

MT3DS: Transporte de solutos dentro de Visual Modflow¹

Modelos de transporte

El transporte de una sustancia (normalmente un contaminante) arrastrada por el flujo subterráneo implica una serie de procesos complejos que se muestran abreviadamente en el tema "Transporte de contaminantes".

El cálculo de un problema concreto puede realizarse manualmente para un caso muy simplificado. El estudio de un caso real requiere la utilización de un modelo de ordenador. Un modelo de transporte debe ejecutarse junto con un modelo de flujo (generalmente MODFLOW). Primero actúa el modelo de flujo para establecer la estructura tridimensional del flujo subterráneo y su evolución temporal, si trabajamos en régimen variable. Una vez conocido el flujo, el modelo de transporte efectúa sus propios cálculos.

En Visual Modflow (versión 4.2)² podemos elegir entre los siguientes modelos de transporte: MT3D, MT3DMS, RT3D y PHT3D.

El modelo más extendido es MT3D, creado en 1990, y que a partir de 1998 se denominó MT3DMS. Inicialmente se desarrolló con el apoyo de la E.P.A. (U.S. Environmental Protection Agency) y actualmente es mantenido por la Universidad de Alabama (<http://hydro.geo.ua.edu/mt3d/>).

RT3D. (<http://bioprocess.pnnl.gov/>) Modelo de transporte reactivo multi-especies.

PHT3D (<http://www.pht3d.org/>) Modelo de transporte reactivo multicomponentes en medio saturado. Incluye MT3DMS y PHREEQC-2 (modelización de reacciones químicas).

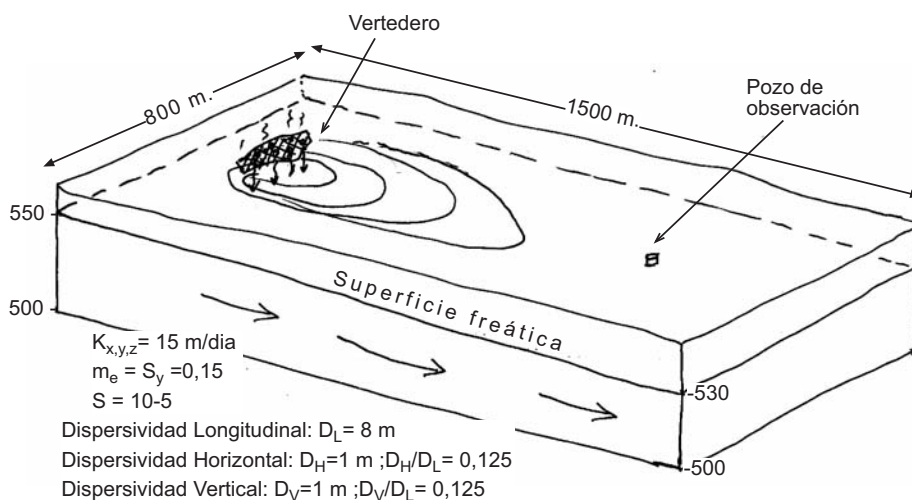
Todos estos modelos son de dominio público (gratuitos). Pueden utilizarse acoplados a las versiones gratuitas de Modflow (la versión oficial del USGS o PMWIN), pero la gratuidad termina si los utilizamos dentro de software comercial: Visual Modflow o PMWIN Pro.

Ejemplo práctico

El hilo conductor de este documento va a ser el ejemplo que se plantea a continuación.

Explicaremos las sucesivas fases de trabajo y al final llegaremos a obtener la solución.

En la zona cuyas dimensiones y características hidráulicas se indican en el dibujo



¹ Para seguir este documento se presupone un conocimiento y manejo elementales de Visual Modflow (ver "Manual de Introducción a VISUAL MODFLOW" (http://hidrologia.usal.es/Complementos/manual_modflow.pdf))

² Los ejemplos que siguen y las indicaciones consiguientes se han realizado sobre la versión 4.2. A este nivel, no existen diferencias apreciables con la versión 4.5 (año 2010).

adjunto, existe un vertedero en el que se ha producido durante **100 días** un vertido de una sustancia (no contenida previamente en el terreno) con una concentración de **3000 mg/L**. Deseamos conocer la evolución geográfica de la contaminación en los siguientes 2000 días, y concretamente la evolución de la concentración en el pozo de observación.

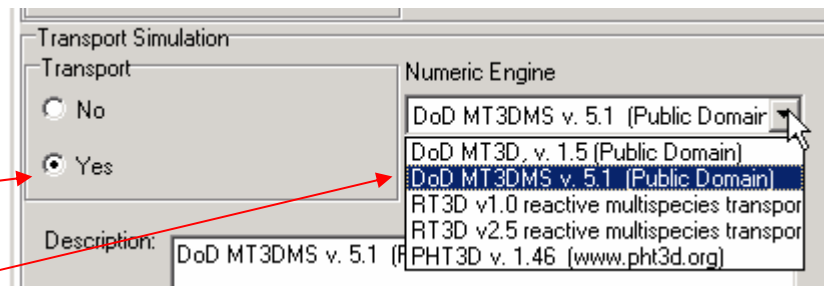
Suponemos que el contaminante no tendrá ninguna interacción con el terreno (ni retardo ni reacciones).

Diseñaremos el modelo con celdas de 25x25 metros.

Pasos iniciales

Recordemos que al crear un nuevo modelo, en Visual Modflow pasábamos por tres cuadros iniciales donde

especificamos las características generales. En este caso, en el primero de estos cuadros, debemos picar en **Transport > Yes** y elegimos el modelo de transporte (MT3DMS):



Antes del siguiente cuadro del modelo general de flujo, como hemos señalado la intención de estudiar el transporte, aparece un nuevo cuadro para que indiquemos las especificaciones básicas del modelo de transporte:

Transport Option

Project Info: ejemplo DoD MT3DMS v. 5.1 (Public Domain)

Default Dispersion Parameters

Parameter Name	Value	Units
Long. Dispersivity	8	m
Horiz./Long. Dispersivity	0.125	
Vert./Long. Dispersivity	0.125	
Diff Coeff	0.000864	m ² /day

Variant Parameters

Variant Title: Variant_1 [Var001]

Description:

Sorption: No sorption simulated Total Number of species: 1

Reaction: No kinetic reactions Number of mobile species: 1

Are the reaction parameters constant or spatially variable? Constant

Species | Model Params | Species Params

Designation	Component Description	Mobile	SCONC((mg/L))
Conc001	Component 001	yes	0

New Species Delete Species

Aquí debemos incluir valores que se aplicarán a todo el volumen del modelo creado:

- Dispersividad longitudinal

- Dispersividad horizontal y vertical, expresadas en relación con el valor de la longitudinal (distingue estas dos dentro de la dispersividad lateral)

- Coeficiente de difusión molecular ³

(En el cuadro anterior se aprecia que hemos escrito los valores de estos coeficientes correspondientes al problema planteado)

Y generamos un *Variant* : un paquete de indicaciones para que MT3D efectúe los cálculos. Podemos equipar un modelo con varios *Variant* y posteriormente ejecutar el modelo con uno u otro. En cada *Variant* indicamos (ver el cuadro anterior):

- Si existirá algún tipo de retención de los contaminantes en el terreno (Sorption)
- Si queremos que se simule alguna reacción (Reaction).
- Número y nombre de los componentes en disolución
- Si hemos indicado algún tipo de Sorption o de Reaction, introduciremos los parámetros correspondientes.

Después pasamos por los dos cuadros siguientes, ya conocidos de Visual Modflow, (valores “por defecto” de los parámetros hidráulicos y número de filas, columnas, etc...) y finalmente aparece la cuadrícula en la pantalla.

Hemos comentado cómo generar el modelo desde cero, pero si deseamos **añadir el modelo de transporte a un modelo de flujo realizado con anterioridad**, el cuadro Transport Option comentado más arriba se obtiene en el escenario **Main Menu**, menú Setup >> Edit engines.

La misma operación debe realizarse si queremos añadir un nuevo *Variant* a un modelo de transporte ya elaborado.

Input

Independientemente de los datos propios del modelo de transporte, creamos un **modelo de flujo** de una *layer* , 1500x800 metros, 60 columnas x 32 filas, y con los parámetros hidráulicos indicados en el ejemplo expuesto anteriormente.

Para generar el gradiente natural que presenta la superficie freática (ver el dibujo) situamos a la izquierda una línea de nivel constante a 550 m. y otra a la derecha con nivel constante a 530 metros.

Esto último es una simplificación, pero no es correcto si vamos a ejecutar el modelo en régimen variable, ya que en el instante inicial la superficie freática va a ser horizontal, y con estos parámetros tardará un cierto tiempo en adquirir la pendiente deseada. Para hacerlo correctamente, habría que especificar como niveles iniciales una superficie inclinada.

Los datos que tenemos que introducir para el **modelo de transporte** son los siguientes:

Menú Properties: Initial concentration

Mediante Assign window (área rectangular) o polygon (áreas irregulares) podemos indicar concentraciones existentes en el terreno previamente a la introducción del contaminante y

³ No sé si requiere el coeficiente de difusión del líquido (cuando NO está en un medio poroso) o al coeficiente de difusión *efectiva*, que tiene en cuenta la porosidad. Ver fórmulas (3) a (5) del tema *Transporte de contaminantes*. Spongo que es éste último.

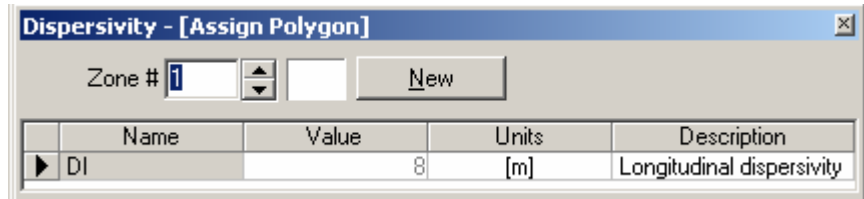
la ejecución del modelo. En este ejemplo esto no es necesario, ya que el terreno no contiene esa sustancia previamente a la contaminación.

Menú Properties: Bulk density

Densidad aparente, la densidad correspondiente a un volumen seco de terreno incluyendo minerales y poros. Esto sólo es necesario cuando en el *Variant* hayamos indicado algún tipo de retardo (Sorption). Para el cálculo del coeficiente de retardo se precisa la densidad. (En este ejemplo, no se utiliza).

Menú Properties: Dispersion

En el cuadro inicial habíamos especificado el coeficiente de **dispersividad longitudinal** para todo el modelo. Aquí marcaríamos (mediante Assign window o Assign polygon) capas o zonas concretas con valores de dispersividad diferentes de esos valores generales.

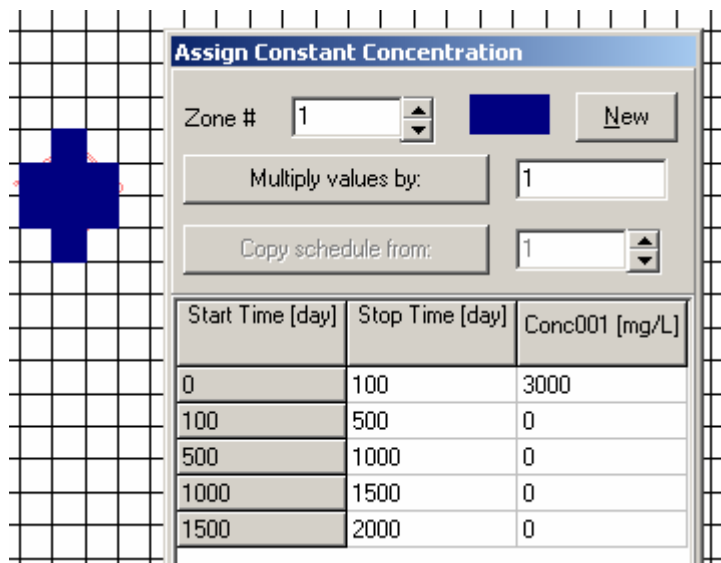


Si necesitamos variar la dispersividad horizontal o vertical, usar el botón Layer options.

Menú Boundaries: Constant concentration

Aquí aplicaremos el contaminante sobre la superficie freática.

Assign > Polygon (marcamos la situación y extensión del vertedero que genera la contaminación). Rellenamos la tabla como se indica en la figura: los primeros 100 días concentración 3000 mg/L, y después 0. Para que aparezca la fila siguiente en la tabla de valores, tecla Retorno o Intro. Los intervalos elegidos (500, 1000, ...) son para que en los resultados veamos los resultados en esos momentos.



Menú Boundaries: Point source

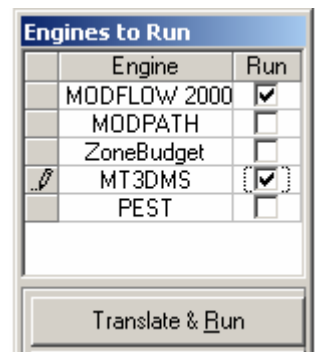
Esto se usa si el origen de la contaminación se asocia a elementos de flujo del modelo (un pozo, un río, una línea de nivel constante, ...). Si se trata de una balsa o lago de agua contaminada, primero definimos un polígono como Constant Head Boundary (nivel constante) y después a esa misma área le aplicamos este comando Point source con la concentración deseada. Análogamente si se trata de un río o de un pozo de inyección de líquidos.

Menú Wells: Conc. observation well

Situamos un sondeo de observación para registrar la concentración. El procedimiento es idéntico al de un piezómetro de observación de niveles

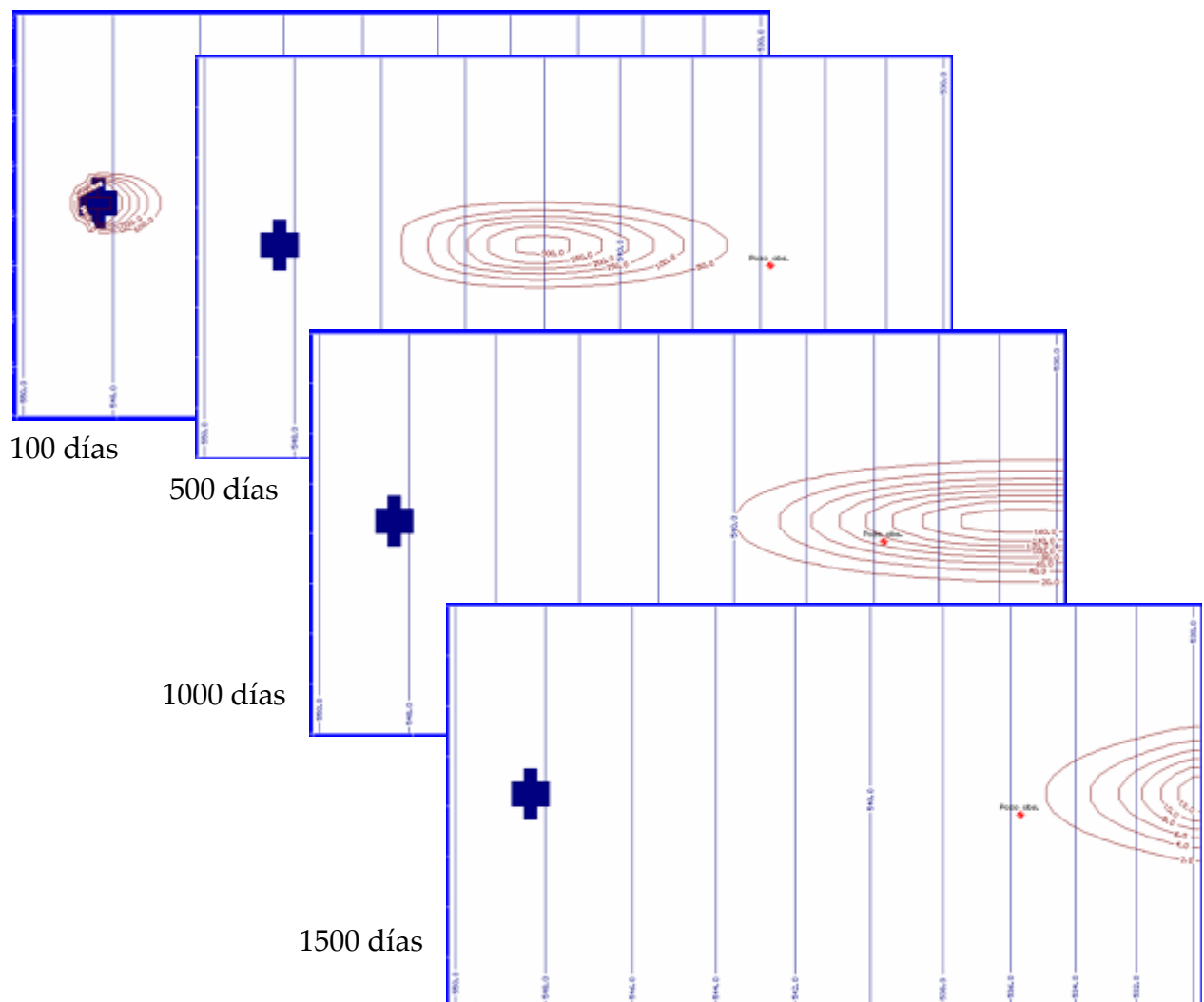
Run

Pasando por Main menu, elegimos Run, y en ese escenario picamos en el menu Run. En el pequeño cuadro que aparece, debemos marcar MODFLW2000 y MT3DMS y finalmente Translate & Run :



Output

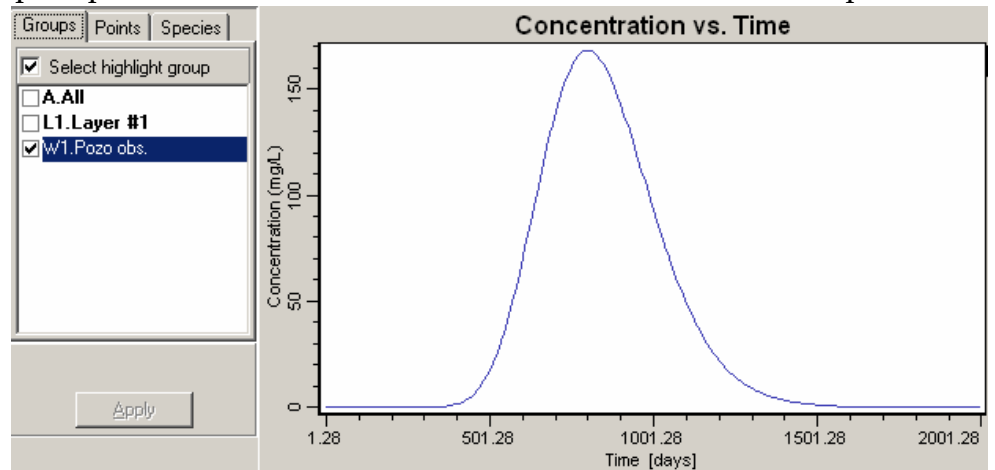
Maps >> Contouring >> Concentrations. Aparecen las isolíneas de concentración para el primer incremento de tiempo (100 días). Picando a la izquierda en el botón Time > Next, aparecerán las isolíneas en los tiempos que habíamos indicado: 500, 1000 y 2000 días.



Las líneas verticales son las isopiezas, y el pozo de observación en estas figuras reducidas aparece como un pequeño punto rojo a la derecha

En las cuatro imágenes anteriores, apreciamos cómo la nube de contaminante atraviesa el pozo de observación, pero para ver la evolución de las concentraciones en ese pozo:

Menú Graphs >>
Time series >>
Concentration. En la columna izquierda marcamos el pozo de observación, y abajo Apply. Aparece el siguiente gráfico:

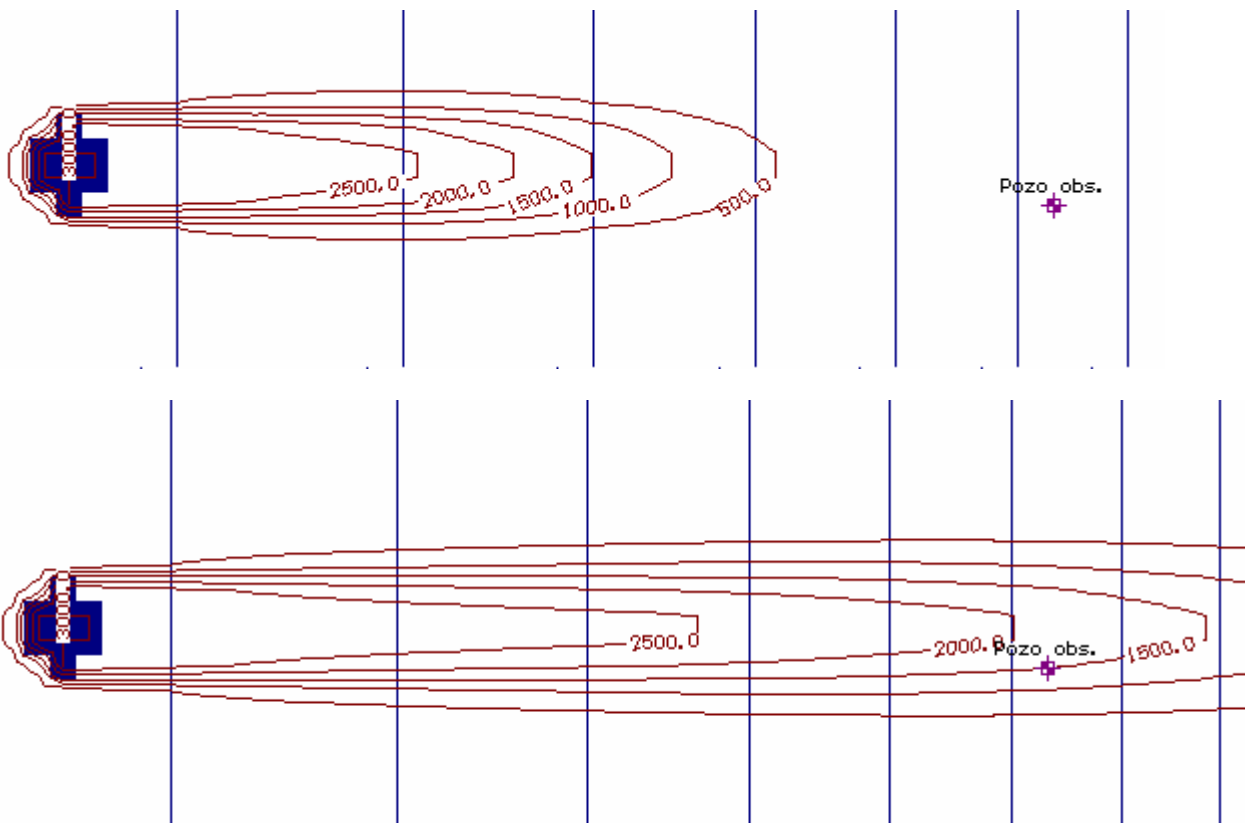


Vertido continuo

Para simular una fuente continua de contaminante, en la tabla de Constant concentration: rellenamos el valor 3000 mg/L (el asignado al contaminante) a lo largo de todo el periodo de modelización:

Start Time [day]	Stop Time [day]	Conc001 [mg/L]
0	100	3000
100	500	3000
500	1000	3000
1000	1500	3000
1500	2000	3000

Tras ejecutar el modelo, observamos la "pluma" generada a los 500 y a los 1000 días



En este caso, la variación de concentraciones en el pozo de observación va aumentando hasta alcanzar el máximo:

(Ver la figura 6 del tema *Transporte de contaminantes*)

