en la zona estudiada, además de considerar las filtraciones desde el muro, es importante tener en cuenta el efecto de las filtraciones desde el lecho del río, tomando en consideración el ajuste que se realizó utilizando los valores de la concentración obtenidos a partir de análisis químicos. Al desprestigiar este efecto, se retarda el aumento de la concentración en el acuífero y el modelo no es capaz de representar en forma satisfactoria los valores de las concentraciones medidas.

Sin embargo, al analizar los resultados obtenidos para la proyección a una situación futura, debe tenerse en cuenta que no fue considerado el efecto de la adsorción (coeficiente de retardación $s=0$). Es recomendable entonces, realizar estudios específicos para la cuantificación del coeficiente s en la zona a modelar y, lo que provocará la atenuación de los efectos observados en esta aplicación, situación que puede ser considerada como más realista.

Es importante mencionar además, que convendría modelar en sentido vertical, considerando así el medio poroso no saturado, ya que de este modo se tendría una mejor representación del problema. Para ello, tendrá gran importancia la información directa de terreno en cuanto a las experiencias con suelos tanto en laboratorio como en terreno, en que se analiza el comportamiento de solutos mediante pruebas de infiltración.

En este sentido, un modelo de transporte de masas en medios no saturados siguiendo la aproximación Euleriana-Lagrangiana ha sido ya validado teóricamente (Matthey, Cabrera y Pérez, 1993).

6. AGRADECIMIENTOS

Los autores desean expresar sus agradecimientos al Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico que financió esta investigación, a través del proyecto 1241/91.

7. BIBLIOGRAFIA

- Cabrera G. y M.A. Mariño, 1975. A finite element model of contaminant movement in groundwater, Water Resources Bulletin, AWRA. Vol. 12, pp. 317-335.
- Espinoza C., Cabrera G. y H. Andrade, 1992. Modelo Euleriano-Lagrangiano aplicado al transporte de masas en flujos de aguas subterráneas. XV Congreso Latinoamericano de Hidráulica, AIH. Cartagena, Colombia. Vol. 1, pp. 563-573.
- Matthey M., Cabrera G. y F. Pérez, 1993. Modelo Euleriano-Lagrangiano de transporte de masas en flujos de aguas subterráneas no-saturados. Publicación CRH 93-83-I. Centro de Recursos Hidráulicos, Universidad de Chile.

FIGURA N°1
ESQUEMA DEL SISTEMA ESTUDIADO

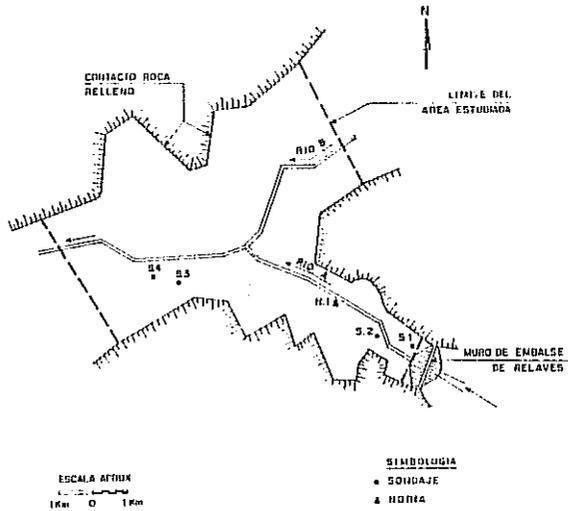


FIGURA N°2
 CALIBRACION CON SONDAJE 3 EN CASO 1

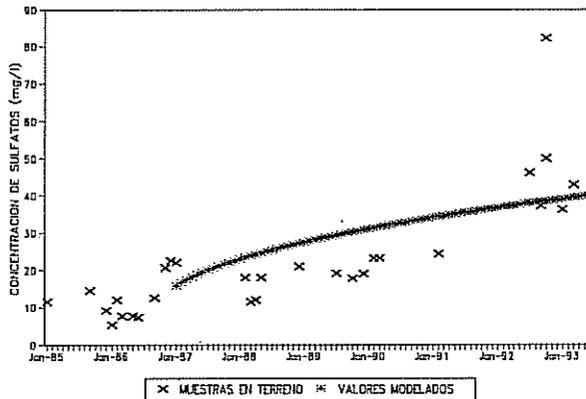


FIGURA Nº 3
CALIBRACION CON SONDAJE 3 EN CASO 2

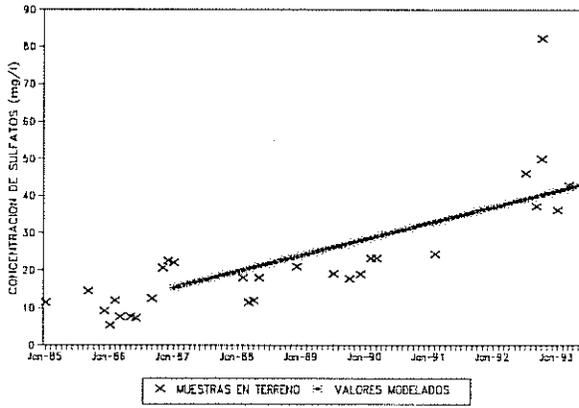


FIGURA Nº 4
SONDAJE 1

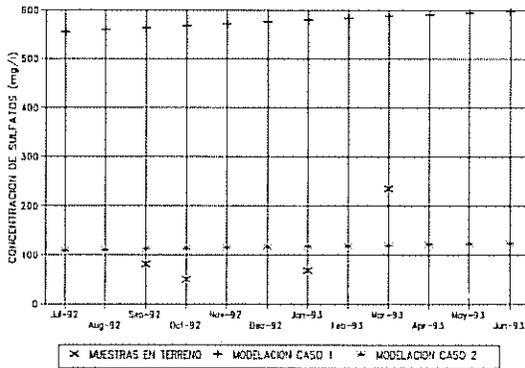


FIGURA Nº 5
SONDAJE 2

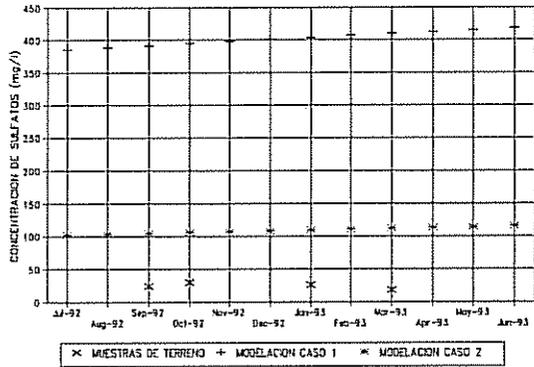


FIGURA Nº 6
SONDAJE 4

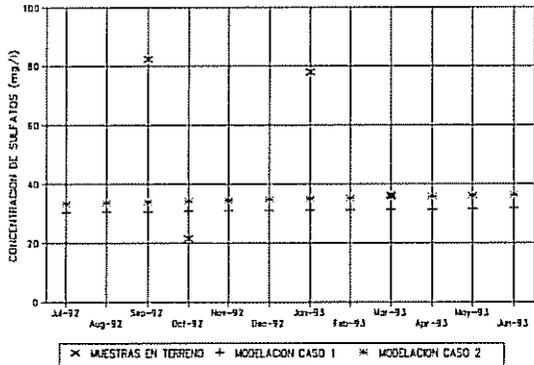


FIGURA Nº 7
NORIA 1

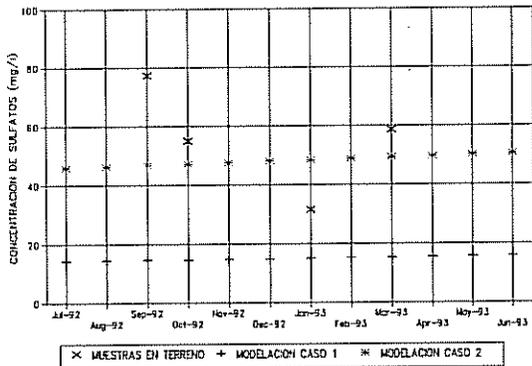


FIGURA Nº 8
PROYECCION FUTURA EN SONDAJE I

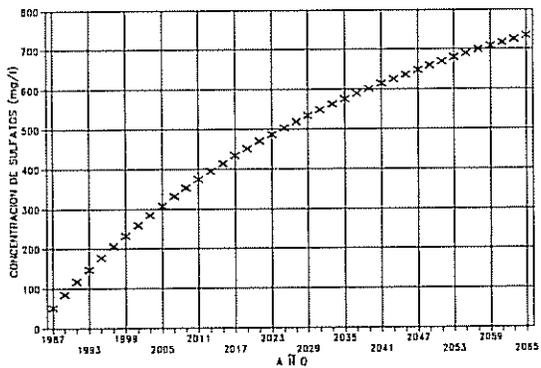


FIGURA Nº 9
PROYECCION FUTURA EN SONDAJE 3

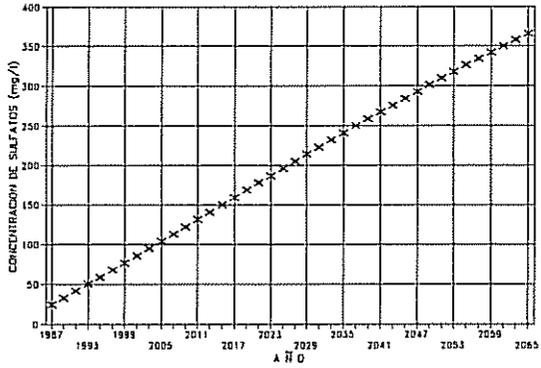


FIGURA Nº 10
PROYECCION FUTURA EN NORIA 1

