

RESUMEN

En las últimas décadas, se ha estudiado el uso de la ecuación de advección-dispersión (ADE), llegándose a demostrar que la aplicabilidad de la misma representa pobremente la simulación de medios porosos altamente heterogéneos. La deficiencia de la ADE para simular el transporte de solutos de manera eficiente puede ser atribuida un creciente número de evidencias de que el transporte dispersivo no puede ser representado por la Ley de Fick (especialmente en los primeros tiempos de llegada). Una explicación plausible para muchas de las anomalías del movimiento de solutos en aguas subterráneas no representadas apropiadamente por la ADE, es posiblemente el no describir de forma adecuada la alta variabilidad espacial de los parámetros del flujo y el transporte.

El objetivo de este documento es la aplicación de distintas metodologías de simulación para tratar de reproducir los efectos anómalos del transporte de contaminantes observado en un tanque de laboratorio. Para ello se realizó un análisis comparativo de los resultados obtenidos con un modelo Lagrangiano utiliza la técnica de las trayectorias aleatorias de partículas (Random Walk Particle Tracking) y los resultados obtenidos con el modelo MT3D utilizando un esquema Euleriano para la resolución del término advectivo de la ecuación de transporte, frente a los datos del medio estimados a partir de ensayos de laboratorio. Esto permite tratar de delinear una explicación plausible de las anomalías del transporte de masa a través de una adecuada caracterización de los parámetros del medio. Una de las metodologías aplicada en este trabajo es una técnica de modelación inversa estocástica con condicionamiento a datos de flujo, transporte e información secundaria. Esta metodología simula campos de transmisividad condicionados a medidas piezométricas y de concentración procedentes de ensayos de trazadores, adoptando cualquier modelo de función aleatoria, es decir, no requiere asumir la clásica hipótesis de multigaussianeidad, mediante las funciones de densidad acumuladas condicionadas (ccdf's) en cada celda de la discretización.

La estructura del interior del tanque fue inspirada en la configuración de un medio natural con alta heterogeneidad, tomando los datos de la conductividad hidráulica del llamado MADE site. La heterogeneidad de los campos de la conductividad hidráulica del tanque se ve favorecida por el uso de un modelo no multigaussiano para obtener reproducciones realistas en el transporte de masa, observándose una propagación anómala del penacho de trazador con altas concentraciones cerca de la zona de

inyección y una larga cola de bajas concentraciones extendiéndose lejos de la zona de inyección de trazador.

Una de las contribuciones del presente trabajo es la puesta a punto del programa informático para la reproducción del transporte de masa del tanque, a través de la aplicación de un modelo inverso estocástico a una fuente disponible de datos exhaustiva de las características del tanque. Los resultados obtenidos en este trabajo demuestran la gran potencia que tiene esta herramienta informática para tratar la incertidumbre en la heterogeneidad del medio, como así también la importancia que tiene el trabajar con una fuente de datos exhaustiva con grandes potenciales investigativos para el estudio de los fenómenos anómalos en el comportamiento del transporte a escala de laboratorio para poder aplicar y desarrollar metodologías que permitan reproducir el transporte de contaminantes a escala de campo, en donde la información disponible de las características del medio es limitada. Otro de las grandes contribuciones del trabajo a nivel personal y profesional es el aprendizaje de varias herramientas informáticas que fueron necesarias para el desarrollo del mismo, herramientas como el MATLAB utilizadas para el pre y post-procesamiento de los datos. Como así también los conocimientos adquiridos en el desarrollo del análisis geoestadístico de la variabilidad y correlación espacial del medio a través del programa GSLIB y por último la importancia que tiene la experiencia adquirida de cara a resolver los problemas que se presentan en la modelación del flujo y transporte subterráneo.

ABSTRAC

In recent decades, the use of the advection-dispersion equation (ADE) was being study, and it was demonstrate that the applicability of this equation poorly represent de the simulations of highly heterogeneous porous media. The weakness of the ADE to simulate the transport of solutes can be efficiently allocated to an increasing number of evidences that dispersive transport cannot be represented by Fick's law (especially in the early arrival times). A plausible explanation for many of the anomalies of the solute movement in groundwater is not properly represented by the ADE, possibly it does not describe adequately the high spacial variability of the flow and transport parameters.

The aim of this paper is to apply different simulation methodologies to try to reproduce the effects of anomalous transport of pollutants observed in a laboratory tank. This analysis was performed comparing the results obtain by a Lagrangian model using the Random Walk Particle Tracking Method and the results obtained with the MT3D model using an Eulerian scheme for solving the advective term of transport equation comparing with the estimated media's data form laboratory test. This lets us to try to outline a plausible explanation for the anomalies of the mass transport through and adequate description of the medium parameters. One of the methodologies applied in this paper is a technique of stochastic inverse modeling conditioning to flow and concentration's data and secondary information. This methodology simulates transmissivity fields conditioned to piezométricas and concentration measures from tracer tests, adopting any y random function model, ie does not require assuming the classical multi-gaussian hypothesis, by the conditional cumulative density function (CCDF's) in each discretization cell.

The internal tank structure was inspired by the configuration of a highly heterogeneous aquifer, taking the hydraulic conductivity data of the MADE site. The heterogeneity of the hydraulic conductivity fields is facilitated by the use of a non multi-gaussian model to obtain realistic reproductions of mass transport, observing an anomalous propagation of the tracer plume with high concentrations near the injection site and a long tail of low concentrations ranging far from the injection of tracer.

One contribution of this work is the implementation of the program to reproduce the mass transport in the tank, through the application of a stochastic inverse model to a exhaustive source of data on the tank's characteristics of the tank. The results obtained

in this work demonstrate the great potential of this tool for dealing with the heterogeneity uncertainty of the medium, as well as the importance of working with a exhaustive data source with great potential for research and study of anomalous transport behavior at laboratory scale to implement and develop methodologies able to reproduce the transport of pollutants at the field scale, where the available information on the characteristics of the medium is limited. Other contributions at personal and professional level of this work is the achievements of learning several informatics tools that were necessary for to its develop, tools like MATLAB used for the pre-and post-processing of data. As well as the knowledge gained through the development of geostatistical analysis of variability and spatial correlation of the medium through GSLIB software and finally the importance of the gained experience to face and solve the problems that arise modeling flow and transport groundwater.

RESUM

En les últimes dècades, s'ha estudiat l'ús de l'equació d'advecció-dispersió (ADE), arribant-se a demostrar que l'aplicabilitat de la mateixa representa pobrament la simulació de mitjans porosos altament heterogenis. La deficiència de l'ADIU per a simular el transport de soluts de manera eficient pot ser atribuïda un creixent nombre d'evidències que el transport dispersiu no pot ser representat per la Llei de Fick (especialment en els primers temps de llegada). Una explicació plausible per a moltes de les anomalies del moviment de soluts en aigües subterrànies no representades apropiadament per l'ADIU, és possiblement el no descriure de forma adequada l'alta variabilitat espacial dels paràmetres del flux i el transport. L'objectiu d'este document és l'aplicació de distintes metodologies de simulació per a tractar de reproduir els efectes anòmals del transport de contaminants observat en un tanc de laboratori. Per a això es va realitzar una anàlisi comparativa dels resultats obtinguts amb un model Lagrangiano utilitza la tècnica de les trajectòries aleatòries de partícules (Random Walk Particle Tracking) i els resultats obtinguts amb el model MT3D utilitzant un esquema Euleriano per a la resolució del terme advection de l'equació de transport, enfront de les dades del mig estimats a partir d'assajos de laboratori. Açò permet tractar de delinear una explicació plausible de les anomalies del transport de massa a través d'una adequada caracterització dels paràmetres del mig. Una de les metodologies aplicada en este treball és una tècnica de modelació inversa estocàstica amb condicionament a dades de flux, transport i informació secundària. Esta metodologia simula camps de transmissivitat condicionats a mesures piezomètriques i de concentració procedents d'assajos de traçadors, adoptant qualsevol model de funció aleatòria, és a dir, no requereix assumir la clàssica hipòtesi de multigaussianidad, per mitjà de les funcions de densitat acumulades condicionades (ccdf's) en cada cel·la de la discretització. L'estructura de l'interior del tanc va ser inspirada en la configuració d'un medi natural amb alta heterogeneïtat, prenent les dades de la conductivitat hidràulica del cridat MADE site. L'heterogeneïtat dels camps de la conductivitat hidràulica del tanc es veu afavorida per l'ús d'un model no multigaussiano per a obtindre reproduccions realistes en el transport de massa, observant-se una propagació anòmala del plomall de traçador amb altes concentracions prop de la zona d'injecció i una llarga cua de baixes concentracions estenent-se lluny de la zona d'injecció de traçador. Una de les contribucions del present treball és la posada al punt del programa informàtic per a la reproducció del transport de

massa del tanc, a través de l'aplicació d'un model invers estocàstic a una font disponible de dades exhaustives de les característiques del tanc. Els resultats obtinguts en este treball demostren la gran potència que té esta ferramenta informàtica per a tractar la incertesa en l'heterogeneïtat del mig, com així també la importància que té el treballar amb una font de dades exhaustives amb grans potencials investigatius per a l'estudi dels fenòmens anòmals en el comportament del transport a escala de laboratori per a poder aplicar i desenrotllar metodologies que permeten reproduir el transport de contaminants a escala de camp, on la informació disponible de les característiques del mig és limitada. Un altre de les grans contribucions del treball a nivell personal i professional és l'aprenentatge de diverses ferramentes informàtiques que van ser necessàries per al desenrotllament del mateix, ferramentes com el MATLAB utilitzades per al pre i post-processament de les dades. Com així també els coneixements adquirits en el desenrotllament de l'anàlisi geoestadística de la variabilitat i correlació espacial del mig a través del programa GSLIB i finalment la importància que té l'experiència adquirida de cara a resoldre els problemes que es presenten en la modelació del flux i transport subterrani."