

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE TRANSPORTE Y DIFUSIÓN DE CONTAMINANTES EN SUELOS NO SATURADOS.

Marcelo Álvarez, Fernando Quintana
Comisión Nacional de Energía Atómica
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas
Centro Atómico Bariloche. (8400) Argentina

Marcelo Véneré
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional del Centro. Tandil. Bs.As.

RESUMEN

Se presenta una simulación numérica para estudiar el transporte y difusión de contaminantes solubles en agua en suelos saturados y no saturados. La ley de Darcy con condiciones de borde apropiadas, proporciona la altura hidráulica h en el dominio, utilizándose el modelo de van Genuchten para calcular la humedad y la conductividad hidráulica. El campo de velocidades se calcula como el gradiente de h y se lo convierte en C^0 mediante técnicas de recuperación del gradiente. Se empleó un algoritmo de Picard para resolver las no linealidades en el cálculo de la conductividad hidráulica y en el coeficiente de retardo. El sistema que resulta de cada iteración se resuelve por gradientes conjugados cuadrados con un preconditionamiento del tipo factorización incompleta LU. Para la aproximación del problema de transporte y difusión de contaminantes se utiliza un algoritmo adecuado para problemas de advección-difusión. Se propone en este trabajo un tratamiento especial de los transitorios con una cuidadosa aproximación de la derivada temporal usando un esquema de Crank Nicholson con extrapolación de Richardson, lo que ha permitido implementar un procedimiento adaptativo para el incremento de tiempo.

Para la discretización espacial se utilizan mallas no estructuradas de triángulos de tres nodos. Las derivadas espaciales se calculan utilizando los algoritmos estabilizados SGS y SUPG para tener en cuenta el término advectivo.

Palabras clave: Elementos finitos. Transporte y difusión de contaminantes. Suelos no saturados.

ABSTRACT

A numerical model to study contaminant transport and diffusion in unsaturated soils is presented. Darcy's Law together with appropriate boundary conditions gives hydraulic head h in the whole domain. Van Genuchten model is used to predict water retention and hydraulic conductivity. Using a gradient recovery technique the velocity field is computed as the gradient of h and then transport and diffusion of pollutants is approximated with a convection-diffusion algorithm. Non-linearities in hydraulic conductivity and retardation coefficient are treated with a Picard algorithm and the resulting system for each iteration is solved using a conjugate gradient algorithm with an incomplete LU factorization. A detailed treatment of transients with a careful approximation of the temporal derivative using a three step Crank Nicholson scheme and a Richardson extrapolation is performed. An automatic time step adaptive procedure has been also developed.

Unstructured meshes of linear three node triangles were used. Spatial derivatives were approximated using the stabilized algorithms SGS and SUPG to account for the advective term.

Keywords: Finite Elements. Contaminants transport and diffusion. Non saturated soils.

FLUJO EN MEDIO SATURADO

Una buena aproximación para calcular el flujo de agua en un medio poroso lo da la ley de Darcy (1856). A pesar de ser una ley empírica, es de amplia utilización debido a sus resultados satisfactorios. Dicha ley expresa que el caudal por unidad de área, q , también llamado velocidad de Darcy, es proporcional al gradiente de altura hidráulica:

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{Q}}{A} = -\mathbf{K} \cdot \nabla h \quad \mathbf{q}_i = -K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (1)$$

donde \mathbf{Q} es el caudal volumétrico, A el área transversal atravesada, \mathbf{K} es la conductividad hidráulica, representada por un tensor, y h es la altura piezométrica. La ley de Darcy es en sí una ecuación de *conservación de momento*, ya que liga la velocidad (\mathbf{q}) con la fuerza impulsora (h).

La ley de Darcy es válida siempre y cuando el flujo sea *laminar* (una justificación cualitativa es considerar a los poros como canales de sección constante y un flujo desarrollado). En el caso de flujos de agua subterráneas, el flujo casi siempre está en este régimen. En materiales con una baja conductividad hidráulica existe un valor de gradiente umbral necesario para dar lugar al flujo. A pesar de esto, se demuestra experimentalmente la validez de esta ley, aunque de forma macroscópica; por lo tanto los parámetros y variables se interpretarán como promedios sobre un elemento de volumen representativo. La ley de Darcy no establecerá la trayectoria de las partículas a través de los poros, pero sí, el camino macroscópico. La altura piezométrica se define a partir de la ecuación de Bernoulli⁵ como:

$$h = h_e + h_p + h_v \quad (2)$$

donde: $h_e = z$ (altura de elevación) $h_p = \frac{p}{\rho g}$ (altura de presión) $h_v = \frac{v^2}{g}$ (altura de velocidad) siendo ρ

la densidad del fluido, g la aceleración de la gravedad, z el nivel respecto de una línea de referencia, p la presión y v la velocidad del fluido. En los problemas de flujos subterráneos la altura de velocidad es despreciable frente a las otros dos, por lo que no se la considera en las aplicaciones.

La conductividad hidráulica es función del medio poroso y del fluido. Debido a posibles anisotropías del medio se lo representa tensorialmente:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K & 0 & 0 \\ 0 & K & 0 \\ 0 & 0 & K \end{bmatrix} \quad (\text{isotrópico}) \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{no - isotrópico}) \quad (3)$$

Este parámetro se puede expresar en función de propiedades del fluido y del medio poroso:

$$K_{ij} = \frac{k_{ij} \rho g}{\mu} \quad (4)$$

donde μ es la viscosidad dinámica del fluido y \mathbf{k} es tensor de permeabilidad intrínseca del medio, independiente del fluido. La conductividad hidráulica, toma valores en una amplia escala, desde 1×10^{-11} m/s para ciertas arcillas hasta 1×10^{-3} m/s para grava y solo puede ser estimada dentro del orden de magnitud. La velocidad de Darcy representa el caudal promedio que atraviesa la unidad de superficie. Para conocer la velocidad promedio del fluido se debe tener en cuenta la *porosidad*, que se define en un volumen elemental como el cociente entre el volumen de poros y el volumen total. En realidad se debe considerar una porosidad efectiva que tiene en cuenta sólo los poros interconectados (poros no interconectados no serán atravesados por el fluido y por ende no intervienen en la determinación del flujo). En ambientes naturales se encuentran porosidades en el rango de 20% a 70%. Este parámetro permite calcular la velocidad media de filtración del fluido, V :

$$V = \frac{q}{\theta_o} \quad (5)$$

donde θ_o es la porosidad efectiva.

Teniendo en cuenta la ley de Darcy para el flujo en un medio poroso y considerando el balance de masa en un volumen diferencial se tiene la siguiente expresión para el flujo no estacionario para un acuífero saturado:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + q_s \quad S_s = \rho g [(1 - \theta_o) \alpha + \theta_o \beta] \quad (6)$$

donde q_s es una fuente (o sumidero) que representa, por ejemplo, la presencia de una bomba; S_s es el almacenamiento específico, que expresa el cambio de masa ante un cambio de presión, y α y β son las compresibilidad de la matriz sólida (donde intervienen los poros no interconectados) y del agua, respectivamente.

En las ecuaciones precedentes el término temporal depende de un factor relacionado con la capacidad de almacenamiento de agua del acuífero. En condiciones de no-confinamiento, esta capacidad está relacionada con el volumen de agua que drena de los poros saturados a medida que el nivel de agua desciende. Por otro lado, en un acuífero confinado todos los poros están llenos de agua y por lo tanto la capacidad del acuífero estará determinada por las compresibilidades del agua y del medio poroso.

FLUJO EN MEDIO NO SATURADO

Las ecuaciones y relaciones presentadas son válidas para la zona saturada en la cual todos los poros interconectados están llenos de agua. En la zona no saturada la conductividad hidráulica es sensiblemente dependiente del contenido de humedad. Se define la humedad como la relación entre el volumen de agua y el volumen total de un cierto elemento de volumen. Cuando el medio no contiene humedad, la conductividad se anula, ya que el gradiente de presión impulsa a llenar los poros y no a producir un flujo neto. En estas condiciones se deben buscar correlaciones que ligen la conductividad hidráulica con el grado de humedad y la altura de presión.

MODELO NUMÉRICO

La ecuación que describe el flujo en un medio poroso parcialmente saturado, la Ecuación de Richards, se obtiene combinando la ley de Darcy (1) con la ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + q_s \quad (7)$$

donde θ es la cantidad de agua por unidad de volumen del medio poroso (o grado de humedad), h es la altura piezométrica y \mathbf{K} es el tensor de permeabilidad hidráulica.

La humedad θ se puede escribir como $\theta = \phi S_w$ donde ϕ es la *porosidad* definida como el volumen de vacíos por unidad de volumen de medio poroso y S_w es el *grado de saturación* o volumen de agua por unidad de volumen de poros. Reemplazando en (7) desarrollando el término de la izquierda:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial(\phi S_w)}{\partial t} = \left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial h} + S_w \frac{\partial \phi}{\partial h} \right) \frac{\partial h}{\partial t} \quad (8)$$

Es decir, la variación del contenido de agua en el medio poroso se produce por variación en el grado de saturación y por variación de el volumen de poros, debidos ambos a un cambio en las fuerzas actuantes sobre el medio (∂h).

Cuando el medio está cercano a la saturación, el primer sumando se va acercando a cero, haciéndose cero en el momento de la saturación. En este caso la ecuación de Richards resulta:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + q_s \quad (9)$$

donde $S_s = \frac{\partial \phi}{\partial h}$ es el llamado coeficiente de almacenamiento específico que se considera constante y la ecuación resulta lineal. En el caso que el suelo esté no saturado la ecuación se reduce a :

$$\left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial h} + S_w S_s \right) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + q_s \quad (10)$$

y es altamente no lineal debido a la dependencia tanto de S_w como de \mathbf{K} con h .

Las relaciones constitutivas que dan la dependencia con h tanto de S_w como de \mathbf{K} son expresiones empíricas obtenidas a partir de ajustes con datos observados. Uno de los modelos más usados es el de Van Genuchten^{16,17} que puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\theta(h_p) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) [1 + \beta]^{-m} \quad \text{para } h_p \leq 0 \quad (11)$$

$$\theta(h_p) = \theta_s \quad \text{para } h_p \geq 0$$

$$K(h_p) = K_s (1 + \beta)^{-5m/2} [(1 + \beta)^m - \beta^m]^{-2} \quad \text{para } h_p \leq 0 \quad (12)$$

$$K(h_p) = K_s \quad \text{para } h_p \geq 0$$

donde h_p es la altura de presión, θ_r es la humedad residual, θ_s es la humedad de saturación (que es igual a la porosidad antes definida), $\beta \equiv (h_p / \psi_s)^n$, donde ψ_s es el potencial de capilaridad que mide la altura que sube la columna de agua debido a este fenómeno y n es un parámetro de ajuste. En este modelo $m = 1 - 1/n$. Por último K_s es la conductividad del medio saturado, antes definida.

De aquí se obtiene el coeficiente no lineal que multiplica al término temporal ya que $\phi \frac{\partial S_w}{\partial h} = \frac{\partial \theta}{\partial h}$ también llamado capacidad específica.

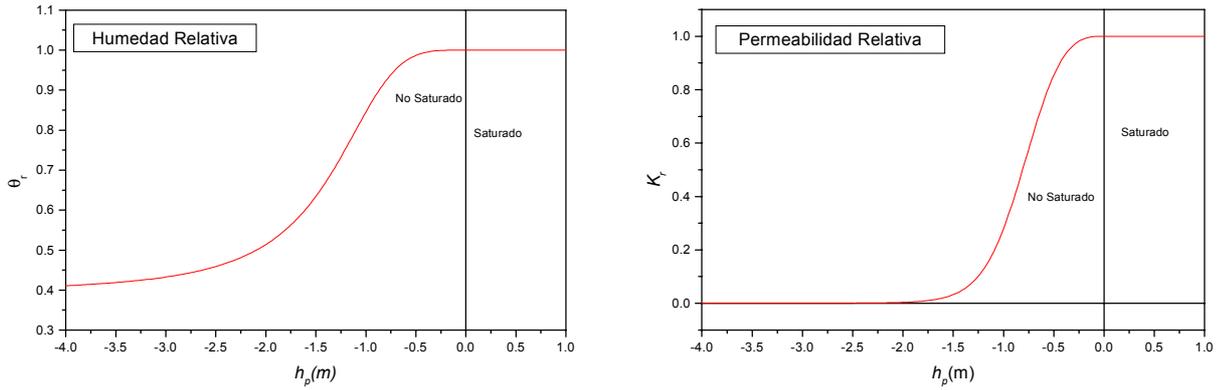


Figura 1a: Humedad y Permeabilidad relativas como función de la altura para el modelo de van Genutchen

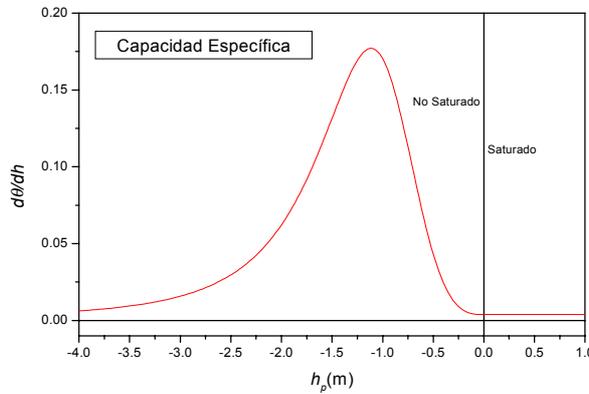


Figura 1b: Capacidad específica en función de la altura para el modelo de van Genutchen

La forma funcional de estas correlaciones se pueden observar en las figuras 1a y 1b. Si bien las presiones negativas aparecen por capilaridad, y la altura que el fluido puede ascender por capilaridad es variable, del orden de centímetros para grava hasta metros para limo, vemos que el modelo adoptado y, en general en todos los que se usan para el medio no saturado, admiten presiones relativas menores que -1 atm, lo cual supondría presiones absolutas menores que cero, lo que es físicamente un absurdo. En realidad lo que se representa en la curva Presión relativa vs Humedad, es la suma de fuerzas actuantes sobre el fluido para unas condiciones dadas de humedad. Para humedades muy bajas, entran en juego fuerzas de origen electroquímico, además de las capilares, que se oponen a la pérdida de humedad. Puede pensarse respecto a la presión en el suelo alejándose de la tabla de agua en dirección ascendente, que la suma de fuerzas que se oponen al drenaje, de cualquier origen, para condiciones de equilibrio o flujo nulo, van aumentando en la misma medida que aumenta z . Lo que ocasiona el flujo entre dos puntos es la diferencia energética entre ellos, que se debe entender en este caso como diferencia en el nivel piezométrico h , que se calcula como: $h = \frac{p}{\rho g} + z$, siendo p la suma de fuerzas actuantes sobre el fluido por unidad de área, ρ la densidad del fluido, g la aceleración de la gravedad y z la altura del punto en cuestión sobre un nivel de referencia.

Como se ha dicho, p no debe interpretarse como la presión hidráulica clásica, sino como una sumatoria de fuerzas por unidad de superficie, de origen diverso (eléctrico, capilar, químico etc).

TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

Los fenómenos que gobiernan el transporte y difusión de contaminantes en suelos pueden ser agrupados en procesos de flujo, mecánicos, químicos y biológicos. La naturaleza orgánica o inorgánica del contaminante, su solubilidad en agua e interacción contaminante-suelo (procesos de retardo-aceleración) son todos fenómenos que juegan roles importantes y no pueden ser ignorados^{1,5,6,7}.

Bajo estas consideraciones, la ecuación general de advección-reacción-difusión puede escribirse:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C \mathbf{V}) + \nabla \cdot (-\mathbf{D} \cdot \nabla C) + R \lambda C = \frac{(q_{in} C_s - q_{out} C + m)}{\theta_0}$$

$$\mathbf{D} = D_d \mathbf{I} + \mathbf{D}_o \quad D_{ij} = D_d \delta_{ij} + \alpha_T |\mathbf{v}| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|} \quad (13)$$

Donde R es un coeficiente de retardo, C es la concentración del contaminante, θ_0 es la porosidad efectiva, D es el coeficiente de dispersión hidrodinámica, λ es el coeficiente de decaimiento o reacción, q_{in} y q_{out} son caudales entrante y saliente con concentraciones C_s y C respectivamente, m es un término de fuente de masa neta que puede representar, por ejemplo, la disolución de una sustancia precipitada en el medio poroso y finalmente α_L y α_T son dispersividades axial y transversal.

Condiciones inicial y de borde

Se especifican condiciones iniciales para la altura hidráulica h para todo el dominio $h(x,t) = h_o(x)$. Las condiciones de borde son la altura hidráulica $h(x,t) = f(x,t)$ en Γ_d (Frontera de Dirichlet) o flujo prescrito

$-(\mathbf{K} \cdot \nabla h) \cdot \mathbf{n} = g(x,t)$ en Γ_n (Frontera de Neumann) donde f y g son funciones definidas en las fronteras Γ_d y Γ_n , respectivamente.

La primera condición es la especificación del nivel de la tabla de agua, mientras que la segunda puede ser –por ejemplo- ingreso de agua por infiltración en la frontera superior (simulando flujo de agua debido a lluvia). Las coordenadas de la tabla de agua darán la frontera superior del dominio saturado. En la frontera inferior se impone una condición de flujo nulo. Sobre los bordes laterales se imponen condiciones de Dirichlet donde h es conocido. Sobre las superficies de simetría se impone una condición de Neumann nula.

La distribución inicial del contaminante $C(x,t) = C_o(x)$ se especifica para resolver la ecuación de transporte. Las condiciones de borde son $C(x,t) = f(x,t)$ en Γ_d , $-(\mathbf{D} \cdot \nabla C) \cdot \mathbf{n} = g(x,t)$ en Γ_{n1} -el flujo difusivo se prescribe sobre las fronteras en las que el flujo saliente de agua transporta el contaminante fuera del dominio- y $-(\mathbf{D} \cdot \nabla C + \mathbf{V}C) \cdot \mathbf{n} = j(x,t)$ en Γ_{n2} es decir se especifica flujo total nulo sobre las superficies de simetría o impermeables donde $f(x,t)$, $g(x,t)$ y $j(x,t)$ son funciones definidas sobre las fronteras Γ_d , Γ_{n1} y Γ_{n2} , respectivamente.

APROXIMACIÓN NUMÉRICA

Forma débil

Para la solución del problema espacial se utilizó el método de elementos finitos. La forma débil del problema proviene de la formulación variacional:

$$\left(\frac{\partial(cu)}{\partial t}, v \right) + a(u,v) = l(v)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(cu)}{\partial t}, v \right) &= \int_{\Omega} \frac{\partial(cu)}{\partial t} v d\Omega \\ a(u, v) &= \int_{\Omega} (\mathbf{k} \nabla u \cdot \nabla v - c \mathbf{V} u \cdot \nabla v + f u v) d\Omega \\ l(v) &= \int_{\Omega} g v d\Omega + \int_{\Gamma_2} \gamma v d\Gamma \end{aligned} \quad (14)$$

donde $a(.,.)$ es una forma bilineal, $l(.)$ es un operador lineal, c es la densidad volumétrica de la variable u , v es la función de peso, \mathbf{k} es el coeficiente de difusión (tensorial), \mathbf{V} es el campo de velocidades, f es el coeficiente de reacción y g es un término de fuente o sumidero. La ecuación está sujeta a las condiciones de contorno ya mencionadas $u=\delta$ en Γ_1 y $(-\mathbf{k} \cdot \nabla u + c \mathbf{V} u) \cdot \mathbf{n} = \gamma$ en Γ_2 con $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$ y $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$, fronteras del dominio. Para el caso transitorio se especifica la condición inicial: $u(\mathbf{x}, t) = u_o(\mathbf{x})$.

En esta formulación, la condición natural es flujo total nulo, asegurando esta elección que el esquema numérico será conservativo. Para reproducir la condición de flujo saliente, sobre la correspondiente frontera, se especificará una condición de flujo difusivo nulo² separando la parte convectiva del flujo total en (14) y trasladándola al primer miembro, modificando entonces la matriz de rigidez del sistema. La discretización de la ecuación (14) escribiendo u y v en una base de elementos finitos conduce al siguiente sistema de ecuaciones.

$$(\mathbf{M} \mathbf{u})' + \mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{B} \quad (15)$$

donde $M_{ji} = (c\phi_i, \phi_j)$, $A_{ji} = a(\phi_i, \phi_j)$ y $B_j = l(\phi_j)$, \mathbf{u} es un vector que contiene los valores nodales de la función escalar u en la base de elementos finitos (ϕ_i), \mathbf{M} y \mathbf{A} son las matrices de masa y de rigidez respectivamente y \mathbf{B} el segundo miembro (RHS).

El dominio será discretizado utilizando triángulos lineales (tetraedros en 3D) y funciones de base lineales. La velocidad será considerada lineal por elementos. Las propiedades de conservación de la masa fueron verificadas en experimentos numéricos.

MÉTODO ESTABILIZADO

El método de Galerkin standard para este problema puede escribirse como:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right) + a(u_h, v_h) - l(v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h \subset W \quad (16)$$

donde el espacio $W = H_0^1(\Omega)$, se considera densidad unitaria, y u_h, v_h son aproximaciones discretas de u y v , respectivamente. Los métodos de estabilización agregan un término sobre el primer miembro de (16). Con modificaciones menores, este término puede escribirse como el producto L^2 –dentro de cada elemento– del residuo y de un operador aplicado a la función de test a través de un parámetro numérico. El término estabilizador será

entonces⁹. $r(u_h, v_h) = \sum_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\Omega_e} \tau_e P(v_h) R(u_h)$ donde τ_e es el tiempo intrínseco de cada elemento, $P(v_h)$ es un

operador aplicado a la función de test y $R(u_h)$ es el residuo. Los métodos SUPG y SGS fueron implementados debido a sus propiedades de conservación. La Tabla 1 muestra los operadores correspondientes a SUPG y SGS¹⁰.

Method	$P(v_h)$
SUPG	$V \cdot \nabla v_h$
SGS	$V \cdot \nabla v_h + \nabla \cdot (k \nabla v_h) - f v_h$

Tabla 1- Operadores de estabilización para SGS y SUPG.

Para resolver el problema espacial, se prefirieron métodos incondicionalmente estables para permitir fuertes densificaciones de malla, mientras que para el sistema resultante de ecuaciones se seleccionó un *solver* iterativo para permitir la solución de problemas con un número de incógnitas de 10^5 o más y para aprovechar la solución en el paso previo en un problema transitorio.

Se implementaron métodos de solución iterativos para matrices no simétricas tales como el método de los gradientes biconjugados (BCG) y gradientes conjugados cuadrados (CGS) con preconditionamiento y factorización incompleta superior-inferior (ILU). También se utilizó un método de residuo mínimo generalizado (GMRES) para sistemas no lineales para comparar resultados. El *CGS* evidenció un menor costo computacional, mientras que *GMRES* mostró una mejor robustez cuando el segundo miembro (RHS) se hace comparativamente pequeño. Sin embargo, sus requerimientos de memoria son importantes y por tanto será usado en los casos que *CGS* falla. Para el tratamiento de las posibles no linealidades se utilizó el algoritmo de Picard.

INTEGRACIÓN TEMPORAL

El sistema (15) se integra un esquema de paso fraccionado basado en la extrapolación de Richardson (RE). La solución al tiempo t_{n+1} puede escribirse como:

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) = \frac{\mathbf{u}_{qh}(t_{n+1}) - q^p \mathbf{u}_h(t_{n+1})}{1 - q^p} + O(\Delta t)^{p+1} \quad (17)$$

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad q = \frac{1}{r}$$

donde \mathbf{u}_h es la solución encontrada usando el esquema de Crank-Nicholson (CN) con incremento de tiempo Δt , \mathbf{u}_{qh} se calcula con r pasos CN $\Delta t/r$. Como CN es de segundo orden el esquema CN+RE de tercer orden.

Estabilidad

Aunque el esquema de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable, la extrapolación de Richardson usando solamente dos pasos ($r=2$) es condicionalmente estable. La condición desaparece para problemas lineales si se utilizan tres pasos de tamaño $1/3$ (es decir $r=3$). Este hecho fue presentado e ilustrado con experimentos numéricos en⁴.

El método puede utilizarse para estimar el error en la integración temporal en cada paso como la diferencia entre la solución calculada con el esquema CN y la extrapolada. Esta información es usada para modificar el incremento de tiempo para mantener el error en un rango especificado. Si el error excede el límite, se reduce el incremento de tiempo, y si es menor que el error mínimo, se incrementa, reduciendo de este modo el costo computacional de la solución. Para calcular el error se utiliza la norma L^∞ .

EJEMPLOS NUMÉRICOS

Se presenta a continuación un ejemplo bidimensional de un problema estacionario y se lo compara con resultados analíticos.

La tabla de agua separa las regiones saturada y no saturada, caracterizando un acuífero confinado. En el ejemplo que se presenta, el dominio es bidimensional con una superficie plana y una base horizontal impermeable. Las propiedades del dominio se asumen uniformes e isotrópicas, mientras que el nivel de agua se prescribe en las fronteras laterales (Figura 2).

Para tener en cuenta la dependencia de la permeabilidad k con la presión p se utiliza la siguiente ley de variación:

$k = k_0 = 1.0$ si $p > 0$ $k = (k_0 - k_r) \left(\frac{p + 0.05}{0.05} \right) + k_r$ si $-0.05 < p < 0$ $k = k_r = 0.0001$ si $p < -0.05$ donde k_0 y k_r son constantes. Esta variación hace no-lineal al sistema. Dicha no-linealidad se resuelve utilizando el algoritmo de Picard.

La Fig. 2 muestra la malla de elementos finitos con triángulos uniformes de 5894 nodos y 11346 elementos.

Aunque no es sencillo encontrar una solución exacta para este problema, una buena aproximación la provee la ley de Dupuit⁸, que establece:

$$h(x, y) = h(x) = \sqrt{h_0^2 - \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right) (h_0^2 - h_1^2)}$$

donde h es la altura hidráulica (que es igual al nivel de agua si se

ignora la gravedad y el nivel de referencia es la interfase entre el acuífero y la base impermeable), h_0 y h_1 son alturas hidráulicas para x_0 y x_1 , respectivamente. La figura 3 muestra (a) la tabla de agua (b) líneas de corriente y (c) velocidades. La figura 4 muestra una comparación entre la solución numérica y la que se obtiene mediante la ley de Dupuit. El *solver* convergió en 7 iteraciones con una cota de error de 10^{-3} para k . En dicha figura puede observarse un gran acuerdo en la comparación, por lo que se concluye que para el problema propuesto el modelo predice la posición de la tabla de agua con precisión suficiente.

Se han resuelto asimismo algunos problemas en dos dimensiones considerando la zona saturada y no saturada. Han aparecido problemas numéricos en particular en el tratamiento de la no linealidad de la capacidad específica. Los mismos aparecen por la fuerte variación (de alrededor de dos órdenes de magnitud) que experimenta la dicho coeficiente en proximidades de $h = -1$ (Figura 1). Actualmente se está trabajando con técnicas de sub-relajación y –eventualmente- cambiando el algoritmo de tratamiento de la no-linealidad. Los resultados obtenidos serán presentados durante el Congreso.

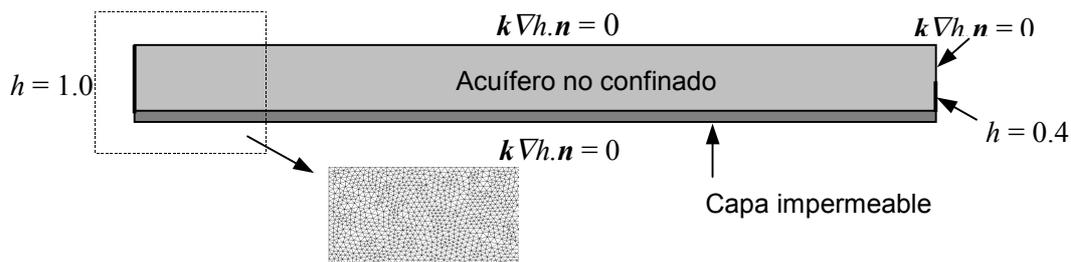


Figura 2 Dominio, condiciones de contorno y detalle de la malla de elementos finitos

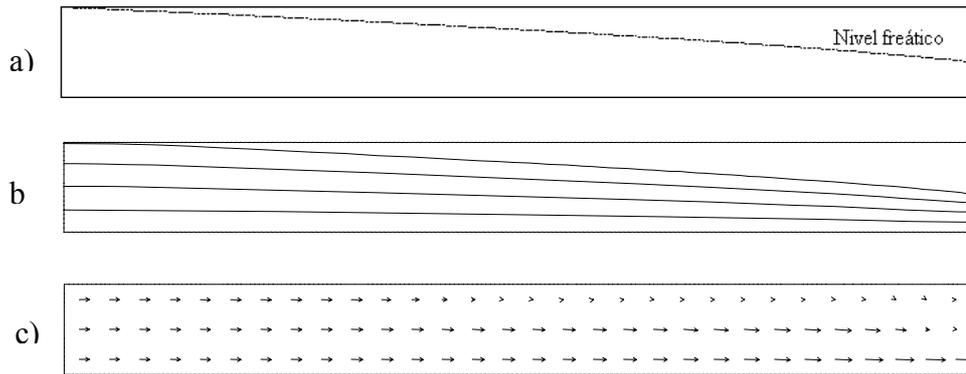


Figura 3 Solución obtenida: a) Nivel freático. Se esquematiza la línea de nivel

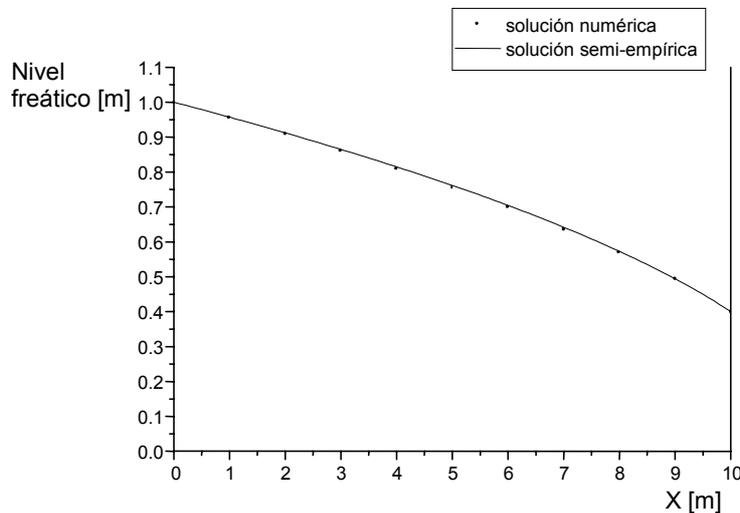


Figura 4 Determinación del nivel freático. Solución numérica y semi-empírica de Dupuit

CONCLUSIONES

Se ha presentado un modelo numérico en dos y tres dimensiones para estudiar el transporte y difusión de contaminantes en suelos saturados y no saturados. Un tratamiento cuidadoso de la integración temporal mediante la introducción de un algoritmo de tercer orden permite la implementación de un procedimiento de adaptividad en el incremento de tiempo. Para la solución del problema de advección-difusión se han programado dos algoritmos estabilizados utilizando triángulos lineales en 2D y tetraedros lineales en 3D.

Se han resuelto algunos problemas en dos y tres dimensiones. En primer lugar se ha verificado que el modelo adoptado puede predecir con suficiente aproximación la posición de la tabla de agua. Se han resuelto asimismo en forma exitosa^{14,15} (aunque no presentados en el presente trabajo) algunos problemas en tres dimensiones de transporte y difusión de contaminantes en suelos saturados.

En los casos resueltos considerando suelos con zona saturada y no saturada se observaron problemas numéricos por el tratamiento de la no-linealidad en el coeficiente de capacidad específica, por lo cual en el futuro inmediato se investigarán diferentes formas de resolver la misma. Además también se prevé incorporar técnicas adaptivas en el tiempo y el espacio por lo que se deberá estudiar el efecto de las mismas sobre el tratamiento de las no-linealidades.

REFERENCIAS

- [1] M.D.LaGrega, P.L.Buckingham, J.C.Evans, *Hazardous waste management*, McGrawHill, 1994
- [2] T. J. R. Hughes, and A. Brooks, *A Theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions: Application to the streamline-upwind procedure*, Finite Elements in Fluids, Vol 4, 1982.
- [3] Javandel, I and Witherspoon, P.A. *Application of the finite element method to transient flow in porous media*, Soc. Pet. Eng. J. 241-252, 1968
- [4] R. Módena, M. Vénere, F. Quintana. "Estudio de esquemas para la integración temporal en problemas transitorios de difusión-reacción". Mecánica computacional Vol. XVIII pp 867-876. AMCA 1997.
- [5] C. Zheng, G. D. Bennett, *Applied contaminant transport modeling-Theory and practice*, ed. Van Nostrand Reinhold, 1995.
- [6] Ne-Zheng Sun, *Mathematical modeling of groundwater pollution*, ed. Springer, 1996.
- [7] F. Albarède, *Introduction to geochemical modeling*, Cambridge University Press, 1995.
- [8] S. W. Lohman, *Hidráulica subterránea*, ed. Ariel, 1977.
- [9] R. Codina, *Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation*, Comp. Meth. in App. Mech. and Eng. 1997.
- [10] N.A. Hossain, D.R. Yongue *Linear finite element modeling of contaminant transport in ground water*, Journal of Environmental Engineering. ASCE, 123 (11) 1126-1135. Nov 1997.
- [11] E.T. Boloutas, M.A. Celia *An improved cubic Petrov-Galerkin method for simulation of transient advection diffusion processes in rectangularly decomposable domains*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (3) 289-308. Nov 1991.
- [12] H.W. Reeves, L.M. Abriola. *An iterative compositional model for subsurface multiphase flow*. Journal of Contaminant Hydrology, 15 (4) 249-276. Apr. 1994.
- [13] R. Módena, F. Quintana and M. Vénere, *Finite element solution of diffusion and transport equations for tridimensional problems*. Fourth World Congress on Computational Mechanics. Buenos Aires junio 1988.
- [14] R. Módena, M. Vénere y F. Quintana, *Modelado computacional del transporte y difusión de contaminantes orgánicos en suelos*. XVII Congreso Nacional del Agua y II Simposio de Recursos Hídricos del Cono Sur. Santa Fe. 1988.
- [15] R. Módena, M. Vénere, M. Alvarez, F. Quintana. *Estudio sobre un caso real de las incertezas en la simulación numérica de la dispersión de contaminantes en suelos*. 4to. Congreso Latinoamericano de Hidrología Subterránea. Montevideo. Uruguay, 16 al 20 de noviembre de 1998
- [16] M.T. Van Genuchten, and D. R. Nielsen. *On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils*. Ann Geophys. 3(5), 615-628, 1985.
- [17] C. Paniconi. A.A. Aldama, and E.F. Wood. *Numerical evaluation of iterative and noniterative methods for the solution of the nonlinear Richards equation*. Water Resources Research, V.27, (6) 1147-1163, 1991.