



**GUÍA TÉCNICA**

**PARA LA APLICACIÓN  
DE MODELOS  
INFORMÁTICOS  
PARA EL TRANSPORTE  
Y EL FLUJO  
DE CONTAMINANTES  
EN EL AGUA  
SUBTERRÁNEA**

**LEY 1/2005  
PARA LA  
PREVENCIÓN  
Y CORRECCIÓN  
DE LA  
CONTAMINACIÓN  
DEL SUELO**

**EUSKO JAURLARITZA**



**GOBIERNO VASCO**

INGURUMEN ETA LURRALDE  
ANTOLAMENDU SAIA

DEPARTAMENTO DE MEDIO AMBIENTE  
Y ORDENACIÓN DEL TERRITORIO



**ingurumena.net**

Ingurumena.net  
Red de Información Ambiental



© IHOBE – Julio 2006

**Edita:** Sociedad Pública de Gestión Ambiental, IHOBE, S.A.

**Elaboración:** Este documento ha sido elaborado para IHOBE con la colaboración de URS España

**Traducción:** Elhuyar

**Depósito Legal:** BI-2027-06

Impreso en papel reciclado y blanqueado sin cloro

#### **TODOS LOS DERECHOS RESERVADOS**

No se permite reproducir, almacenar en sistemas de recuperación de la información, ni transmitir parte alguna de esta publicación, cualquiera que sea el medio empleado –electrónico, mecánico, fotocopiado, grabación, etc.–, sin el permiso escrito del titular de los derechos de la propiedad intelectual y del editor.

## PRESENTACIÓN

Las implicaciones que la contaminación del agua subterránea tiene para la salud humana y el medio ambiente son de tal magnitud que han llevado a que en los últimos veinte años se hayan producido notables avances en el campo de la hidrogeología en general y en el de la modelización de las condiciones de flujo, transporte de contaminantes y la predicción de su evolución en particular.

La *Estrategia Ambiental Vasca de Desarrollo Sostenible 2002-2020* se hace eco de la importancia de la calidad del agua hasta el punto de considerar como primer objetivo conseguir la mejora de la misma junto con la del suelo. Incluso el propio título de la Ley 1/2005 para la prevención y corrección de la contaminación del suelo sugiere profundizar en el conocimiento del comportamiento y la evolución de los contaminantes en el medio hídrico y además la Ley 1/2006 de aguas determina la figura de protección del agua subterránea.

La guía que aquí se presenta, realizada en el marco de la Política para la Protección del Suelo que viene desarrollando el Departamento de Medio Ambiente y Ordenación del Territorio suministra los criterios necesarios para utilizar adecuadamente los principales programas informáticos desarrollados al efecto. Ahora bien, mientras que las guías elaboradas hasta la fecha proporcionan pautas para llevar a cabo las investigaciones de la calidad del suelo de forma uniforme, la *Guía Técnica para la Aplicación de modelos informáticos para el transporte y el flujo de contaminantes en el agua subterránea*, avanza un paso más y exige del usuario amplios conocimientos hidrogeológicos, hasta el punto de que la obtención previa de datos de campo durante las investigaciones de la calidad del suelo puede verse afectada por los requerimientos que conlleva la aplicación de uno u otro modelo.

Con todo, la guía tiene sentido práctico para que todos los colectivos públicos y privados implicados en las investigaciones y la gestión de los suelos contaminados pueden usarla con facilidad. Así la guía se estructura en tres partes, en la primera se incluye una revisión de los conceptos de la modelización, en la segunda se describen, mediante fichas, los principales programas y en la tercera se incluyen unos ejemplos de aplicación de algunos de los programas a cuatro casos prácticos que representan situaciones comunes de contaminación del suelo y del agua subterránea en la Comunidad Autónoma del País Vasco.



**Esther Larrañaga**

Consejera de Medio Ambiente y Ordenación  
del Territorio del Gobierno Vasco



---

# Índice

<b>1. INTRODUCCIÓN</b> .....	5
1.1 OBJETIVO .....	6
1.2 ALCANCE.....	6
1.3 DEFINICIÓN DE MODELO.....	7
1.4 ESQUEMA DE DESARROLLO DE LA GUÍA.....	7
<b>2. PLANTEAMIENTO GENERAL DE LA MODELIZACIÓN</b> .....	9
2.1 FASE I. RECONOCIMIENTO Y ANÁLISIS DEL PROBLEMA.....	10
2.2 FASE II. DEFINICIÓN DEL MODELO CONCEPTUAL.....	11
2.2.1 <i>Definición del foco de contaminación (término fuente)</i> .....	12
2.2.2 <i>Identificación de las vías de migración</i> .....	14
2.2.3 <i>Procesos de transporte</i> .....	17
2.3 FASE III. CRITERIOS PARA DECIDIR SI SE PRECISA UN MODELO MATEMÁTICO.....	22
2.3.1 <i>Objetivos del estudio</i> .....	22
2.3.2 <i>Criterios de decisión</i> .....	22
<b>3. SELECCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO</b> .....	25
3.1 INTRODUCCIÓN.....	25
3.2 TIPOS DE MODELOS MATEMÁTICOS.....	25
3.3 OTROS ASPECTOS A CONSIDERAR EN LA SELECCIÓN.....	28
3.4 PROCEDIMIENTO GENERAL DE SELECCIÓN.....	30
3.5 VALORES DE LOS PARÁMETROS.....	31
3.6 VERIFICACIÓN DEL CÓDIGO DEL MODELO.....	34
3.7 INFORME.....	34
<b>4. METODOLOGÍA DE MODELIZACIÓN</b> .....	35
4.1 ASPECTOS TEÓRICOS.....	35
4.1.1 <i>Diseño del modelo</i> .....	35
4.1.1.1. Dominio del modelo, condiciones de contorno e iniciales.....	35
4.1.1.2. Definición de criterios de aceptación del modelo matemático.....	35
4.1.2 <i>Calibrado del modelo</i> .....	36
4.1.2.1. Variables de control.....	37
4.1.2.2. Procedimientos de calibración.....	37
4.1.3 <i>Análisis de sensibilidad</i> .....	38
4.1.4 <i>Análisis de incertidumbre</i> .....	39
4.1.5 <i>Revisión global del modelo</i> .....	39
4.1.6 <i>Validación del modelo</i> .....	39
4.2 PRÁCTICA DE LA EJECUCIÓN DE MODELOS.....	41
4.3 PROBLEMAS MÁS FRECUENTES EN LA EJECUCIÓN DE UN MODELO.....	41
4.4 INFORMES.....	42

## Índice de Figuras

Figura 1. Desde la realidad al modelo.....	9
Figura 2. Construcción del modelo conceptual. Descripción del término fuente.....	14
Figura 3. Construcción del modelo conceptual. Descripción de las vías de migración.....	17
Figura 4. Construcción del modelo conceptual. Identificación de procesos.....	21
Figura 5. Modelos analíticos frente a numéricos.....	26
Figura 6. Resumen del proceso de modelización.....	40

## Índice de Tablas

Tabla 1. Fórmulas para la estimación de los valores de dispersividad longitudinal ( $\alpha_x$ ), transversal ( $\alpha_y$ ) y vertical ( $\alpha_z$ ).....	20
Tabla 2. Comparación entre métodos analíticos y numéricos.....	27
Tabla 3. Parámetros necesarios en los procesos de modelización de transporte de contaminantes.....	33
Tabla 4. Principales variables de control.....	37

## Anexos

Anexo I: Fichas de descripción de programas.....	45
Anexo II: Ejemplos.....	73
Anexo III: Glosario.....	97
Anexo IV: Bibliografía.....	101

## **1. INTRODUCCIÓN**

El desarrollo de los modelos hidrogeológicos en el pasado tuvo como motivo principal la necesidad de valorar el potencial de los acuíferos como recursos hídricos. Sin embargo, desde la década de los 80, el énfasis se ha ido desplazando paulatinamente hacia los problemas de calidad del agua. Esto ha llevado a la necesidad de predecir el movimiento de contaminantes a través del medio subsuperficial.

De igual manera, la investigación del medio natural ha reflejado este cambio de orientación. Anteriormente, se daba atención primordial al desarrollo de métodos para evaluar y medir las propiedades de las formaciones de alta permeabilidad portadoras de agua. Hoy en día, los esfuerzos más importantes se centran en definir las variables que rigen los procesos de transporte y dispersión, el retardo y la degradación de contaminantes, los efectos de la heterogeneidad sobre las líneas de flujo y los tiempos de residencia, el tiempo en el que se puede alcanzar un receptor, así como la capacidad de que los materiales de baja permeabilidad puedan servir de contención a procesos de migración de contaminantes.

Estos últimos veinte años han sido testigos de importantísimos avances tecnológicos en el campo de la hidrogeología. Uno de ellos ha sido el desarrollo y uso de potentes modelos informáticos de simulación que permiten el análisis de las condiciones de flujo y transporte de solutos y la predicción de su evolución. Estos avances han ido a la par del desarrollo de equipos informáticos y sistemas operativos cada vez más rápidos, de mayor capacidad y memoria, más asequibles a usuarios no especializados en informática y de coste económico reducido.

Otra de las áreas que más se ha visto influida por el crecimiento tecnológico actual ha sido la obtención de datos experimentales. Hoy en día, la precisión, exactitud y reproducibilidad de gran parte de las medidas que se obtienen tanto en campo como en laboratorio permiten un grado de confianza elevado a la hora de caracterizar un suelo contaminado. Así, cuanto mayor grado de credibilidad tenga la información de entrada a un modelo, mayor será la confianza en los resultados obtenidos.

No obstante este importante desarrollo tecnológico, es preciso poner de relieve la importancia del criterio experto para establecer las necesidades en la caracterización de un determinado sistema contaminado. Este criterio ajustará los requerimientos de cantidad y calidad de datos para realizar un diagnóstico preciso, y así orientar las posteriores acciones a llevar a cabo. Hay que tener presente, que, a pesar de la poderosa herramienta que suponen, los modelos de flujo y transporte de contaminantes, si no se aplican de manera apropiada, pueden dar origen a errores de consecuencias imprevisibles. La utilización de este tipo de técnicas requieren personal experimentado, consciente de las simplificaciones y premisas adoptadas durante el proceso de modelización y que pueda analizar con criterio los resultados obtenidos teniendo en cuenta las limitaciones e incertidumbres derivadas de la simulación.

## **1.1 OBJETIVO**

El presente documento técnico tiene como objetivo servir de guía en la aplicación correcta y adecuada de modelos informáticos de flujo y transporte en agua subterránea, en sistemas hidrogeológicos perturbados por la presencia de sustancias contaminantes que pueden migrar en fase acuosa, fase no acuosa o fase gas.

No se contempla la descripción física de las ecuaciones de estado, ni los desarrollos matemáticos que sostienen los códigos aplicados, si bien se dan las referencias esenciales para poder consultar las fuentes de información básica. Tampoco se tratan modelos de reacción geoquímica.

En la aplicación de este tipo de códigos es necesario prestar atención a todas las fases implicadas, desde la selección del modelo, y su aplicación práctica hasta la interpretación final de los resultados obtenidos.

## **1.2 ALCANCE**

Esta guía técnica tiene una clara vocación práctica. Trata de ser asequible para los principales colectivos implicados en la prevención, identificación, investigación y gestión de suelos contaminados, desde la Administración y órganos de control, a las consultorías, grupos de investigación, etc. Por esta razón, la guía se enfoca sobre los programas informáticos de mayor difusión y empleo, tanto gratuitos como comerciales.

Dichos códigos suelen ser suficientemente flexibles para adaptarse a las versátiles necesidades del problema, que vendrán definidas por el modelo conceptual establecido en las fases de investigación previas. En ocasiones, la complejidad del problema puede hacer inviable, o cuanto menos excesivamente costoso, aplicar un único modelo de simulación. Como alternativa, puede ser de interés aproximarse al problema con diversos modelos parciales simplificados que permitan acotar las variables de mayor trascendencia en el comportamiento del sistema.

Más adelante, se relacionará el alcance de los estudios hidrogeológicos para las fases de investigación del suelo: exploratoria y de detalle.

Buena parte de los modelos descritos en esta guía sirven de apoyo a estimaciones para posteriores evaluaciones cuantitativas de riesgos. A este respecto, es conveniente recordar los diversos documentos o guías que IHOBE ha publicado sobre este tema y que son de consulta obligada antes de abordar este tipo de temas.

Por último, se detallará con especial detenimiento cómo afrontar mediante modelización algunos problemas frecuentes en emplazamientos contaminados. En concreto, cómo poder describir las especiales condiciones hidrogeológicas de algunos acuíferos importantes, así como de los contaminantes que reiteradamente se asocian a suelos contaminados en el ámbito territorial de la Comunidad Autónoma del País Vasco.



### **1.3 DEFINICIÓN DE MODELO**

La palabra modelo tiene tantas definiciones y se utiliza con tanta frecuencia que a veces es difícil discernir su significado preciso (*Konikow et al*, 1992). Quizá la definición más simple es que es la representación simplificada de un sistema o proceso real. Un modelo conceptual es una hipótesis de cómo funciona un sistema o proceso. Esta hipótesis puede expresarse cuantitativamente como un modelo matemático. Un modelo matemático es pues una abstracción que representa los procesos como ecuaciones, las propiedades físicas como constantes o coeficientes en las ecuaciones, y las medidas o potenciales de estado del sistema como variables.

La mayoría de los modelos que se utilizan en la actualidad son modelos matemáticos determinísticos. Los modelos determinísticos se basan en los principios de conservación de la masa, el momento y la energía, y describen relaciones causa-efecto. Esto implica que si se conoce la respuesta con la que un sistema responde a una perturbación, se pueden prever las consecuencias que ocasionaría otra perturbación, aunque esta última tenga una magnitud muy superior a las observaciones históricas disponibles.

En capítulos posteriores se irán definiendo diversos términos; los más utilizados se incluyen en el glosario del anexo 3.

### **1.4 ESQUEMA DE DESARROLLO DE LA GUÍA**

La presente guía se desarrolla en tres partes principales:

- 1ª. Realiza una revisión genérica de los conceptos en la aplicación de técnicas de modelización.
- 2ª. Describe mediante fichas simples, los principales programas que se están manejando en la actualidad en problemas de medios contaminados.
- 3ª. Presenta una serie de ejemplos en la aplicación de algunos de los programas seleccionados.



## 2. PLANTEAMIENTO GENERAL DE LA MODELIZACIÓN

Como ya se ha comentado, los modelos de flujo y transporte de contaminantes son potentes herramientas en el análisis y predicción de la evolución de sistemas hidrogeológicos contaminados, pero cuya aplicación inapropiada puede dar origen a importantes errores.

Un modelo matemático debe aplicarse única y exclusivamente cuando quede claro por qué y cómo se va a utilizar. El planteamiento de la modelización debe determinarse de acuerdo con los objetivos del estudio, la disponibilidad de datos y la complejidad tanto del sistema hidrogeológico como de los procesos de transporte que tienen lugar.

El siguiente paso es formular y documentar el entendimiento sobre cómo funciona el sistema y comprobar esas ideas de forma cuantitativa. Este modelo conceptual debería identificar qué elementos del sistema son los más importantes y cómo pueden representarse mediante un modelo matemático.

El modelo conceptual requiere generar diversas hipótesis y asumir simplificaciones y suposiciones que deberán estar en continua revisión, comprobándose de forma cuantitativa durante el propio proceso modelizador y por comparación con las observaciones de campo.

El desarrollo de este tipo de proceso requiere que la modelización conceptual y la matemática sean iterativas y estén acopladas (figura 1). En principio, se suele comenzar con cálculos relativamente simples que poco a poco se van complicando en modelos analíticos o numéricos con objeto de poder dar cuenta de situaciones complejas. Hay casos en los que los primeros cálculos simples pueden ser suficientes para llegar a los objetivos del proyecto.

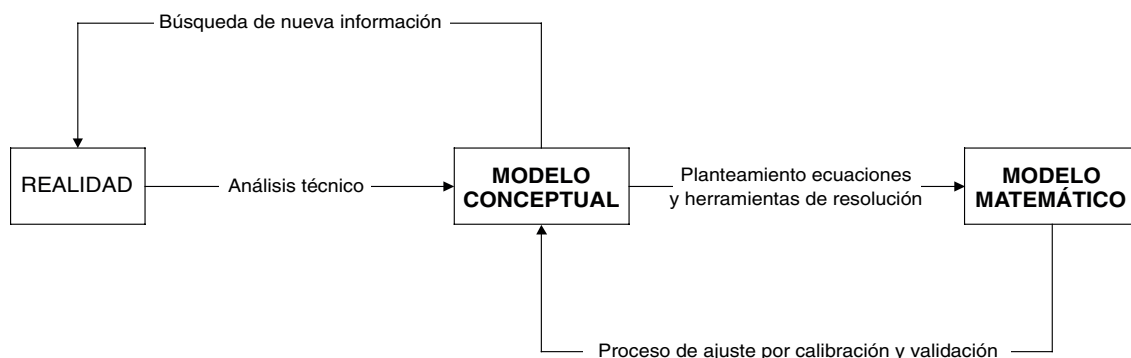


Figura 1. Desde la realidad al modelo.

La construcción y desarrollo de un modelo matemático requiere diversas fases de calibración, validación y análisis de sensibilidad e incertidumbres, con el fin de lograr el mejor ajuste posible entre los datos experimentales y las predicciones del modelo. En sucesivos apartados se irán contemplando las etapas del proceso aquí descritas de forma esquemática.

En algunos casos es incluso conveniente consultar si la resolución matemática es adecuada al problema planteado.

## **2.1 FASE I. RECONOCIMIENTO Y ANÁLISIS DEL PROBLEMA**

El primer paso en el diseño y aplicación de un modelo conceptual es definir la naturaleza del problema y evaluar el propósito del modelo. Aunque ambas cosas puedan parecer obvias, a veces se descuidan en un precipitado intento de entrar en acción. Este paso está estrechamente relacionado con la formulación del modelo conceptual que se tratará en detalle más adelante.

En la definición de la naturaleza del problema se debe revisar la información existente y definir los principales objetivos del estudio, enfoque y programa de trabajo. Se ha de realizar un esfuerzo en definir las variables más importantes para entender el problema tanto en relación con el medio como con los contaminantes.

En un estudio exploratorio, la investigación hidrogeológica realiza un reconocimiento básico del medio: textura de materiales, posición del nivel freático, concentración de contaminantes y sus relaciones, etc. De esta forma, se elabora un modelo conceptual preliminar, en el que muchas veces sólo se puede realizar tanteos muy orientativos sobre los parámetros que regulan el flujo y transporte en medio saturado.

En un estudio de detalle se requiere una mejor definición del sistema, por lo que suele ser preciso ejecutar ensayos de permeabilidad, reconocimiento de heterogeneidades, o incluso la estimación de parámetros de transporte (p.e. coeficientes de dispersión), cinética de procesos de reacción (si hay información temporal), etc...

Algunas de las preguntas básicas que deben tenerse en cuenta a la hora de evaluar si se debe aplicar un proceso de simulación son:

- ¿Cuál es la razón de modelizar y qué beneficios se pueden conseguir?
- El modelo, ¿puede llegar a proporcionar soluciones de confianza? En casos en los que el medio sea demasiado complejo para poder ser representado adecuadamente con los recursos actuales, puede ser inútil la aplicación de este tipo de enfoque.
- El sistema ¿se conoce con suficiente detalle como para justificar una aproximación cuantitativa? ¿Hay datos suficientes para definir el sistema? Un modelo nunca se debe utilizar como una alternativa de obtención de datos empíricos básicos del emplazamiento, si bien, su correcta utilización puede utilizarse para guiar futuros trabajos experimentales.

La decisión de adoptar un proceso de modelización, si bien es subjetiva y basada en la experiencia profesional, debe estar perfectamente documentada y justificada.

## 2.2 FASE II. DEFINICIÓN DEL MODELO CONCEPTUAL

Una vez que se han definido los objetivos del estudio y la naturaleza del problema, se puede comenzar a establecer el modelo conceptual. Como se ha comentado anteriormente, un modelo conceptual es la representación simplificada de la realidad del sistema estudiado, confeccionado a partir de la integración de todos los datos disponibles: geológicos, hidrogeológicos, tipo y concentración de contaminantes, geometría y tamaño de los focos contaminantes, etc.

El modelo conceptual constituye la etapa más crítica en el proceso global de modelización, puesto que pondrá de manifiesto el grado de entendimiento que se tenga del funcionamiento del sistema y es clave a la hora de seleccionar y desarrollar el tipo de modelo matemático a utilizar.

Algunos de los principales aspectos que debe considerar el modelo conceptual son:

- Ámbito y objetivos del estudio.
- Características geológicas e hidrogeológicas del emplazamiento.
- Funcionamiento general del sistema.
- Balance de entradas y salidas de sistema (término de recarga, descarga por manantiales, pozos de abastecimiento, ríos, etc.).
- Caracterización del foco o focos de contaminación.
- Procesos que controlan el comportamiento y la migración de la contaminación.
- Localización y tipo de posibles receptores.

Inicialmente el modelo conceptual puede ser totalmente cualitativo. No obstante, a medida que se avanza en el proceso de modelización, el modelo conceptual debe retroalimentarse integrando nuevos datos que permitan ajustarse en mayor medida al funcionamiento real del sistema. La incorporación de valores cuantitativos ayudará a discriminar algunas premisas iniciales que pudieran ser erróneas y a identificar el peso que tiene cada uno de los distintos parámetros en el modelo conceptual. Este proceso es el que debe aportar solidez al modelo conceptual definido en un primer momento.

El grado de incertidumbre que refleje el modelo conceptual con respecto a determinados parámetros indicará la necesidad de obtener más datos experimentales. El desarrollo del modelo conceptual debe ser un proceso iterativo que permita su actualización a medida que se disponga de más datos o mejore el entendimiento que se tenga respecto al funcionamiento del sistema.

El grado de confianza en los resultados finales de la modelización dependerá de la bondad del modelo conceptual definido, que, como toda simplificación, será imperfecta e incluso puede contemplar algunos errores. Es importante, en cualquier caso, mantener un equilibrio adecuado, evitando tanto una excesiva simplificación, que puede llegar a invalidar la simulación realizada, como una desmedida complejidad que resultaría poco manejable a la hora de solucionar problemas.

Todo el proceso de definición del modelo conceptual debe quedar adecuadamente documentado y justificado, puesto que los resultados de la modelización servirán para apoyar la toma de decisiones. Es importante, así mismo, reflejar las premisas asumidas y las interpretaciones realizadas como consecuencia de la falta de datos, considerando en todo momento si éstas pueden resultar en valoraciones conservadoras o no.

A continuación se presenta una breve exposición de la información y procesos que deben ser considerados en la elaboración de un modelo conceptual para modelizar el flujo y transporte de contaminantes.

### **2.2.1 Definición del foco de contaminación (término fuente)**

El foco de contaminación es la zona a través de la cual los contaminantes entran en contacto con el medio natural, en este caso el subsuelo. Su definición en el modelo conceptual deberá contemplar aspectos como tipo de contaminantes, matriz en la que se presentan (suelo, agua, fases no acuosas), geometría del área impactada, volumen y edad del vertido y aquellos procesos que pueden afectar y modificar las condiciones del foco de contaminación (adsorción, degradación, etc.).

Ya el estudio histórico se deberá enfocar a la adquisición de información relativa a las actividades en el pasado del emplazamiento considerado, entre ellas el tipo de procesos y materias primas utilizadas, y la existencia de derrames, fugas o vertidos incontrolados.

Durante la investigación exploratoria es fundamental disponer de datos de campo sobre el tipo y concentración de contaminantes, para poder estimar su distribución en el emplazamiento estudiado. Si se cuenta además con las concentraciones durante varias campañas de muestreo (p.e. en unan investigación detallada posterior) podrá determinarse si se han producido variaciones de importancia y si se ha modificado su distribución.

En muchas ocasiones, la investigación exploratoria no permite llegar más que a definiciones muy esquemáticas de este término, que pueden mejorarse ostensiblemente en posteriores fases de detalle.

Generalmente no se dispone de datos suficientes para definir con precisión el área fuente por lo que es necesario asumir estimaciones que completen la información recabada. En estas aproximaciones es importante acotar:

- **El tipo de foco de contaminación:** vertederos, tanques y conducciones enterradas, redes de recogida de efluentes, pozos de infiltración, balsas de lodos mineros, suelos contaminados por vertidos o fugas históricas, etc.

El modelo conceptual debe considerar posibles variaciones del foco de contaminación a lo largo del tiempo: cambios en el tipo de contaminación (p.e. debido a degradación) o en la masa total de contaminante (p.e. pérdidas por volatilización, disolución, etc.). También debe contemplar si pueden producirse cambios significativos en el comportamiento de los

contaminantes como consecuencia de variaciones en las condiciones físico químicas del medio (como en el pH o el potencial de reducción y ORP).

- **El origen y volumen del vertido contaminante.** Es importante conocer dónde y cómo se ha originado el vertido que ha dado lugar a la contaminación detectada y, si es posible, el tiempo durante el cual se ha producido éste (accidente puntual, fuga crónica). La falta de información hace que con frecuencia sea necesario realizar aproximaciones que, generalmente, adoptan una posición conservadora. No obstante, en algunas ocasiones puede estimarse el volumen de contaminante vertido al medio natural a partir de los registros de existencias de las instalaciones o bien cuantificando la contaminación total existente en suelos y aguas deducidos de la investigación.
- **Tipo de contaminantes.** El tipo de contaminantes, o al menos los principales, se habrán identificado en las etapas previas de investigación. Es necesario saber además cómo se encuentra la contaminación, es decir, si se halla en forma sólida, adsorbida a la matriz sólida del suelo, en fase libre, disuelta o en fase gaseosa.

Si se va a modelizar el flujo y transporte de contaminantes en el agua subterránea, es esencial además determinar de qué compuestos específicos se trata y determinar a ser posible su especiación. El comportamiento de los contaminantes dependerá de sus características físicas y químicas (solubilidad, densidad, viscosidad, volatilidad o capacidad para lixiviar, que a su vez dependerá de su solubilidad y su coeficiente de reparto), así como en qué fase se encuentre (en fase libre, vapor, en disolución, adsorbida) y de la presencia de otros contaminantes. Es preciso obtener esta información de fuentes de reconocida solvencia (p.e. publicaciones técnicas, bases de datos de organismos como EPA, API, etc.).

El modelo conceptual debe considerar no sólo las características de la contaminación inicial sino también las de los productos de degradación.

- **Geometría del foco de contaminación.** El modelo conceptual debe incorporar al menos una estimación de la geometría y dimensiones del foco de contaminación. Éste puede ser un foco puntual debido a una fuga localizada o, por el contrario, ser una fuente difusa con una determinada extensión (p.e. pesticidas de origen agrícola).

Las dimensiones del foco de contaminación pueden haber variado en el tiempo y ser difíciles de establecer. Es necesario orientar tanto la investigación exploratoria como la de detalle para contemplar la toma de muestras y análisis de suelos y aguas subterráneas y determinar en un grado cada vez más preciso la extensión de la zona afectada que constituye el foco de contaminación.

Como resumen, a la hora de trasladar la información relativa al foco de contaminación al modelo matemático será necesario efectuar una serie de simplificaciones que definan de una forma precisa:

- Las dimensiones del foco de contaminación (longitud, anchura y profundidad).
- La concentración de los contaminantes detectados. Algunos modelos matemáticos permiten cierta variación espacial de las concentraciones, otros en cambio requieren asumir una concentración única para todo el foco de contaminación; el modelista deberá valorar en estos

casos emplear concentraciones máximas o medias teniendo en consideración que esto no tiene por qué resultar en una estimación conservadora (puede haber quedado sin muestrear la zona de máxima afección).

- Variación de las concentraciones a lo largo del tiempo. En algunos modelos matemáticos se asume un aporte continuo de contaminantes, lo que en ocasiones puede llevar a sobreestimar el volumen de contaminante. En otros modelos será preciso considerar que la contaminación situada en el foco sufre procesos de degradación.

En la figura 2 se muestra un ejemplo esquemático del proceso de definición del término fuente.

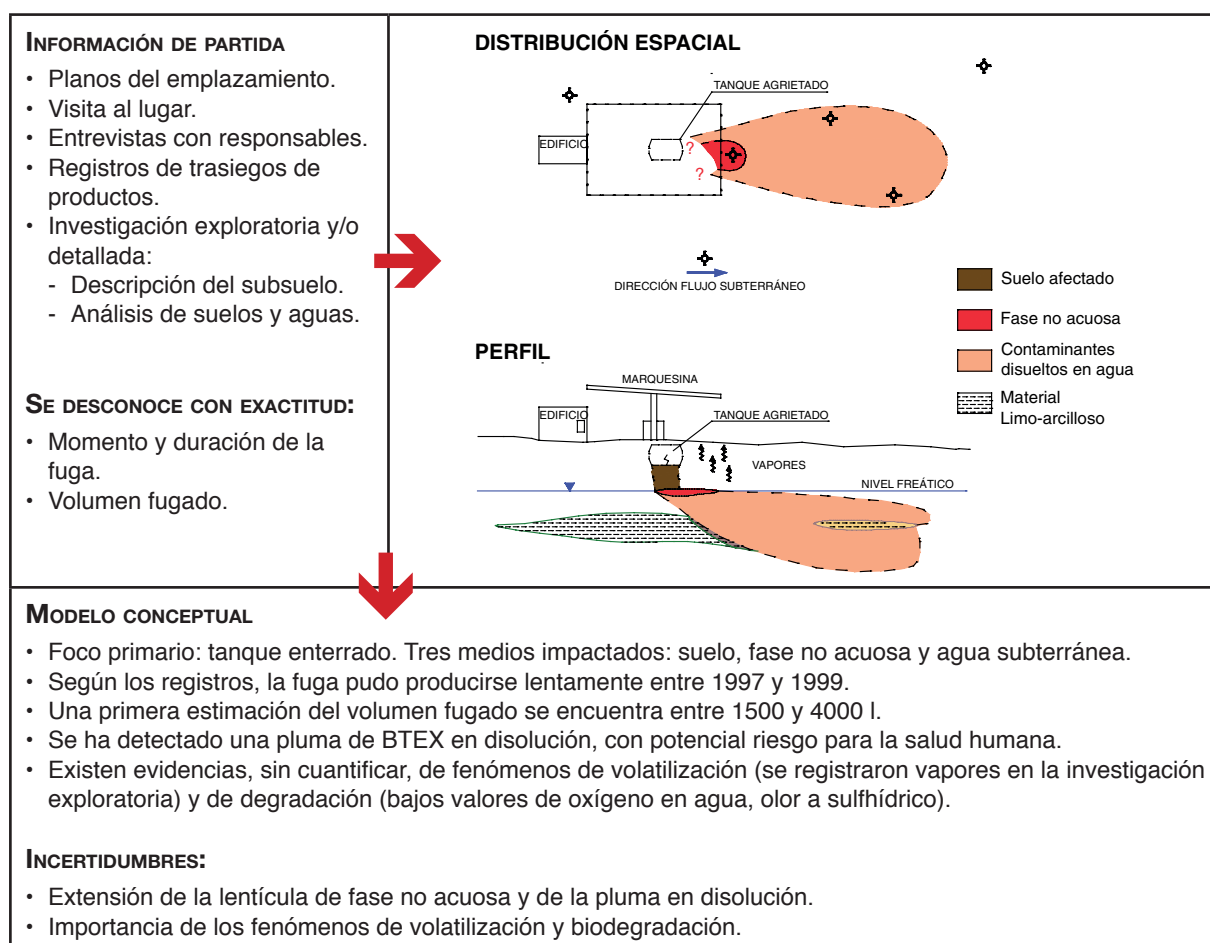


Figura 2. Construcción del modelo conceptual. Descripción del término fuente.

### 2.2.2 Identificación de las vías de migración

El modelo conceptual debe definir las vías a través de las cuales los contaminantes pueden movilizarse en el medio ambiente desde un foco potencial de contaminación. Para determinar cuales son las pautas de movilización se requiere un conocimiento preciso del medio físico:

- **Geología.** Inicialmente en una investigación de detalle la información referente a la geología del emplazamiento investigado puede obtenerse de mapas o estudios realizados



en las proximidades. Sin embargo, el grado de conocimiento del medio que se requiere para efectuar una modelización obliga a realizar investigaciones de detalle que aporten datos suficientemente detallados sobre litología, disposición de los materiales que conforman el subsuelo en el área de estudio, heterogeneidades y anisotropía, etc.

La litología y estructura de los materiales determinan las propiedades hidráulicas del medio para transmitir fluidos y pueden presentar una variabilidad espacial acusada o bien mostrarse uniformes. Es importante conocer la estructura del subsuelo, agrupar aquellas unidades que tengan un comportamiento hidrogeológico similar e identificar discontinuidades (p.e. planos de estratificación, paleocauces) que puedan tener influencia en la movilización de la contaminación.

En buena parte de las ocasiones, es de gran utilidad para entender el comportamiento del medio tener una perspectiva más amplia del contexto hidrogeológico donde se ubica el emplazamiento investigado para identificar elementos estructurales o patrones a escala regional que condicionan dicho comportamiento.

- **Nivel freático.** Es fundamental conocer la profundidad del nivel freático como límite entre las zonas saturada y no saturada. Debe determinarse la relación entre el nivel freático y los límites entre distintas litologías o planos de estratificación y valorar el posible efecto que pueda tener en el flujo del agua y el transporte de contaminantes.

Un aspecto importante a considerar son las oscilaciones temporales del nivel freático ya que afectan a la distribución vertical de la contaminación. Un caso típico en el que esto sucede es cuando se producen oscilaciones del nivel freático y hay una lentícula de hidrocarburo en fase libre (LNAPL, *light non aqueous phase liquids*) “flotando” sobre el nivel freático. Esta situación da lugar a una banda de suelo afectado, con una concentración equivalente, como mínimo a la saturación residual de hidrocarburo, en la zona que anteriormente ocupaba la lentícula, constituyendo un foco de contaminación secundario.

Otra situación que puede presentarse es la existencia de niveles freáticos colgados, que deben ser adecuadamente definidos, puesto que pueden incrementar la dispersión lateral de los contaminantes y complicar el proceso de migración vertical de contaminantes.

Este caso es frecuente en el caso de los rellenos antrópicos. Aunque estos materiales pueden llegar a asimilarse a formaciones naturales (p.e. cuaternarios constituidos por materiales groseros), siempre se debe tener en cuenta su alto grado de heterogeneidad y anisotropía, en especial, a escala de detalle.

- **Flujo y transporte en la zona no saturada.** El movimiento del agua u otros líquidos y gases en la zona no saturada presenta una elevada complejidad al ser función de parámetros como la infiltración, el grado de humedad o saturación en agua del suelo, la conductividad hidráulica (que a su vez depende de la saturación), la capacidad de adsorción del suelo y las características del contaminante.

En general, las investigaciones empíricas del movimiento del agua en la zona no saturada suelen requerir instrumentación específica (p.e. cápsulas de succión) monitorizada durante prolongados periodos de tiempo.

Por este motivo, la estimación de las condiciones hidráulicas en función de la succión del terreno se suele efectuar por aproximaciones teóricas basadas en ensayos de laboratorio sobre muestras inalteradas (curvas de succión, pF).

Hay casos en que la modelización del flujo a través de la zona no saturada se realiza mediante ecuaciones sencillas basadas en la ecuación de Darcy para el flujo de agua en zona saturada. Sin embargo, esto no siempre es aplicable y debe recurrirse a ecuaciones complejas en las que intervienen parámetros que hay que determinar ya sea en campo (realizando ensayos específicos, a veces complicados de llevar a la práctica) o en laboratorio (a partir de muestras inalteradas de campo). Algunos de estos parámetros son:

- Conductividad hidráulica y su relación con la humedad.
- Curvas características, en las que ha de establecerse la función entre humedad y succión .
- Saturación residual del terreno en agua.
- Saturación residual del terreno en el contaminante considerado.
- Coeficiente de reparto agua/fase libre.

- **Flujo y transporte en la zona saturada.** El modelo conceptual debe contemplar los siguientes aspectos referidos al flujo de las aguas subterráneas:
  - Gradiente hidráulico horizontal y vertical.
  - Oscilaciones del nivel freático.
  - Variaciones en los patrones de flujo de las aguas.
  - Heterogeneidad y anisotropía del sistema de flujo: variabilidad de la porosidad, medios fracturados, etc.
  - Entradas (infiltración agua de lluvia, ríos perdedores) y salidas (bombeos, manantiales, ríos ganadores).

Es necesario conocer los patrones de flujo regional del acuífero considerado, puesto que basar el modelo exclusivamente en los datos obtenidos del emplazamiento estudiado puede obviar tendencias del flujo regional que no se observan a pequeña escala. Este conocimiento del funcionamiento hidrogeológico a escala regional adquiere mayor importancia al incrementarse las dimensiones que se estimen del penacho de contaminación.

Otros aspectos importantes a considerar son los flujos verticales del agua, que en algunos emplazamientos pueden tener un significado importante (p.e. en acuíferos multicapa) y la distribución de la porosidad en el medio. El modelo deberá contemplar si el flujo del agua se produce a través de la porosidad intergranular del terreno o si lo hace a través de fracturas; y el grado de anisotropía del medio (p.e. variaciones en la densidad del fracturas, paleocauces) que pueden condicionar la circulación del agua en el terreno y las pautas de movilización de los contaminantes.

- **Vías preferentes de migración de origen antrópico.** Todas aquellas estructuras enterradas existentes en el subsuelo son susceptibles de generar influencia en la movilización de los contaminantes en el terreno. Son típicos los efectos producidos por las canalizaciones en la migración de vapores y, en caso de situarse en contacto con las aguas subterráneas, suelen actuar también como drenes, constituyendo vías preferentes de migración para los contaminantes en fase no acuosa o disuelta. Estos elementos son difíciles si no imposibles de modelizar y suelen considerarse de forma cualitativa.

También puede producirse un efecto barrera o embalse por la presencia de muros o cimentaciones que impiden el libre paso del agua subterránea, efecto que dependerá tanto de las características constructivas de elemento considerado como del terreno circundante.

La figura 3 ilustra el proceso de definición de las vías de migración en el modelo conceptual.

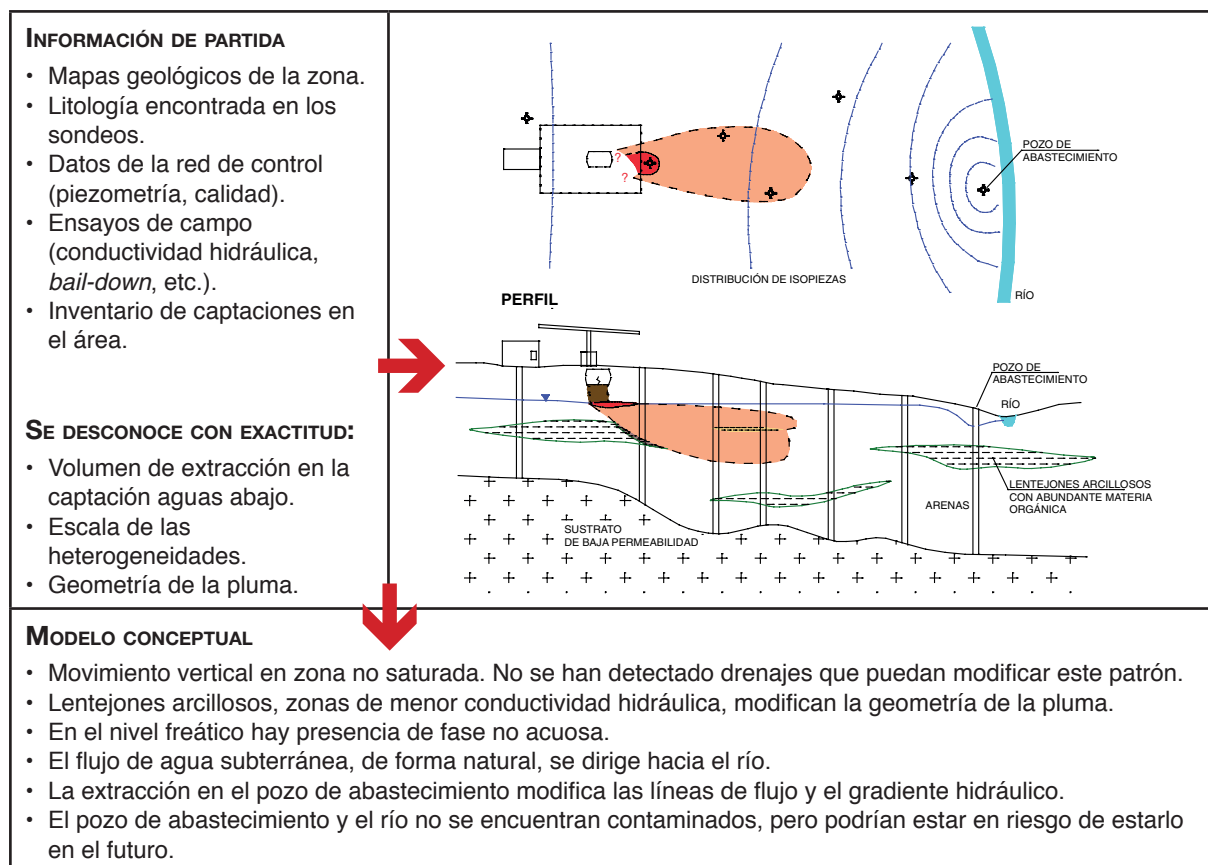


Figura 3. Construcción del modelo conceptual. Descripción de las vías de migración.

### 2.2.3 Procesos de transporte

El modelo conceptual debe describir los procesos que gobiernan la movilización de los contaminantes en el terreno, que incluyen procesos tanto en la zona no saturada como en la saturada:

- **Escorrentía superficial.** Es el proceso por el cual un fluido se desplaza sobre la superficie topográfica del terreno. Puede ser importante a la hora de valorar la cantidad de contaminante o la superficie de infiltración a partir de vertidos superficiales en medios que presentan una permeabilidad reducida, elevada pendiente o en los que el grado de saturación en agua impide la infiltración del contaminante.
- **Lixiviación.** Es el proceso de movilización de contaminantes por disolución en el agua de recarga. Depende principalmente de la tasa de infiltración, que a su vez es función de las precipitaciones, los procesos de evapotranspiración, la conductividad hidráulica vertical, y de la solubilidad de los contaminantes.

- **Percolación.** Este término se refiere a la infiltración directa de un contaminante en fase líquida no acuosa en el subsuelo a través de la zona no saturada por efecto de la gravedad. Su magnitud dependerá de la conductividad hidráulica vertical del suelo, que a su vez depende de la permeabilidad intrínseca del medio y de las propiedades físico químicas de producto vertido (densidad, viscosidad) (Fetter, 1994) y de la saturación en agua y en el propio contaminante.
- **Advección.** Es el movimiento de los contaminantes producido por el flujo de las aguas subterráneas. Generalmente las aguas subterráneas se desplazan mediante un flujo laminar y su velocidad  $v$  se expresa de acuerdo a la *Ley de Darcy* según

$$v = Ki / n_e$$

Donde:

$K$  = conductividad hidráulica

$i$  = gradiente hidráulico

$n_e$  = porosidad efectiva

Esta expresión resulta de gran utilidad en el proceso de elaboración del modelo conceptual para estimar la longitud máxima del penacho contaminante y para determinar el tiempo en el que éste podría llegar a un determinado punto, lo cual es de gran importancia al dar una idea del tiempo de que se dispone para establecer las actuaciones oportunas.

No obstante la migración de los contaminantes pocas veces obedece a esta relación, ya que en la realidad es frecuente encontrar variaciones de la conductividad hidráulica o del gradiente en poca distancia, y hay otros procesos, como se verá más adelante, que condicionan su migración (p.e. dispersión).

Debido al peso que la advección tiene en la movilización de los contaminantes, lo que se traduce en una sensibilidad elevada en la modelización, los parámetros que condicionan la velocidad de flujo (conductividad hidráulica y gradiente) precisan obtenerse directamente en el emplazamiento.

Si bien en una investigación exploratoria se puede llegar a estimar  $K$  a partir de las características litológicas de los materiales reconocidos o con un número limitado de ensayos de campo de corta duración, para mejorar las incertidumbres en la modelización, la investigación de detalle deberá precisar este parámetro con un mayor número de ensayos en campo (ensayos de bombeo prolongados en medios de alta o moderada  $K$ , *slug test*, ensayos *Lugeon*, etc., para formaciones de baja  $K$ ).

Otro fenómeno que debe tenerse en cuenta es que la conductividad hidráulica de un medio es función del fluido que está en movimiento. Además, la competencia entre dos fluidos por pasar por los mismos poros de una formación ocasiona una reducción drástica de la conductividad hidráulica global.

- **Dispersión.** La dispersión mecánica es la variación en la migración de la masa de contaminante con respecto a la velocidad que cabría esperar según el flujo de agua definido para la escala considerada.

La dispersión se produce tanto en sentido longitudinal, en la dirección de flujo del agua subterránea, como lateral y verticalmente. Algunos de los factores que condicionan esta dispersión son:

- La trayectoria de las partículas en el flujo de agua. Generalmente, y sobre todo en medios porosos, las partículas no siguen en su desplazamiento una línea recta, sino que circulan a través de los poros interconectados (porosidad efectiva) y recorren una mayor distancia debido a la tortuosidad de su trayectoria.
- El tamaño de los poros. Cuanto mayor es el tamaño de los poros mayor es la facilidad del agua para transitar por ellos. La velocidad de flujo es mayor en el centro del poro debido a la fricción que se produce en los bordes.

En definitiva, la dispersividad es una medida del desconocimiento que tenemos acerca del movimiento exacto de los contaminantes en el medio y es un parámetro típico utilizado en la calibración de los modelos matemáticos, a pesar de que se han establecido algunas fórmulas para su determinación.

Su determinación en campo es difícil y costosa, por lo que habitualmente se utilizan expresiones empíricas (ver tabla 1). Frecuentemente se asume que la dispersión longitudinal es de un 10% de las dimensiones esperadas del penacho y que la transversal es de un 1%.

Al ser un parámetro dependiente de la escala, hay que tener siempre en cuenta las dimensiones y el contexto del modelo conceptual, ya que en ocasiones la variación o el grado de incertidumbre resultante pueden hacer que los resultados sean poco útiles o escasamente fiables.

- **Difusión.** Este proceso consiste en la movilización a escala molecular de los contaminantes, desde las áreas de mayor concentración hacia las zonas con menor concentración. Estas diferencias generan un gradiente a favor del cual se movilizan los compuestos en respuesta a la tendencia del medio natural para alcanzar las condiciones de equilibrio.

Generalmente el efecto producido por la difusión es mínimo en comparación con la dispersión mecánica, excepto en medios de muy baja conductividad hidráulica y altos tiempos de residencia del agua en el medio.

- **Volatilización.** La volatilización es el proceso mediante el cual los compuestos químicos pasan desde una fase líquida o sólida a una fase gaseosa, en respuesta a la difusión molecular producida por los diferentes potenciales químicos de cada una de las fases. Debe tenerse en consideración especialmente cuando se trata de sustancias con baja temperatura de vaporización, ya que supone una forma de movilizar la masa de contaminante que permanece en el subsuelo hacia la superficie.

Estos vapores pueden irse acumulando en sótanos, galerías, conducciones, etc. con los consiguientes riesgos de explosión o inhalación de compuestos nocivos para la salud de los potenciales receptores.

$\alpha_x = 3,28 \times 0,83 [\log_{10} (L_p/3,28)]^{2,414}$ $(L_p \text{ en pies})$ $L_p$ - longitud máxima del penacho en pies	Xu y Eckstein, 1995
$\alpha_y = 0,10 \alpha_x$ $\alpha_z = \text{muy baja (p.e. } 10^{-99} \text{ pies)}$	Basado en Gelhar et al., 1992 Estimación conservativa
$\alpha_x = 0,1 L_p$ $\alpha_y = 0,33 \alpha_x$ $\alpha_z = 0,05 \alpha_x$ $\alpha_z = \text{entre } 0,025 \alpha_x \text{ y } 0,1 \alpha_x$	Pickens y Grisak, 1981 ASTM, 1995 ; EPA, 1986 ASTM, 1995 EPA, 1986

**Tabla 1. Fórmulas para la estimación de los valores de dispersividad longitudinal ( $\alpha_x$ ), transversal ( $\alpha_y$ ) y vertical ( $\alpha_z$ ).**

- **Alteración de las propiedades de los fluidos.** Cuando en el agua subterránea se alcanzan concentraciones elevadas pueden producirse variaciones de densidad, y como consecuencia, alteraciones en el flujo de la fase fluida en el subsuelo. Generalmente las concentraciones en fase disuelta no alcanzan una magnitud tal que pueda alterar el comportamiento de la fase acuosa. No obstante, hay casos que este fenómeno ha de tenerse en cuenta, como en problemas de contaminación por sales, o en acuíferos costeros, donde será de gran importancia definir la posición de la interfase y la influencia de las mareas.
- **Flujo multifase.** Aquellos emplazamientos en los que se detecta la presencia de fases no acuosas (NAPL), ya sean más o menos densas que el agua (DNAPL o LNAPL), muestran una mayor complejidad a la hora de modelizar, ya que la propia lentícula (o lentículas) de fase no acuosa constituye un foco de contaminación y las posibles oscilaciones del nivel freático pueden haber originado una franja de suelo afectado que a su vez actúa como foco de contaminación secundario.

El desplazamiento de la fase no acuosa en el subsuelo se produce fundamentalmente por gravedad. A la hora de definir el modelo conceptual es frecuente asumir que la lentícula de NAPL no se desplaza y que la movilización de contaminantes se produce por disolución y posterior transporte en las aguas subterráneas. No obstante, también existen modelos para estimar el flujo de dos o más fases en movimiento, pero se soportan en una compleja definición del medio, que en la mayoría de las ocasiones es inabordable.

- **Procesos geoquímicos y bioquímicos.** El modelo conceptual debe considerar la influencia de este tipo de procesos en el transporte y en las concentraciones de los contaminantes considerados. Algunos de los principales procesos que hay que contemplar son:
  - *Sorción.* Bajo este nombre se incluyen los procesos de adsorción, absorción, quimisorción e intercambio catiónico. Se trata de procesos complejos que dependen de la geoquímica del medio, del flujo del agua subterránea, de la superficie de contacto entre las partículas del suelo y el agua subterránea y de la concentración de contaminantes en el agua.

– *Degradación.* Los procesos de degradación pueden llegar a tener un peso importante en el comportamiento de los contaminantes en el medio y por tanto el modelo conceptual debe contemplarlos en caso de que se tenga constancia de su existencia.

Son procesos complejos en los que intervienen un número elevado de factores, entre los cuales cabe destacar: tipo de contaminantes, presencia y tipo de microorganismos, condiciones de pH, Eh y temperatura, y geoquímica del agua subterránea. También pueden ser relevantes otros procesos como la formación de precipitados químicos (p.e. sales complejas químicamente estables) o complejos coloidales, que condicionan la movilidad de los contaminantes.

En la figura 4 se representa gráficamente el proceso global de definición de los procesos de transporte.

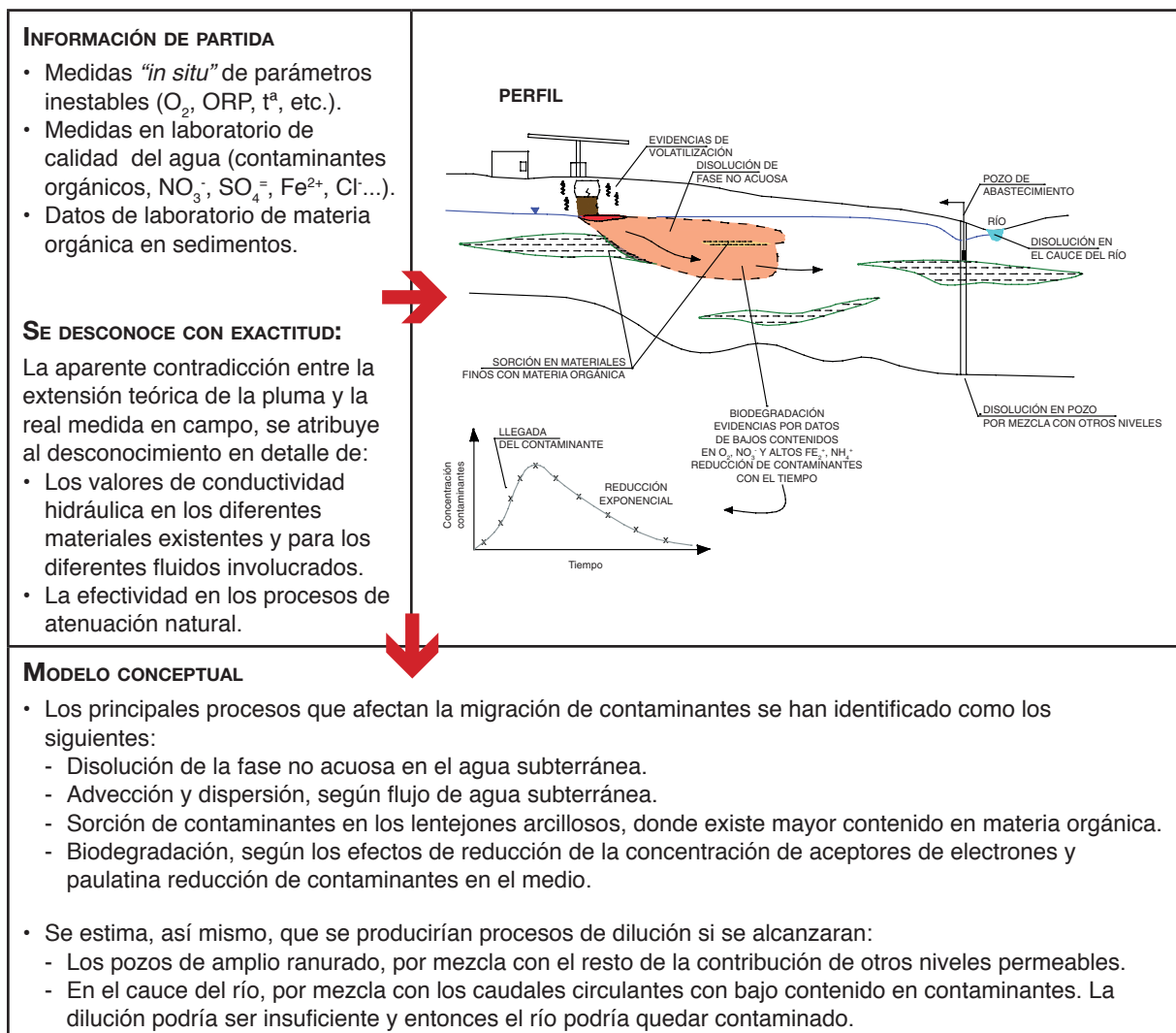


Figura 4. Construcción del modelo conceptual. Identificación de procesos.

## 2.3 FASE III. CRITERIOS PARA DECIDIR SI SE PRECISA UN MODELO MATEMÁTICO

Actualmente existen gran variedad de programas informáticos que pueden utilizarse para modelizar el flujo y transporte de los contaminantes en el subsuelo.

A continuación se relacionan los principales criterios que deben considerarse para decidir si se precisa la utilización de un modelo matemático en la simulación de un sistema. En el capítulo 3 se relacionan los tipos de modelos matemáticos y cómo encontrar el más idóneo según el problema y el sistema en estudio.

### 2.3.1 Objetivos del estudio

El primer paso a la hora de valorar la posible aplicación de un modelo matemático es definir los objetivos del estudio, es decir, qué es lo que pretendemos obtener aplicando un modelo matemático en un determinado caso.

Los objetivos planteados pueden ser muy variables; entre los más comunes se encuentran:

- Definir la evolución de penachos contaminantes en aguas.
- Evaluar la exposición de receptores potenciales.
- Valorar la perdurabilidad de la contaminación en el medio.
- Evaluar la viabilidad de distintas alternativas de actuación.

Los modelos matemáticos pueden utilizarse a modo de *screening* para identificar, por ejemplo, cuáles pueden ser los contaminantes con una mayor movilidad. Pueden también ser modelos muy elaborados para evaluar con precisión situaciones que requieran un mayor grado de detalle, por ejemplo, cuál sería el número de pozos, su disposición y los caudales idóneos en un sistema de recuperación del hidrocarburo presente en una lentícula de LNAPL.

En ocasiones no se modeliza un sistema completo, sino que únicamente se modeliza una parte del mismo; como puede ser una determinada vía de migración o una zona concreta de un emplazamiento, lo que simplifica en gran medida el modelo matemático necesario y presenta menos requerimientos en cuanto a datos y dedicación, principalmente.

### 2.3.2 Criterios de decisión

- **Precisión del modelo.** La selección del modelo matemático tendrá que tener en consideración el grado de precisión requerido en los resultados. Así, una modelización realizada para evaluar la posible afección de una captación de agua de uso público, requiere una precisión elevada, puesto que sus resultados servirán de criterio para establecer las medidas de actuación oportunas.
- **Disponibilidad de tiempo.** En ocasiones la urgencia en disponer de resultados cuantitativos para la toma de decisiones no permite desarrollar modelos complejos como pueden ser los modelos numéricos, puesto que pueden requerir semanas, meses o incluso años de trabajo.



En estos casos se recurre a soluciones analíticas que, a pesar de que pueden no suministrar datos tan precisos, pueden elaborarse en unos días.

- **Recursos.** A medida que los modelos matemáticos se van haciendo más complejos, es necesario incrementar el número de datos específicos del emplazamiento estudiado, para reducir la incertidumbre en los resultados debido al desconocimiento de algunos parámetros. Esto supone un coste al que hay que añadir la dedicación de técnicos cualificados, que puede ser grande en función de la complejidad del modelo matemático.

En la selección del modelo matemático debe considerarse la disponibilidad de recursos económicos y técnicos como uno de los criterios decisivos.

- **Disponibilidad de datos.** La cantidad y calidad de los datos de los que se disponga es un factor de peso a la hora de decidir la viabilidad de elaborar un modelo matemático. En ocasiones la escasez de datos no justifica el llevar a cabo un modelo matemático o, al menos, uno complejo.
- **Complejidad.** Es preciso valorar la complejidad del sistema que se pretende modelizar y determinar si las simplificaciones que habrán de asumirse para elaborar el modelo matemático no van a suponer una merma en la precisión de los resultados y si éste va a permitir representar los principales procesos que condicionan el movimiento de los contaminantes en el subsuelo.

Por otro lado, el hecho de disponer de un volumen grande de datos no significa necesariamente optar por modelos matemáticos de elevada complejidad, sino que puede que, para los objetivos que nos hayamos planteado, sea suficiente una aproximación analítica y que un modelo numérico sea un gasto innecesario de recursos.

- **Exigencias adicionales.** En buena parte de los problemas que requieren aplicar técnicas de simulación es preciso respetar exigencias particulares, por ejemplo, de tipo corporativo para determinadas empresas, o de determinadas autoridades administrativas competentes, etc. Tener en cuenta estos criterios desde el principio mejorará el grado de aceptación final de los resultados.



### 3. SELECCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

#### 3.1 INTRODUCCIÓN

Actualmente, los modelos matemáticos comerciales permiten a usuarios sin grandes conocimientos informáticos ni de cálculo resolver complejas ecuaciones analíticas y realizar análisis estadísticos, que en otro tiempo requerían mucho tiempo y esfuerzo de un especialista para su desarrollo y verificación.

No obstante es preciso que el usuario entienda los procesos que se están considerando, cómo se representan y cómo los parámetros de entrada influyen en el resultado. Por ello, los modelos no deben tratarse como “cajas negras”, y hay que tener siempre presente que lo más importante en todo el proceso de modelización es la calidad del modelo conceptual y la forma en que éste se traslada a un determinado modelo matemático: el modelo matemático no es más que una simplificación del modelo conceptual, que a su vez supone una simplificación de la realidad.

#### 3.2 TIPOS DE MODELOS MATEMÁTICOS

Dentro de los modelos matemáticos se pueden distinguir diversos tipos en función de sus formas de aproximación a la realidad.

Una primera diferenciación distinguiría los modelos *determinísticos* de los *probabilísticos* o *estocásticos*

En el primer tipo de ellos, ninguna variable está sometida a variaciones aleatorias, y se describen las relaciones causa-efecto con certeza; el comportamiento futuro de un sistema está exacta y explícitamente determinado por el estado actual del sistema y las interacciones presentes entre los elementos. No obstante, y ante la dificultad de conocer exactamente un sistema en todas sus variables, normalmente se asume que un modelo determinístico ofrece un comportamiento medio de los componentes de un sistema.

Los modelos probabilísticos son también modelos predictivos en los que se asume que el sistema investigado puede estar en diferentes estados en cada momento con diferente probabilidad; si se conocen las distribuciones de probabilidad que gobiernan el sistema en un momento dado y las fuerzas que lo hacen evolucionar, entonces se puede predecir la distribución probabilística del sistema en otros momentos.

Habitualmente se utilizan con mayor asiduidad los modelos determinísticos debido a que ofrecen unas buenas predicciones y emplean herramientas de cálculo de más sencilla aplicación y bien contrastadas.

Otra división genérica habitual considera los modelos matemáticos de tipo *analítico* o bien *numérico* (ver figura 5).

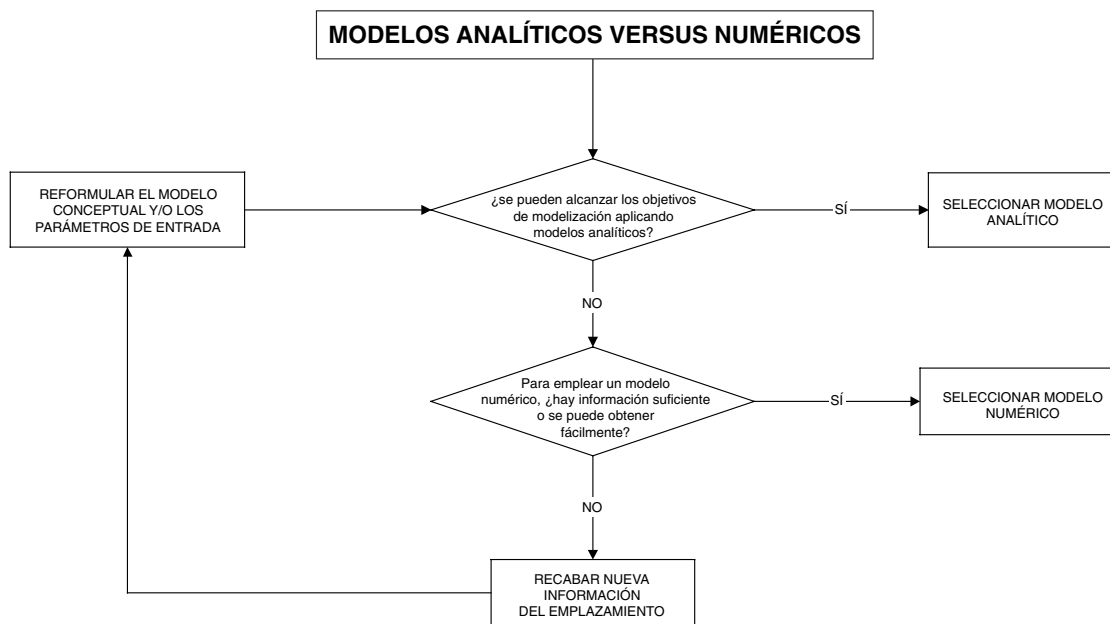


Figura 5. Modelos analíticos frente a numéricos.

Los modelos analíticos utilizan técnicas matemáticas para obtener una solución exacta y debido a ello únicamente se suelen aplicar a sistemas sencillos de flujo y transporte (sistemas homogéneos con geometrías simples). Este tipo de modelos son muy útiles en una primera aproximación al comportamiento del sistema, y pueden cubrir muchas de las necesidades habituales en los estudios de movimiento de contaminantes. En general requieren menos datos, y proporcionan soluciones rápidas, aunque también pueden combinarse con análisis probabilístico (*Monte-Carlo*).

En los métodos *numéricos*, las ecuaciones se resuelven de manera aproximada haciendo una discretización en el tiempo y en la región del acuífero que se va a modelar. La ecuación diferencial se transforma en un grupo de ecuaciones algebraicas en las que las incógnitas son las variables de estado del sistema, como por ejemplo las alturas piezométricas en los puntos del dominio ya discretizado. Este tipo de métodos son especialmente útiles en aquellos problemas en los que las propiedades del acuífero o del flujo varían con el tiempo y/o espacialmente. Las técnicas de resolución para estos métodos más utilizadas son las diferencias finitas y los elementos finitos.

Los métodos de *diferencias finitas* realizan una discretización por medio de un número finito de bloques rectangulares, cada uno con sus propiedades hidrogeológicas y con un nodo en el centro donde se definen las propiedades para todo el bloque. Las ecuaciones diferenciales se aproximan usando ecuaciones en diferencias que relacionan cada bloque con los que están a su alrededor.

La discretización con *elementos finitos* se realiza dividiendo la región en subregiones que pueden tener forma triangular o de cuadrilátero, y los nodos se toman en los vértices de los triángulos o cuadriláteros; el método utiliza una formulación integral para generar un sistema de ecuaciones algebraicas y usa funciones suaves continuas por partes, para aproximar la o las soluciones de las ecuaciones formuladas.

En la Tabla 2 se comparan algunas características en la aplicación preferente de métodos analíticos o numéricos.

Métodos analíticos	Métodos numéricos
<p>Proporcionan soluciones exactas a ecuaciones que describen la migración de los contaminantes. Deberían utilizarse en las primeras fases de evaluación, antes de pasar a modelos numéricos.</p>	<p>Ofrecen soluciones aproximadas a las ecuaciones que gobiernan el transporte de contaminantes. En los modelos distribuidos, el espacio y el tiempo, se discretizan en intervalos.</p>
<p><b>Ventajas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Los cálculos son muy rápidos y son numéricamente estables.</li> <li>• La relevancia de cada parámetro sobre el resultado se puede ver fácilmente.</li> <li>• Pueden utilizarse para examinar sistemas complejos, subdividiéndolos en un grupo de sistemas simplificados.</li> <li>• Se pueden acoplar técnicas estadísticas tipo Monte-Carlo de una forma más sencilla que a los numéricos.</li> </ul>	<p><b>Ventajas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Permiten representar gran cantidad de aspectos del comportamiento del sistema: se pueden asignar diferentes parámetros a cada celda, lo que permite considerar variaciones laterales y verticales, la geometría del modelo puede diseñarse de forma que refleje la forma del sistema, permiten trabajar con varias capas,...</li> <li>• Se pueden obtener resultados con un alto grado de confianza, siempre que existan suficientes datos de partida.</li> </ul>
<p><b>Desventajas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Requieren que la mayoría de los parámetros permanezcan constantes en el espacio y el tiempo.</li> <li>• Es posible que no exista una solución analítica si la física del sistema es complicada.</li> <li>• Se aplican a sistemas de flujo sencillos, en los que es aceptable la simplificación.</li> </ul>	<p><b>Desventajas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Se requiere un importante grado de experiencia en hidrogeología y transporte de contaminantes.</li> <li>• Requieren una gran cantidad de datos de entrada.</li> <li>• Implican un coste económico y temporal elevado.</li> <li>• La tendencia a considerar que los resultados del modelo son correctos incluso cuando existe una considerable incertidumbre acerca del sistema.</li> <li>• Pueden llevar a inestabilidad numérica.</li> </ul>
<p><b>Aplicaciones</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Representar el movimiento del contaminante y predecir posibles impactos.</li> <li>• Realizar un test sobre las hipótesis del modelo conceptual.</li> <li>• Chequear los modelos numéricos.</li> </ul>	<p><b>Aplicaciones</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Cuando se necesita una aproximación más sofisticada que la proporcionada por soluciones analíticas, que sea capaz de reflejar variaciones espaciales, temporales, procesos de transporte complejos, etc.</li> <li>• Si se requiere simular actuaciones de remediación, p.e. ubicación y régimen de bombeo de pozos de extracción.</li> </ul>
<p><b>Soporte</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos simples mediante calculadora.</li> <li>• Hojas de cálculo.</li> <li>• Programas informáticos comerciales, de libre disposición o de desarrollo interno.</li> </ul>	<p><b>Soporte</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Programas informáticos comerciales o de libre disposición o desarrollados por el usuario.</li> </ul>
<p><b>Categorías</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Fórmulas simples.</li> <li>• Superposición de fórmulas.</li> <li>• Secuencias de fórmulas.</li> </ul>	<p><b>Códigos y métodos de cálculo</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Diferencias finitas: las coordenadas de espacio/tiempo se dividen según una malla prismática rectangular; el flujo y transporte se resuelven por aproximaciones directas.</li> <li>• Elementos finitos: el dominio espacial se divide en elementos de formas diversas, habitualmente triangulares o en cuadriláteros; la variación de los parámetros a lo largo de un elemento se realiza según una función polinómica.</li> <li>• Métodos de solución: seguimiento de partículas, métodos eulerianos, lagrangianos, método de las características (MOC).</li> </ul>

Tabla 2. Comparación entre métodos analíticos y numéricos.

### 3.3 OTROS ASPECTOS A CONSIDERAR EN LA SELECCIÓN

Otras circunstancias que han de decidirse a la hora de seleccionar el modelo son las condiciones que deben ser representadas, por ejemplo si se puede o es necesario considerar el modelo en estado estacionario o si es preciso incluir variaciones temporales en las condiciones del sistema. En ambos casos la componente tiempo está, aunque sea implícitamente. Para flujo, el régimen permanente se alcanza cuando no hay cambios en el balance y potencial en la zona.

Los modelos más simples consideran el estado *permanente o estacionario* donde todas las entradas y salidas del sistema son constantes en el tiempo. Este tipo de modelos se utilizan para representar modelos de flujo o de transporte en los que p.e. el penacho de contaminación se puede considerar estabilizado, tanto porque el sistema haya evolucionado hacia esa situación, como porque el periodo de análisis sea tan corto que no sean observables variaciones importantes.

Los modelos en *régimen variable o transitorio* consideran cambios en el comportamiento del sistema a lo largo del tiempo (en alguna variable de estado del sistema), y son apropiados en el caso de que existan evidencias de modificaciones en la dirección de flujo o en las concentraciones de contaminantes.

Además del tiempo, otro criterio interesante en la selección es la necesidad de considerar la simulación en una, dos o tres dimensiones. Los modelos analíticos consideran sólo el flujo en una dirección, aunque habitualmente pueden incluir fenómenos de dispersión paralelos o perpendiculares a la dirección de flujo. Los modelos numéricos permiten la simulación de flujos horizontales y verticales.

Otros factores que deberían ser considerados en la selección de los modelos serían:

- **Definición del término fuente:** La mayor parte de las soluciones analíticas asumen que el término fuente (foco) es constante o se va reduciendo según una función conocida. Si este término evoluciona de una forma más complicada en el tiempo, se requeriría el uso de soluciones analíticas sucesivas o el uso de un modelo numérico.
- **Complejidad del sistema de flujo:** Los modelos analíticos permiten únicamente modelizar sistemas de flujo sencillo; en casos tales como acuíferos multicapa o en los que la dirección de flujo varíe espacial o temporalmente se hace necesario el uso de modelos numéricos.
- **Mecanismos de flujo y transporte:** El flujo, y por tanto el transporte de contaminantes, puede producirse a través de sistemas granulares, fisurados o mixtos. Aunque los modelos numéricos permiten la simulación de situaciones más complicadas, también existen soluciones analíticas para buena parte de los escenarios típicos. Es importante señalar que estos modelos analíticos pueden ser particularmente interesantes en las primeras fases de aproximación al conocimiento del sistema.
- **Homogeneidad:** Las soluciones analíticas asumen que el acuífero es homogéneo y no pueden incluir variaciones laterales; en los modelos numéricos es posible considerar estas variaciones (aunque supeditándolas al tamaño de la malla). También es posible ajustar un sistema heterogéneo por compartimentación del sistema o a través del uso de aproximaciones probabilísticas.

- **Procesos de transporte a representar** (advección, dispersión, degradación, sorción). Las soluciones analíticas contemplan procesos de dispersión, sorción lineal o decrecimiento exponencial; la modelización de procesos no lineales requiere el uso de modelos semianalíticos o numéricos.

En el caso de que se disponga de información limitada, lo cual suele suceder en especial durante las primeras fases de investigación (IE), es aconsejable intentar en primer lugar una aproximación analítica. En ocasiones, una primera simulación que considere estimaciones para el más desfavorable de los casos puede servir como justificación para el avance (o no) de un análisis de mayor detalle.

Se recomienda por tanto, que la modelización se plantee en fases de progresivo detalle:

- Nivel 1.** Uso de cálculos teóricos simples para conocer cómo se reparte el contaminante entre suelo/agua  
↓
- Nivel 2.** Uso de cálculos simples para determinar la dilución en el flujo de agua subterránea  
↓
- Nivel 3.** Uso de ecuaciones analíticas que tengan en cuenta los procesos de atenuación, dispersión y sorción  
↓
- Nivel 4.** Uso de modelos numéricos que representen el transporte de la contaminación

La decisión sobre avanzar en el proceso debe hacerse considerando:

- Los beneficios obtenidos en analizar el problema utilizando una aproximación más sofisticada. Este caso se puede ilustrar por ejemplo cuando el resultado de la modelización se utilice para señalar objetivos de remediación: el ajuste detallado del sistema puede dar soluciones más reales y menos conservadoras, que a su vez redundarán en una reducción del coste de las medidas de limpieza a implantar.
- Si los recursos dedicados al uso de modelos complejos está avalado por la calidad de los datos disponibles: un modelo sencillo, pero cuyos datos de partida sean suficientes en número y calidad, puede ofrecer resultados de mayor confianza que un modelo más complejo, pero cuya información de partida presente un grado de incertidumbre mayor. Por ello, y aún en el caso de que la dotación económica para el modelo posibilite el uso de herramientas muy complejas, es posible que sea mejor derivar parte de ellos a conseguir más datos, (por ejemplo de permeabilidad), que permitan ajustar un modelo matemático menos sofisticado pero cuyos resultados den un mayor grado de confianza.

El beneficio de avanzar en el uso de modelos más sofisticados no es fácil de cuantificar, y tal decisión sólo puede realizarse si se dispone de una amplia experiencia y un criterio técnico cualificado.

### **3.4 PROCEDIMIENTO GENERAL DE SELECCIÓN**

En la selección del modelo, se deberían seguir unas directrices generales básicas tales como:

- Identificación de fuentes, vías de transporte y receptores que necesitan ser representados (por ejemplo el movimiento vertical a través de zona no saturada).
- Identificar el área que necesita ser representada.
- Identificación de los procesos que necesitan ser representados por el modelo (biodegradación, sorción, ...).
- Decisión de cómo esos procesos se representarán matemáticamente.

El técnico encargado de desarrollar el modelo deberá evaluar también:

- Los requerimientos de datos del modelo y valorar si los disponibles son suficientes para su construcción.
- Si el modelo permite una adecuada definición del término fuente, particularmente si se sabe que éste cambia con el tiempo.
- Si se pueden incorporar las principales vías de transporte y receptores.
- Si tiene la capacidad de representar adecuadamente los procesos clave identificados (p.e. biodegradación).

Una buena práctica consiste en listar cada uno de los componentes del modelo conceptual que necesita ser representado y anotar cómo puede ser tratado por el modelo.

En la mayor parte de los casos no existe un modelo capaz de cumplir todos los criterios, en cuyo caso habrá que considerar otras cuestiones tales como si la aproximación del modelo es suficientemente válida, o si se puede seguir usando el modelo, pero sólo para simular partes del sistema.

En último término, la selección del modelo es subjetiva y depende de la experiencia profesional previa del técnico. En la práctica, el modelizador dispondrá de una serie de aproximaciones o modelos específicos a considerar y elegirá aquél que mejor se ajuste a cada situación. También deberá chequear que:

- El código del modelo está suficientemente verificado. A este respecto, en la presente guía se incluye un listado no exhaustivo sobre programas comerciales y no comerciales de uso extendido.
- El modelo es aceptable para las partes interesadas, tanto para clientes industriales como para la Administración.



### 3.5 VALORES DE LOS PARÁMETROS

Los factores que necesitarán ser considerados en la definición de los parámetros característicos serán:

- Variabilidad natural de un parámetro (p.e. conductividad hidráulica), tanto lateral como verticalmente (fenómenos de heterogeneidad y anisotropía). Deberá tenerse en cuenta que los datos disponibles corresponden a medidas discretas, y que para introducirlos en un modelo, es necesario establecer interpolaciones o extrapolaciones.
- Incertidumbre en la medida de los parámetros, como resultado del método de muestreo o de las prácticas analíticas. Relacionado con este aspecto, habrá que ser consciente de que en el caso de no disponer de datos suficientes, será necesario volver a realizar las medidas que se considere necesario. Si esto no es posible, se podrá realizar una estimación basada en datos bibliográficos o en el criterio profesional; en ese caso, estos valores necesitarán ser revisados como parte del refinamiento del modelo para mejorar la simulación de las condiciones observadas. El análisis de la sensibilidad del modelo marcará si estos parámetros son críticos en los resultados, en cuyo caso deberán obtenerse los datos de campo más refinados.
- Dependencia de la escala: los valores de un parámetro como la dispersión, están muy influenciados por la escala de trabajo.
- Variación temporal: estacional, por sistemas de explotación.
- Condiciones ambientales: algunos parámetros pueden variar si se modifican las condiciones geológicas o bioquímicas. Así, por ejemplo el tipo e intensidad de los procesos de degradación bacteriana dependerá de si el ambiente es aeróbico o anaeróbico.

La estrategia recomendada para determinar los valores de entrada del modelo consta de:

- La revisión de todos los datos disponibles. Es útil disponer de tablas o gráficos en los que se represente la variación espacial y temporal de los parámetros.
- La definición de los parámetros característicos del modelo, acotando sus rangos de variación.
- La documentación de las bases de datos utilizadas en la selección de parámetros, en el caso de que éstos hayan sido estimados.
- La consulta con fuentes de información de reconocida solvencia (p.e. EPA. API, etc.).

Entre las opciones para definir estas variables, será necesario decidir si:

- Se usan los valores o estimaciones más probables, basándose en análisis estadístico de los datos disponibles. La desventaja de utilizar valores medios es que no se tiene en cuenta la variabilidad natural del sistema, lo que puede llevar a errores en los resultados, especialmente cuando la migración de contaminantes se produce a través de vías preferentes.
- Se utilizan valores asignables al “peor” caso para obtener predicciones conservativas del modelo. Es importante pensar en el efecto de la combinación de diferentes parámetros en los resultados del modelo, que pueden dar lugar a situaciones no realísticas o erróneas (por ejemplo, una alta conductividad hidráulica y un alto gradiente). Además, el uso de valores asimilables al “peor” caso, no lleva necesariamente a que el modelo deba considerarse

como conservativo. Por ejemplo, se pueden utilizar los valores máximos y mínimos de la serie de datos disponible, sin que ésta forzosamente represente el rango de los valores más característicos del sistema.

- Es posible o adecuado el análisis probabilístico. Las funciones de distribución probabilísticas pueden utilizarse para describir la variación esperable o la incertidumbre en un parámetro. En ese caso, los resultados del modelo se describen con una función de distribución que describe la probabilidad de que un rango de salida.

Los modelos analíticos requieren que las variables de control estén representadas por un valor, por lo que hay que ser especialmente cuidadosos en su selección. La combinación de modelos analíticos y estocásticos ofrece la posibilidad de obtener rangos de valores, aunque no permite variaciones espaciales o temporales.

Los modelos numéricos permiten variaciones laterales y verticales, aunque es necesario asignar un parámetro medio para definir cada nodo del modelo, lo que suele requerir la interpolación entre puntos de medida.

En la tabla 3 se incorpora un listado de los parámetros que habitualmente son necesarios en los procesos de modelización, así como una estimación de su relevancia en cuanto a los resultados a obtener. A modo orientativo, se indican las necesidades en las fases exploratoria y detallada en una investigación.

No obstante existen casos concretos en los que se pueden apreciar sensibilidades específicas diferentes, por lo que su importancia relativa debe evaluarse caso por caso.

Los valores de entrada del modelo pueden ser medidos u obtenidos a partir de la bibliografía. Por ejemplo, las propiedades físico-químicas de los compuestos se obtienen normalmente de investigaciones de laboratorio ajenas al proyecto concreto de investigación, mientras que otros como la permeabilidad deben ser obtenidos para cada emplazamiento. Hay programas de estimación indirecta de parámetros a partir de otros (p.e. textura, densidad aparente, porosidad, etc.).

Hay parámetros que inicialmente (investigación exploratoria) pueden estimarse a partir de otros, p.e. la conductividad hidráulica y la porosidad pueden estimarse a partir de curvas granulométricas (utilizando extensas bases de datos), pero cuando se requiere un nivel de detalle mayor (investigación de detalle), es imprescindible su medida empírica, con ensayos de campo en el caso de K, o con medida en laboratorio a partir de muestras inalteradas.

El proceso de modelización matemática debe ser considerado desde las primeras fases de investigación ya que buena parte de los datos que se requieren deben obtenerse mediante ensayos en campo o medidas en laboratorio. La determinación del contenido de contaminantes en un suelo o su distribución granulométrica no requieren la obtención de muestras inalteradas, mientras que para obtener valores de densidad total, porosidad o humedad es preciso tomar precauciones especiales para que se mantenga su integridad.

Vías	Parámetro de entrada	Símbolo	Unidades	Sensibilidad	Investigación Exploratoria	Investigación Detallada
<b>Transporte en zona no saturada</b>	<b>Concentración área fuente</b>	$C_s$	mg/kg	Específico de cada caso	M	M
	<b>Porosidad total del suelo</b>	$\Theta_T$	cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup>	Muy sensible	E	M
	<b>Fracción de carbono orgánico</b>	$f_{oc}$	g C/g suelo	Muy variable y específico	E	C
	<b>Coefficiente distribución carbono-agua</b>	$K_{oc}$	cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O/g C	Específico compuesto	E	E
	<b>Coefficiente distribución suelo-agua</b>	$K_s$	cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O/gsuelo	$f_{oc} \times K_{oc}$	E	E
	Anchura de la fuente paralela al flujo de agua subterránea	W	cm	Muy variable; moderadamente sensible	M	M
	Densidad total del suelo	$\rho_s$	g/cm <sup>3</sup>	Varía poco; sensibilidad limitada	E	M
	Contenido volumétrico aire	$\Theta_{as}$	cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup>	No sensible para esta vía	E	E
	Contenido volumétrico agua	$\Theta_{ws}$	cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup>	Variable según textura	E	E
	Infiltración de agua	I	cm/año	Muy variable; moderadamente sensible	E	E
	Espesor de la zona de mezcla	$\delta_{gw}$	cm	No varía mucho; sensibilidad moderada	E	EC
	Velocidad de Darcy	$U_{gw}$	cm/año	Moderadamente sensible	C	C
	Coefficiente de degradación	$\lambda$	año <sup>-1</sup>	Específico del compuesto; moderadamente sensible	E	C
	Profundidad de las fuentes	$L_s$	cm	Muy variable; moderadamente sensible	E	M
	Espesor de la zona vadosa	$h_v$	cm	Muy variable; moderadamente sensible;	M	M
Solubilidad del constituyente puro en agua	S	mg/l	Específico del compuesto; moderadamente sensible	E	E	
<b>Transporte en zona saturada</b>	<b>Concentración del área fuente</b>	$C_s$	μg/l	Específico cada caso	M	M
	<b>Fracción de carbono orgánico</b>	$f_{oc}$	g C/g suelo	Muy variable, y específico	E	C
	<b>Coefficiente de distribución carbono-agua</b>	$K_{oc}$	cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O/g C	$f_{oc} \times K_{oc}$	E	E
	<b>Coefficiente de distribución suelo-agua</b>	$K_s$	cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O/gsuelo	Muy variable y específico	E	E
	<b>Conductividad hidráulica</b>	k	cm/s	Muy variable y específico	E	M
	<b>Gradiente hidráulico</b>	i	cm/cm	Muy variable y específico	M	M
	<b>Velocidad media</b>	v	cm/día	Específico	C	C
	Anchura de la fuente paralela a la dirección de flujo	W	cm	Muy variable y específico; moderadamente sensible	M	M
	Porosidad total	$\Theta_T$	cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup>	Moderadamente sensible	E	M
	Densidad total del suelo	$\rho_s$	g/cm <sup>3</sup>	Varía poco; sensibilidad limitada	E	M
	Espesor saturado	b	cm	Específico; moderadamente sensible en modelos numéricos	M	M
	Coefficiente almacenamiento	S	adimensional	Sensibilidad limitada; depende tipo acuífero	E	M
	Recarga (infiltración)	I	cm/año	Muy variable y específica; sensibilidad limitada	E	E
	Dispersividad longitudinal	$a_x$	cm	Varía poco; sensibilidad limitada	E	E
	Dispersividad transversal	$a_y$	cm	Varía poco; sensibilidad limitada	E	E
	Dispersividad vertical	$a_z$	cm	Varía poco; sensibilidad limitada	E	E
	Coefficiente de degradación	$\lambda$	año <sup>-1</sup>	Específico del compuesto; sensibilidad moderada	E	C
Tiempo desde el vertido	T	días	Muy variable y específico; sensibilidad moderada			

En **negrita** factores a los que el modelo presenta una mayor sensibilidad  
M: medido; E: estimado; C: calculado

**Tabla 3. Parámetros necesarios en los procesos de modelización de transporte de contaminantes.**

### **3.6 VERIFICACIÓN DEL CÓDIGO DEL MODELO**

Existe una gran diversidad de modelos matemáticos comerciales cuyos códigos de funcionamiento están ampliamente contrastados debido a lo extensivo de su uso. No obstante, siempre que el usuario vaya a utilizar un programa informático por primera vez, debería verificar el código matemático antes de su utilización, de forma que pueda confirmar que:

- Las ecuaciones de flujo y transporte están correctamente resueltas: no es extraño que debido a errores tipográficos algunas funciones de cálculo estén incorrectamente traspuestas; también son típicos los problemas asociados a diferencias de notación, (por ejemplo debido al uso de comas y puntos en decimales y millares, que pueden llevar a distorsiones importantes del cálculo) o el uso de unidades de medida no consistentes.
- Todo el código está operativo y ejecuta las funciones seleccionadas sin interferencias.

El modo más común y sencillo de verificar un modelo es chequearlo frente a otro. Esto también supone una buena práctica cuando es la primera vez que se utiliza, para ir verificando su funcionamiento. Los modelos analíticos pueden ser chequeados mediante la observación intuitiva de que los resultados dependen de los parámetros de entrada y que, para escenarios simples los cálculos son correctos (p.e. cese del movimiento en caso de gradiente nulo). Es esencial verificar que los resultados de cada fase de modelización son coherentes con el juicio profesional, un proceso que requiere una experiencia hidrogeológica importante.

### **3.7 INFORME**

La selección de un determinado modelo debe ser completamente documentada, lo que incluye la justificación de:

- Los objetivos de la modelización.
- La justificación de porqué el modelo es apropiado para la consecución de los citados objetivos.
- La descripción del modelo matemático, incluyendo sus pertinentes referencias. Para modelos desarrollados de forma interna por el consultor se deberá incluir una descripción detallada del modelo, incluyendo todas las ecuaciones de control.
- Detalles de la verificación del modelo.
- Detalles sobre como se ha trasladado el modelo conceptual a un modelo matemático, junto a la discusión sobre la relevancia de las simplificaciones requeridas.
- Justificación de las asunciones y limitaciones del modelo, y cómo se han tenido en cuenta en la interpretación de los resultados del modelo.

## 4. METODOLOGÍA DE MODELIZACIÓN

### 4.1 ASPECTOS TEÓRICOS

Una vez que se ha tomado la decisión de desarrollar un modelo matemático de simulación, y se ha seleccionado el modelo a utilizar, comienza el proceso de modelización *sensu stricto*, el cual se efectuará siguiendo una serie de fases que se exponen a continuación.

#### 4.1.1 Diseño del modelo

##### 4.1.1.1 Dominio del modelo, condiciones de contorno e iniciales

El primer paso en la construcción del modelo es definir el área de interés, esto es la región del sistema a ser representada. Para establecerla se pueden utilizar los siguientes criterios:

- Fuente y área contaminada.
- Localización de potenciales receptores.
- Presencia de límites naturales: geológicos, cuerpos de agua superficial, etc.

Todos estos límites se representan en los modelos matemáticos según lo que se denominan condiciones de contorno y tienen gran influencia en los resultados finales del modelo. Los más frecuentes suelen ser asignados a condiciones de nivel constante (esto es, se supone que existe un flujo de agua suficiente para permitir que en las celdas de borde se mantenga una cierta altura piezométrica constante como en un lago) o de flujo nulo (borde que sigue exactamente la misma dirección de las líneas de flujo; a su través, esto es desde el exterior del modelo hacia el mismo, el flujo es nulo, p.e. límites impermeables).

Además de los condicionantes morfológicos, es necesario definir las condiciones temporales que se desea modelizar, que corresponden esencialmente a situaciones en régimen permanente o transitorio.

En esta primera fase se asignarán además las condiciones iniciales de nivel piezométrico y de concentraciones, así como las variables físico-químicas que van a determinar el transporte: porosidad, densidad, permeabilidad, fracción de carbono orgánico, etc.

La definición detallada de las condiciones iniciales es fundamental en el caso de trabajar con modelos en régimen transitorio. Para los modelos en régimen permanente, sólo es necesario ajustar las condiciones de borde.

##### 4.1.1.2 Definición de criterios de aceptación del modelo matemático

La validez de un modelo se basa en la demostración de que éste puede reproducir adecuadamente las observaciones de campo. Por ello, el modelo debe incluir entre sus variables aquellas que deban ser contrastadas y el rango aceptable de variación admisible (por ejemplo un porcentaje del valor esperable o valores dentro del orden de magnitud).

Este criterio de aceptación debe consensuarse previamente con IHOBE o cualquiera que sea el organismo regulador, a fin de que los resultados del modelo puedan considerarse aceptables.

#### **4.1.2 Calibrado del modelo**

Los parámetros considerados en los modelos, responden habitualmente a simplificaciones de sistemas complejos o a aproximaciones para el caso en que no se conocen con certeza. En la mayor parte de los casos, estas variables han de ser refinadas, hasta que se alcance un buen ajuste con las condiciones de campo. Este proceso de prueba se denomina calibración.

El procedimiento de ajuste se puede sintetizar en los siguientes pasos:

- Se aplica un cambio al valor a un determinado parámetro.
- Examen del efecto de este cambio en los resultados del modelo.
- Reajuste del valor del parámetro para mejorar la simulación del modelo a las condiciones observadas, siempre dentro de un rango compatible con la realidad observada. En la realización de los cambios en las variables de control hay que tener en cuenta también que existen parámetros que son dependientes. Por ejemplo, el gradiente hidráulico es parcialmente dependiente de la conductividad hidráulica y no son esperables gradientes elevados en zonas de alta permeabilidad. La combinación de valores elevados de ambos parámetros puede dar lugar a un exceso de flujo, por encima de los valores reconocidos de recarga, y por tanto a un desajuste en el balance.
- Diagnóstico sobre si el modelo ofrece un ajuste aceptable a las condiciones observadas o si es necesario continuar con el proceso de refinamiento o incluso recabar más datos de campo. En este paso es fundamental consultar con IHOBE o con el agente regulador competente en cada caso, para acordar si se puede dar por finalizado el proceso de simulación con el grado de ajuste alcanzado. En todos los casos se debe considerar la posibilidad de revisar el modelo si con posterioridad se dispusiese de datos adicionales.

Así, el proceso de calibración o refinado del modelo incluye una revisión crítica de si las asunciones incorporadas al modelo son válidas, el grado de precisión con el que el modelo se ajusta a las observaciones y, si los parámetros utilizados en el ajuste final son creíbles. Normalmente, y con el fin de no introducir un exceso de variables a controlar, se ajusta en primer lugar el modelo de flujo, para posteriormente pasar a la simulación de la migración de contaminantes.

Es necesario señalar que incluso cuando un modelo proporcione una representación aceptable de las condiciones observadas, ello no significa que el modelo sea correcto (por ejemplo, el modelo puede simular las concentraciones en un determinado momento, pero puede fallar en la simulación de la migración a posteriori). También es importante tener presente que puede llegarse a alcanzar una misma situación a partir de múltiples combinaciones de parámetros, por lo que las soluciones no pueden considerarse únicas.

#### 4.1.2.1 Variables de control

En la tabla 4 se esquematizan las principales variables de control que deberían considerarse durante el proceso de verificación, así como cuáles son las causas más habituales de problemas durante la calibración:

Medida	Parámetros de control	Potenciales problemas que pueden llevar a resultados anómalos	Posibles fuentes de error en las medidas de campo
<b>Niveles Piezométricos</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Medidas puntuales y extrapolación (mapas piezométricos)</li> <li>• Gradientes (horizontales, verticales)</li> <li>• Variaciones temporales de nivel</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Condiciones iniciales</li> <li>• Condiciones de borde</li> <li>• Espaciado de malla</li> <li>• Periodos de tiempo de modelización</li> <li>• Simplificación excesiva del sistema</li> <li>• Ubicación de los puntos de observación fuera del centro de la malla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Medidas del nivel piezométrico o en la asignación a determinados puntos de observación o fechas</li> <li>• Construcción de los puntos de observación (por ejemplo, que afecten a varios acuíferos)</li> </ul>
<b>Flujo/Caudal</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aforos puntuales</li> <li>• Variación temporal de caudales</li> <li>• Ganancias o pérdidas en cauces</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Coeficientes de interacción río/acuífero</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Medidas de caudal</li> <li>• Separación del flujo base y de la escorrentía superficial</li> </ul>
<b>Concentraciones</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Medidas puntuales y extrapolaciones (mapas de isolíneas)</li> <li>• Secciones verticales</li> <li>• Variación temporal</li> <li>• Tiempos de residencia o de avance</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Condiciones iniciales</li> <li>• Condiciones de borde</li> <li>• Espaciado de malla</li> <li>• Periodos de tiempo de modelización</li> <li>• Simplificación excesiva de los procesos fisicoquímicos</li> <li>• Precisión numérica o inestabilidad</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Errores de laboratorio</li> <li>• Errores en el muestreo o en la preservación/ transporte</li> <li>• Construcción de los puntos de observación (cortocircuitos, efectos de mezcla por una amplia zona ranurada)</li> </ul>

**Tabla 4. Principales variables de control.**

Como comprobación final del ajuste del modelo es necesario verificar los resultados obtenidos de:

- El **balance de agua** en el modelo, esto es la diferencia entre entradas y salidas del sistema. Con esta revisión se pueden identificar potenciales problemas asociados a la propia matemática del modelo como pueden ser fallos de convergencia de las soluciones, o a los parámetros de control utilizados (condiciones de borde, recarga, explotación, etc.).
- El **balance de masas**, que puede servir para identificar problemas de tipo matemático (dispersión numérica, fallos de convergencia), o en la definición del sistema.

#### 4.1.2.2 Procedimientos de calibración

Durante la calibración es conveniente pasar de estimaciones cualitativas iniciales (por ejemplo, comparación visual de los niveles piezométricos) a técnicas cuantitativas de evaluación del ajuste.

A su vez, este proceso de refinamiento del modelo se puede efectuar mediante herramientas manuales (métodos de prueba-error) o automáticos (krigeado, métodos inversos: UCODE, PEST). Ambas requieren para su aplicación de un criterio técnico experimentado, con el fin de asegurar que se mantienen hipótesis aceptables dentro de las condiciones del sistema.

La ventaja del método manual es que durante el proceso, el modelizador va ganando en conocimiento de la sensibilidad del modelo, y es fácil comprobar si se mantienen condiciones realistas de simulación; su principal desventaja frente a los métodos automáticos es que se trata de un proceso que requiere mucho tiempo.

Los métodos inversos realizan una estimación automática de parámetros de acuerdo a una función objetivo definida. Para ello utilizan regresiones no lineales, que mediante un proceso iterativo, van ofreciendo valores cada vez más ajustados al objetivo.

#### **4.1.3 Análisis de sensibilidad**

El propósito de la realización de un análisis de sensibilidad es identificar qué variables tienen una mayor influencia en los resultados del modelo, y a partir de ello, decidir si se necesitan más datos experimentales para mejorar la definición de dichas variables. Además sirve para comprobar si la relación entre el rango de variación de los parámetros de control tiene un reflejo proporcional en los resultados, y si las variables más importantes del modelo matemático se corresponden con aquellas definidas de forma cualitativa en el modelo conceptual, o si acaso la sensibilidad es una función de las ecuaciones utilizadas.

Un aspecto a recordar es que este análisis proporciona información sobre la sensibilidad del modelo matemático, y no necesariamente sobre el sistema real.

Un análisis de sensibilidad requiere el cambio de uno o varios parámetros de control simultáneamente y la evaluación de la respuesta del modelo ante esas modificaciones. Los análisis de sensibilidad deben realizarse sobre todos los componentes del modelo.

Estos cambios deben realizarse dentro de los rangos observados o esperables, lo que a su vez llevará a determinar cuáles son los parámetros clave del modelo. Por ejemplo, un determinado análisis de sensibilidad podría mostrar que los cálculos del modelo son igualmente sensibles a la densidad total y a la conductividad hidráulica; las medias de ambos parámetros muestran que mientras el primero de ellos se mueve en un rango estrecho de valores, el segundo puede variar incluso órdenes de magnitud, lo que llevaría a calificar como variable clave a la permeabilidad. Tal como se ha comentado para el apartado de calibración, también habrá que tener en cuenta la interdependencia entre variables.



#### **4.1.4 Análisis de incertidumbre**

Este tipo de análisis es una manera de tener en cuenta la incertidumbre asociada a la asignación de los valores de entrada y su efecto en los resultados.

Normalmente este tipo de análisis se realiza, para los modelos determinísticos, utilizando simulaciones con el máximo y el mínimo de los valores de entrada. Hay que ser consciente de que este rango se obtiene a partir de las observaciones disponibles, pero puede ser diferente del rango de valores real en el sistema. Además, nuevamente es necesario asegurarse de que no se combinan valores contradictorios, que darían lugar a resultados poco realistas.

Este tipo de análisis se lleva a cabo de forma habitual mediante el uso de modelos probabilísticos.

#### **4.1.5 Revisión global del modelo**

Vistas en su conjunto, todas las acciones anteriores, suponen una revisión regular del modelo respecto a diferentes aspectos, con el fin de comprobar si las condiciones en las que se está trabajando suponen una aproximación aceptable.

Es fundamental ir revisando el modelo conceptual, y si las variables de entrada son suficientes, creíbles y llevan a unas respuestas razonables según las hipótesis de partida. También hay que asegurarse de que los escenarios considerados son relevantes en cuanto a los objetivos del proyecto y ser conscientes del ámbito que se está simulando (situación conservadora, más probable, optimista, ...).

En función de estas revisiones periódicas, se estará en disposición de aceptar el modelo, o de tomar decisiones adicionales en cuanto a la necesidad de obtener más datos que definan las variables clave, seleccionar otra herramienta más adecuada a los procesos observados e incluso rechazar totalmente el uso de un modelo matemático.

Estas revisiones y tomas de decisión responden a criterios subjetivos basados en la experiencia profesional, y deben consensuarse entre los técnicos implicados en el desarrollo del proyecto, y aquellos encargados de su supervisión y aprobación.

Todos estos chequeos se han de llevar a cabo durante la parte de desarrollo y calibración del modelo, pero incluso son necesarios en la etapa posterior de validación del modelo, esto es, cuando se verifica su utilidad como herramienta predictiva.

#### **4.1.6 Validación del modelo**

La fase de validación del modelo matemático consiste en una actualización de la información una vez concluido el modelo y la comparación de los nuevos datos observados con las predicciones del modelo.

Es posible que en esta fase se pueda llegar a desechar un modelo ya que no sea posible ajustar las observaciones disponibles. Las principales razones para esto pueden derivar de errores en el modelo conceptual y/o de fallos en la predicción de las tensiones a las que se verá sometido el sistema natural, como por ejemplo variaciones drásticas en los sistemas de explotación.

En la figura 6 se representa un esquema resumen del proceso general de modelización.

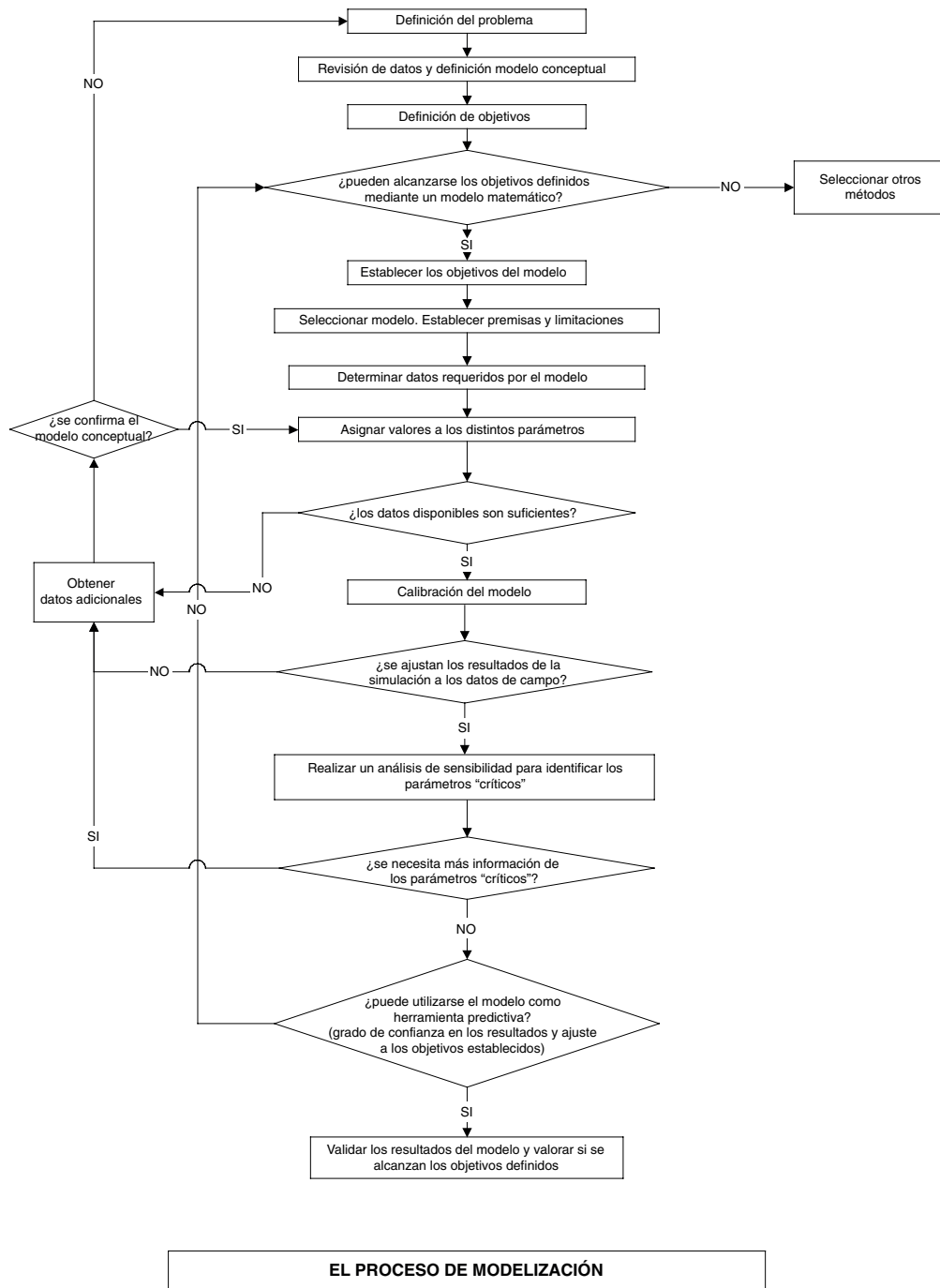


Figura 6. Resumen del proceso de modelización.

## 4.2 PRÁCTICA DE LA EJECUCIÓN DE MODELOS

La ejecución de todos los trabajos definidos con anterioridad depende del modelo concreto que se vaya a utilizar. Además las técnicas informáticas asociadas progresan a gran velocidad y es posible contar con herramientas matemáticas sofisticadas pero de fácil manejo que simplifican mucho el proceso de modelización. El coste de adquisición de los modelos está asociado a la disponibilidad de ese tipo de ayudas, ya que buena parte de los códigos de modelización de flujo son de libre acceso (por ejemplo a través de EPA CSMoS *Center for Subsurface Modeling Support*).

A grandes rasgos se pueden distinguir 2 tipos de programas, que la mayor parte de las veces permanecen “invisibles” al usuario ya que se presentan bajo una única denominación (p.e. *VisualMODFLOW*), integrándose todas las utilidades en un formato de trabajo conjunto:

1. **Preprocesadores:** Este conjunto de programas ayuda en la parte de introducción de variables de entrada al modelo, que suele constituir el paso más tedioso y sujeto a errores de la modelización. Actualmente es frecuente que todos los modelos incluyan ayudas para la generación de malla, incorporando conexión con programas de diseño gráfico (AUTOCAD, SURFER).

Los datos de entrada se agrupan dentro de diferentes grupos de propiedades, por ejemplo de flujo y transporte, las cuales a su vez se subdividen en los diferentes elementos de control (condiciones de borde, parámetros hidráulicos, pozos de explotación, puntos de observación, controles del proceso matemático, etc.). Algunas de las variables vienen definidas por defecto con los valores más usuales o llevan un controlador de rangos posibles de forma que se minimiza el riesgo de introducir un valor inadecuado.

Existe además otra serie de ayudas al usuario para calibrar el modelo de forma automática mediante programas de estimación automática de parámetros o de crear varias opciones de modelización que se ejecuten de forma automática como ayuda en el proceso de calibración.

2. **Postprocesadores:** Una vez ejecutado el programa de modelización de flujo y transporte, los paquetes informáticos comerciales suelen incluir una serie de utilidades enfocadas a la visualización y gestión de los resultados obtenidos por el modelo.

Estos programas pueden incluir utilidades propias de cálculo (p.e. balances) o visualización (p.e. evoluciones temporales), y/o facilitar formatos gestionables por otros programas (AUTOCAD; SURFER, etc).

## 4.3 PROBLEMAS MÁS FRECUENTES EN LA EJECUCIÓN DE UN MODELO

Los problemas más importantes y frecuentes en la aplicación de modelos informáticos derivan de la fiabilidad y solidez de los datos manejados.

La calidad de los datos con los que se construye el modelo conceptual define la verosimilitud final de la representación del sistema. Es importante, por tanto, reducir lo más posible las indeterminaciones a la hora de establecer las condiciones iniciales (p.e. la propia geometría del acuífero) y de contorno (p.e. límites de potencial o nivel constante).

Así también, la fiabilidad de los datos de calibración será de gran importancia para realizar los ajustes del proceso inicial de modelización. Aunque en un principio resulte más difícil ajustar un sistema del que se conoce su comportamiento hidrogeológico frente a numerosas perturbaciones, se obtendrá un modelo más coherente y con más poder predictivo, que de un sistema del que se posea una descripción más pobre, en la que sea preciso realizar gran cantidad de estimaciones.

La imposibilidad de reducir las incertidumbres en diversos parámetros clave puede hacer necesario acudir a la utilización de modelos probabilísticos, capaces de trabajar con distribuciones estadísticas de las variables de entrada.

El modelizador debe ser consciente de la importancia de los numerosos detalles que requiere el desarrollo de un modelo matemático, de los cambios de escala, de la coherencia de las unidades empleadas, del símbolo para los decimales (punto o coma), etc.

En general, los modelos informáticos de mayor utilización en el mercado actual se encuentran muy validados, por lo que los algoritmos matemáticos y los métodos de resolución de ecuaciones no suelen dar problemas de convergencia para la mayoría de los sistemas simulados.

#### **4.4 INFORMES**

La elaboración de un buen informe que documente todos los trabajos realizados y resultados obtenidos es fundamental para una correcta comprensión del modelo, e incluso para que sea factible la verificación y/o continuación del mismo por otro investigador.

Durante todo el proceso de modelización es recomendable que se guarde un registro exhaustivo a modo de diario (tipo “cuaderno de trabajo”) que ayude al modelista a recordar los sucesivos pasos que se han llevado a cabo, y a documentarlos finalmente en un informe de síntesis.

No existe ningún formato de control de cambios más adecuado que otros, ya que básicamente lo que se pretende es facilitar el trabajo al modelista. Dado que se suele trabajar en series con el fin de conseguir un determinado ajuste, podría resultar útil sintetizar la información en forma de tablas que incluyeran en sus respectivas columnas la información relativa a:

- Propósito de la serie: por ejemplo ajustar valores de trasmisividad, verificar la sensibilidad ante la anisotropía, etc.
- Modificación efectuada: cambios en los valores de una determinada área del modelo, ajuste de los gráficos de salida a escalas de tiempo/espacio adecuadas,...

- Descripción de las condiciones generales del modelo: series de datos de entrada (periodos de recarga/explotación utilizados), condiciones de régimen permanente/transitorio, etc.
- Resultados de la simulación: descripción de las variables de entrada más ajustadas y de los resultados obtenidos.

Respecto al informe, éste será similar en estructura a un informe técnico convencional incluyendo apartados como Introducción, Objetivos, Resumen y Conclusiones.

En cuanto a capítulos típicos de un informe de modelización, deben documentarse ciertos aspectos clave como:

- Definición del modelo conceptual.
- Ecuaciones de gobierno.
- Condiciones iniciales y de borde.
- Parámetros hidráulicos.
- Mallado.
- Resultados de la calibración y análisis de sensibilidad.
- Resultado de simulaciones predictivas.
- Limitaciones del modelo: grado de incertidumbre, fiabilidad de los datos.

Dentro de los anejos deberá incluirse información relativa a:

- Tablas resumen sobre datos geológicos, hidrogeológicos e hidroquímicos: columnas de sondeos, medidas piezométricas y análisis disponibles, datos de caudales de explotación, series de precipitaciones,...
- Registro del proceso de modelización.



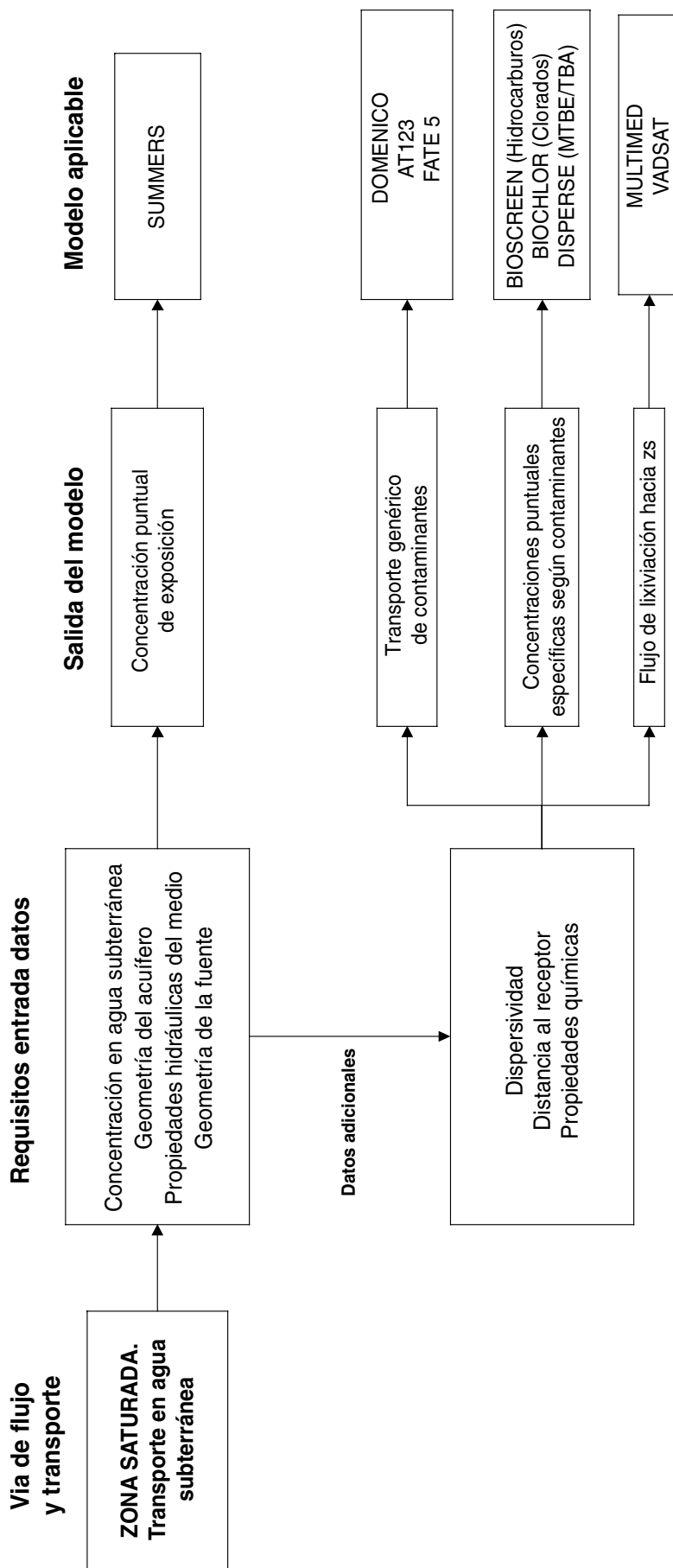
## **ANEXO I: FICHAS DE DESCRIPCIÓN DE PROGRAMAS**

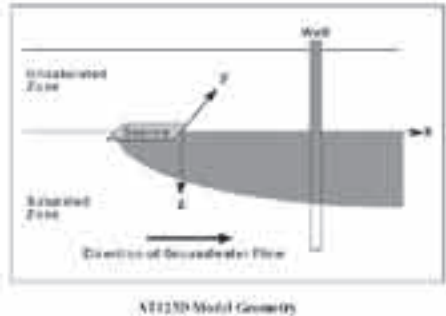
## **Índice**

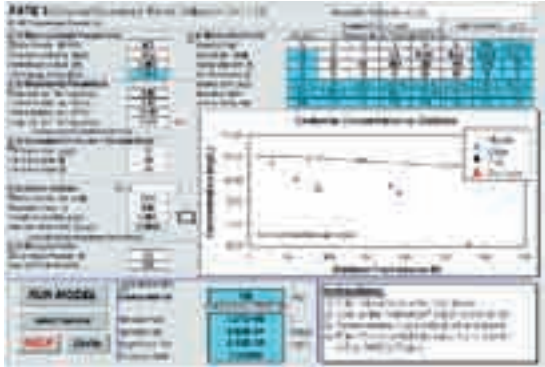
MODELOS ANALÍTICOS. ZONA SATURADA .....	47
MODELOS ANALÍTICOS. ZONA NO SATURADA .....	55
MODELOS NUMÉRICOS.....	59
HERRAMIENTAS AUXILIARES.....	69

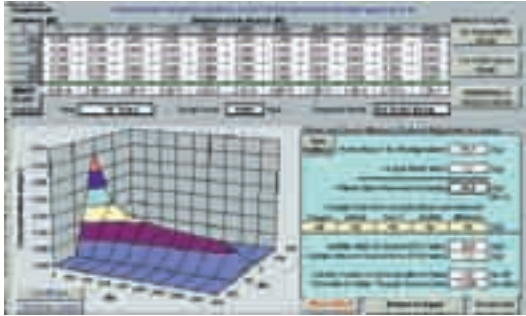


DIAGRAMA DEL PROCESO DE SELECCIÓN DE UN MODELO ANALÍTICO




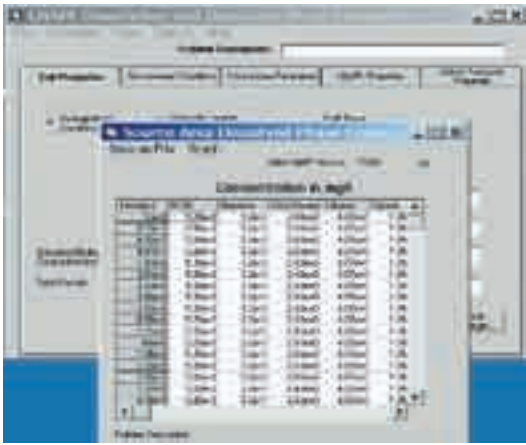
<b>AT123D</b>	
<b>Analytical Transient 1-,2-,3-Dimensional simulation of waste transport in the aquifer system</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	 <p style="text-align: center;">AT123D Model Geometry</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Modelo analítico, para 1, 2 ó 3 dimensiones, de transporte de contaminantes en aguas subterráneas.</li> <li>Puede considerar advección, dispersión, adsorción lineal y degradación de primer orden.</li> <li>Trabaja en base mensual.</li> <li>Muy utilizado en aplicaciones de análisis cuantitativo de riesgos.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Parámetros de simulación: periodo de simulación, intervalos de cálculo, posiciones de control.</li> <li>Configuración de la fuente: instantánea/continua, tipo (radiactiva, química, calor), puntual/lineal, areal, finita/infinita.</li> <li>Propiedades del suelo: densidad, porosidad, conductividad hidráulica, gradiente, dispersividad.</li> <li>Prop. contaminante: coeficientes adsorción y difusión, intercambio calor, relación de degradación primer orden.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Puede tener asociada una base de datos para las propiedades del suelo.</li> <li>En combinación con SESOIL, utiliza las cargas de contaminantes calculadas por este como entradas al sistema.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Estimación de la concentración de contaminantes disueltos a lo largo del tiempo a partir de fuentes definidas o resultado de la simulación de transporte en zona no saturada.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Asume acuífero homogéneo e isótropo y flujo prácticamente horizontal.</li> <li>Las concentraciones en 1 punto de observación (p.ej. pozo) no tienen en cuenta la dilución con aportes de la zona aguas abajo, que reducirían la concentración observada</li> <li>Considera condiciones de equilibrio entre la fase líquida y sólida.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Predicción de concentraciones de contaminantes disueltos en la posición y tiempo especificados por el usuario.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Como programa independiente (última versión 6.2, 2003). Tiene asociadas aplicaciones para la introducción y post procesado de datos.</li> <li>Asociado a SEVIEW (con SESOIL y BIOSCREEN), y utilidades de análisis cuantitativo de riesgos (API DSS, RISKPRO)</li> </ul>	

<b>FATE 5</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se trata de un modelo desarrollado por Groundwater Services Inc. y Shell Development Company a partir del modelo analítico de Domenico para transporte de contaminantes.</li> <li>• Programado en Microsoft® Excel, FATE 5 permite calibrar el modelo de Domenico ajustando las tasas de degradación a las concentraciones observadas en el emplazamiento, lo que a su vez permite establecer de forma realista el efecto de la atenuación natural en la carga contaminante. Considera advección, dispersión, absorción y degradación química.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Porosidad eficaz.</li> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Gradiente hidráulico.</li> <li>• Dispersividad.</li> </ul> <p><b>Características del foco:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Concentración.</li> <li>• Dimensiones.</li> </ul>	<p><b>Datos físico químicos:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Solubilidad.</li> <li>• Factor de retardo.</li> <li>• Tasas de degradación.</li> </ul> <p><b>Datos de los puntos de control:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Distancia.</li> <li>• Concentración.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Puede establecerse el alcance máximo de una pluma de contaminación en ausencia de medidas de control y/o saneamiento. No obstante, el uso principal del FATE 5 es obtener valores de degradación de la carga contaminante específicos del emplazamiento, datos que posteriormente permitirán efectuar un análisis de riesgos más ajustado a la realidad del emplazamiento considerado.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Condiciones de flujo sencillas y medidas homogéneas.</li> <li>• Únicamente simula régimen estacionario.</li> <li>• No es aplicable si hay flujos verticales.</li> <li>• Sólo contempla degradación de 1<sup>er</sup> orden.</li> <li>• Sus resultados son aproximativos, por lo que no es un programa apropiado cuando se necesitan resultados precisos para la toma de decisiones.</li> <li>• No considera difusión (inapropiado para flujos muy lentos).</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>FATE 5 ofrece sus resultados a través de un gráfico y una pequeña tabla. Los parámetros que pueden obtenerse son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Tasa de degradación ajustada a las concentraciones específicas del emplazamiento.</li> <li>• Máximo alcance de la pluma de contaminación.</li> <li>• Concentración en el área fuente para no superar las concentraciones especificadas por el usuario en un punto de exposición determinado.</li> <li>• Grado de atenuación entre el área fuente y el punto de exposición considerado.</li> <li>• Tiempo en alcanzarse las máximas concentraciones a diferentes distancias.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Groundwater Services, Inc., Houston, Texas, USA www.gsi-net.com</p>	

<b>BIOSCREEN</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo analítico desarrollado por AFCEE en colaboración con Ground Water Services, Inc.</li> <li>• Simula la atenuación natural de los hidrocarburos procedentes de combustibles derivados del petróleo disueltos en las aguas subterráneas.</li> <li>• Se trata de una hoja de cálculo programada en Microsoft® Excel basada en el modelo analítico de Domenico para simular el transporte en tres dimensiones de contaminantes en disolución.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Gradiente hidráulico.</li> <li>• Porosidad.</li> <li>• Dispersividad.</li> <li>• Densidad.</li> </ul> <p><b>Compuesto:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Coeficiente de reparto.</li> <li>• Fracción de carbono orgánico.</li> </ul>	<p><b>Degradación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Constante de degradación de 1er orden.</li> <li>• Concentración de aceptores de electrones.</li> </ul> <p><b>Datos área fuente:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dimensiones.</li> <li>• Concentraciones.</li> <li>• Distancia aguas abajo receptores.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilizado para simular la atenuación natural de los hidrocarburos disueltos en las aguas subterráneas.</li> <li>• Contempla los fenómenos de advección, dispersión y degradación, tanto en condiciones aeróbicas como anaeróbicas.</li> <li>• Su utilización puede orientarse para determinar si la atenuación natural es una alternativa viable en un emplazamiento o como un modelo de simulación en emplazamientos pequeños en los que no se considera necesario aplicar modelos más sofisticados.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Presenta las limitaciones propias de los modelos analíticos, es decir, hay que simplificar las condiciones de flujo del medio y sus resultados deben considerarse aproximaciones, especialmente si se trata de emplazamientos complejos, en cuyo caso los resultados deben considerarse como una primera estimación.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Extensión del penacho de contaminación.</li> <li>• Tiempo de permanencia de la contaminación considerando: transporte sin degradación, transporte con procesos de degradación de primer orden o transporte con degradación por reacción instantánea.</li> <li>• Tiempo de llegada de la contaminación a una distancia determinada.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Libre disposición en:  <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html</a>                  WINDOWS 95/98/NT. Excel®</p>	

<b>BIOCHLOR</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Desarrollado para AFCEE por Groundwater Services Inc.</li> <li>• Es un modelo exploratorio que simula la atenuación natural de disolventes organoclorados.</li> <li>• Está programado como hoja Excel, y basado en la aproximación analítica de Domenico.</li> <li>• Puede simular advección 1-D, dispersión 3-D, adsorción lineal y biotransformación vía dechloración reductiva.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Datos Hidrogeológicos (velocidad real, permeabilidad, gradiente, porosidad).</li> <li>• Dispersividad longitudinal, transversal y vertical..</li> <li>• Adsorción (densidad, coef. carbono-agua, fracción carbono orgánico).</li> <li>• Biotransformación (coef. 1<sup>er</sup> orden, coef. abióticos, vida media, relaciones molares).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Datos generales (anchura y longitud zona estudio, t de simulación).</li> <li>• Área fuente (longitud, anchura, potencia y concentración).</li> <li>• Datos campo (concentraciones y distancia a foco).</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Define la extensión máxima de una pluma de compuestos clorados si no se aplican medidas de control.</li> <li>• Define la dispersión longitudinal y transversal de la pluma.</li> <li>• Explora la posibilidad de implantar una remediación por atenuación natural.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Condiciones simplificadas de flujo de agua subterránea (no puede simular bombeos, flujos verticales, etc.).</li> <li>• Condiciones geológicas e hidrogeológicas uniformes para todo el dominio del modelo.</li> <li>• Sólo procesos de dechloración reductiva y con cinética de primer orden.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>Opción a) resultados en el eje central de la pluma:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Perfiles de concentraciones teóricas y de campo para distintos constituyentes.</li> <li>• Comparación entre curvas de no degradación y degradación a diferentes tiempos.</li> </ul> <p>Opción b) resultados considerando dispersión de la pluma:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Gráficos en tres dimensiones comparando resultados entre no degradación y degradación aeróbica.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Versión 2.2 (marzo 2002) libre y gratuita en la red para Excel 97 o Excel 2000:  <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models/biochlor.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models/biochlor.html</a></p>	

<b>DISPERSE</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Modelo analítico en 2D desarrollado por el Departamento de Protección medioambiental del Estado de Nueva Jersey - Bureau of Underground Storage Tanks (BUST).</li> <li>Su utilización se restringe a la predicción del comportamiento del MTBE y TBA en el medio saturado, por sus especiales peculiaridades: alta afinidad por el agua y dificultad de biodegradación.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Velocidad de la descarga/fuga.</li> <li>Periodo de descarga/fuga.</li> <li>Masa fugada.</li> <li>Dispersividad longitudinal.</li> <li>Dispersividad transversal.</li> <li>Distancia en perpendicular hasta el punto de exposición.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Concentración inicial.</li> <li>Distancia en paralelo hasta el punto de exposición.</li> <li>Velocidad del agua subterránea.</li> <li>Tiempo de simulación.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>El programa utiliza una aproximación analítica de la ecuación de dispersión clásica para flujo bidimensional en un acuífero horizontal.</li> <li>Es un programa muy fácil de utilizar y permite predecir el comportamiento en el tiempo de una pluma de MTBE o TBA originada por un derrame puntual.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>No puede representar una fuente “infinita” (p.e. una fuga constante en el tiempo).</li> <li>Sólo puede aplicarse para acuíferos horizontales y homogéneos y velocidades de flujo constantes.</li> <li>Se consideran factores de dispersión constantes y proporcionales a la velocidad de flujo.</li> <li>Se considera que el contaminante no se degrada ni se adsorbe.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Se obtienen estimaciones sobre el tamaño y duración de una pluma de MTBE y/o TBA a partir de las soluciones de la función clásica de advección/dispersión.</li> <li>Los resultados sobre la evolución de la contaminación son muy conservadores, ya que se considera que la dispersión es el único factor de atenuación.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>El programa disperse.exe está disponible como fichero autoextraíble en:  <a href="http://www.state.nj.us/dep/srp/regs/guidance.htm#disperse">http://www.state.nj.us/dep/srp/regs/guidance.htm#disperse</a></p>	

<b>LNAST v 1.5</b> <b>LNAPL dissolution and transport Screening Tool</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Publicado por API en 2000, se trata de un modelo analítico de tipo exploratorio diseñado para simular la evolución de hidrocarburos en fase libre sobre el nivel freático y de las concentraciones disueltas en el agua subterránea a lo largo del tiempo.</li> <li>Permite considerar el efecto producido por la extracción de fase libre (bombeo y extracción de vapores), volatilización y degradación.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Geometría del área fuente (lenticula fase libre): espesor, dimensiones, profundidad.</li> <li>Condiciones de flujo: gradiente hidráulico, extracciones.</li> <li>Parámetros de capilaridad de Van Genuchten (<math>\alpha</math> y <math>\eta</math>).</li> <li>Tipo de suelo (granulometría, compactación, etc).</li> <li>Conductividad hidráulica.</li> <li>Porosidad total y efectiva.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Saturación residual en agua e hidrocarburo.</li> <li>Características fase libre: composición, densidad, viscosidad, tensiones superficiales.</li> <li>Características compuestos específicos: fracción molar en fase libre, coef. distribución carbono-agua, tasas de degradación.</li> <li>Dispersividad, fracción de carbono orgánico, difusividad.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<p>LNAST v 1.5 esta diseñado para predecir:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>La evolución de la fase libre: pérdida de compuestos volátiles y solubles.</li> <li>El impacto de la fase libre sobre las aguas subterráneas.</li> <li>La migración aguas abajo de la fase disuelta (considera biodegradación y dispersión).</li> <li>La evaluación del rendimiento de distintos métodos para extraer el hidrocarburo.</li> </ul>	<p>Propias de un modelo de tanteo, lo que afecta principalmente al ajuste de sus resultados, que han de considerarse como aproximaciones dadas las simplificaciones que se asumen.</p> <p>Otras limitaciones destacables son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>No considera histéresis en los procesos de saneamiento.</li> <li>Supone rendimientos óptimos en los sistemas de extracción de la fase libre.</li> <li>Asume que la fase libre se encuentra en equilibrio y no se desplaza fuera de la zona definida como área fuente.</li> <li>Únicamente contempla biodegradación de 1<sup>er</sup> orden</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>LNAST presenta sus resultados en forma de tablas y gráficos que relacionan:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Concentración de compuestos específicos (p.e. BTEX) en la fase libre a lo largo del tiempo.</li> <li>Máximo alcance de la fase disuelta para una concentración específica.</li> <li>Concentración de un determinado compuesto en función de la distancia al área fuente.</li> <li>Evolución de la saturación de hidrocarburo en el suelo.</li> <li>Rendimiento de sistemas de extracción; contempla: zanjas, pozos con skimmers, bombeo de dos fases (agua-hidrocarburo) y la combinación de éstos con extracción forzada de vapores (SVE).</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Puede bajarse de forma gratuita de la página de API en internet: <a href="http://www.api.org/lnapl">http://www.api.org/lnapl</a></p>	


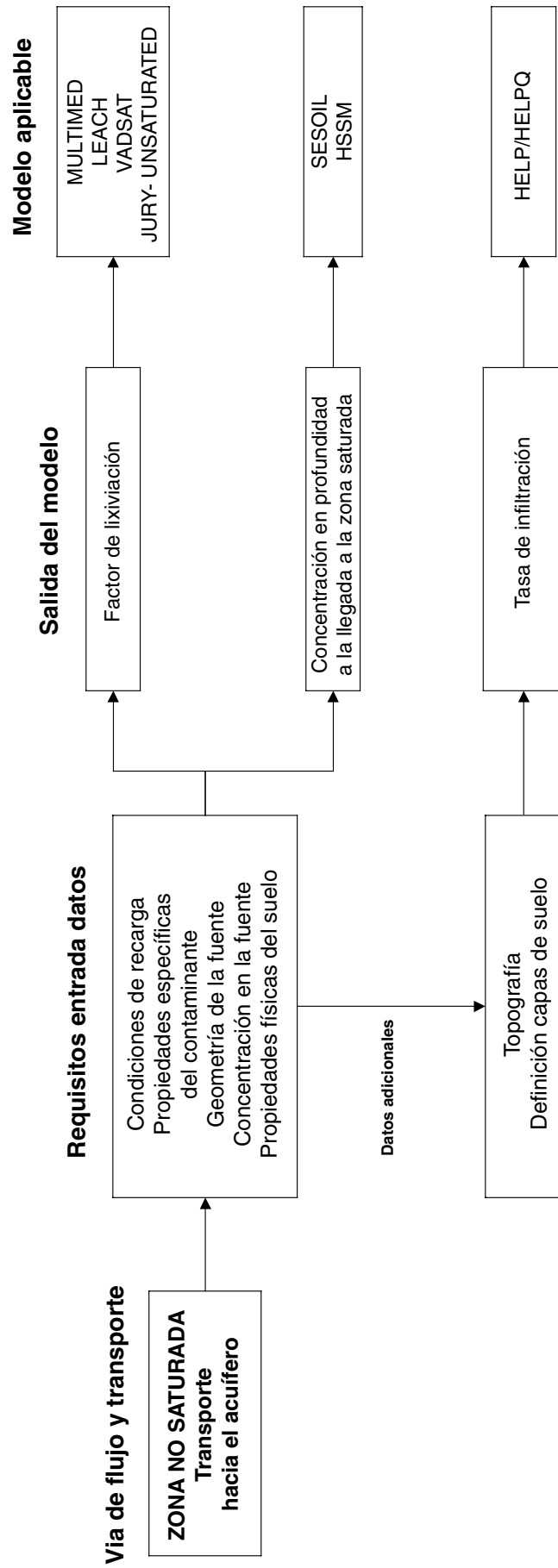
<b>VADSAT</b> <b>VADose zone/SATurated zone model</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Programa desarrollado para el American Petroleum Institute (API), por lo que tiene una aplicación específica para hidrocarburos (inicialmente simulaba especies inorgánicas o reactivas asociadas a vertederos).</li> <li>Simula adsorción, degradación, volatilización y lixiviado en zona no saturada, y dispersión, degradación y adsorción en zona saturada. El modelo en zona saturada funciona como el AT123D.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Control del modelo: activar opciones de volatilización/ degradación, cálculo de dispersividad, posición puntos de observación.</li> <li>Datos de la fuente: geometría, posición, fracción de carbono orgánico (Foc).</li> <li>Datos de la zona no saturada: espesor, porosidad, humedad residual, conductividad saturada, recarga, parámetros de Van Genutchen.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Parámetros del acuífero: porosidad eficaz, gradiente, conductividad hidráulica, geometría, fracción de carbono orgánico (Foc).</li> <li>Datos de los contaminantes: concentración (dispone de parámetros por defecto de las características fisico-químicas de los principales compuestos).</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Movimiento de los contaminantes desde un foco localizado en zona no saturada o saturada. Estima las emisiones de volátiles, el lixiviado hacia las aguas subterráneas y el transporte en el acuífero.</li> <li>La fuente se agota debido a las pérdidas por lixiviado y volatilización.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Tanto la zona no saturada como el acuífero, los considera de características y condiciones homogéneas y constantes, por lo que las simulaciones son tanto más válidas cuanto mayor es el periodo considerado.</li> <li>Concentraciones en equilibrio.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>En zona no saturada da la concentración de contaminantes que se transfiere al agua subterránea y las pérdidas por volatilización.</li> <li>En zona saturada permite señalar concentraciones en puntos definidos (receptores) y tiempos de llegada así como de desaparición de la fuente.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Programa comercial que se puede adquirir como paquete independiente o módulo asociado a programas de análisis cuantitativo de riesgos (API DSS, RISC).</p>	



DIAGRAMA DEL PROCESO DE SELECCIÓN DE UN MODELO ANALÍTICO



<b>SESOIL* SEasonal SOIL</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Programa exploratorio, de transporte unidimensional para zona no saturada desarrollado para US EPA.</li> <li>Muy utilizado en los análisis de exposición (análisis cuantitativo de riesgos).</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Datos climáticos mensuales, para el cálculo de la evapotranspiración, infiltración, etc.</li> <li>Datos medios del suelo: permeabilidad intrínseca, densidad, ...).</li> <li>Datos químicos: solubilidad, coeficientes de difusión, adsorción, ratios de hidrólisis, degradación, etc.</li> <li>Aplicaciones: geometría y disposición de las capas, características diferenciales de cada una de ellas. Especificaciones dependientes de las capas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cargas de contaminación (tipo, ratios, índice de volatilización, etc.).</li> <li>Opción de lavado superficial: granulometría, pendiente, factor de erosionabilidad.</li> <li>Se le pueden asociar una base de datos climática y una de características de distintos tipos de suelo.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Simula los procesos de difusión, adsorción, volatilización, biodegradación, intercambio catiónico, acomplejamiento e hidrólisis en zona no saturada.</li> <li>Puede utilizarse para el establecimiento de niveles objetivo de limpieza.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Sólo puede considerar un compuesto cada vez.</li> <li>Considera que toda la vertical del suelo es homogénea.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Concentraciones a diversos tiempos y profundidades para la fase acuosa, sólida y vapor en el suelo.</li> <li>Tasas de migración hacia el acuífero.</li> <li>Volatilización desde superficie.</li> <li>Transporte por escorrentía superficial y fenómenos de erosión.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Incluido en SEVIEW junto a AT123D, y BIOSCREEN, en IGEMS (con ISCLT, ISCST y AT123D), en programas de análisis cuantitativo de riesgos (API DSS, RISKPRO), en UnSat Suite (con HELP) .</p> <p>También está disponible en forma independiente (última versión 2.1), a la que se pueden asociar bases climatológicas y de características de suelos (SOILS-5).</p>	

\* Con formato: Español (España . alfab. internacional)

<b>HSSM*, Hydrocarbon Spill Screening Model</b>	
<p><b>DESCRIPCIÓN</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Modelo analítico desarrollado por la Agencia Medioambiental en USA (USEPA) en colaboración con la Universidad de Texas.</li> <li>Permite simular el impacto de un vertido superficial de hidrocarburos en la zona no saturada y saturada.</li> <li>Esta compuesto por 3 módulos: KOPT, para la zona no saturada, OILLENS, para la interfase hidrocarburo / agua subterránea, y TSGPLUME, para simular la evolución del penacho generado por la disolución de los contaminantes.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Vertido:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Tipo de combustible.</li> <li>Volumen / tiempo.</li> <li>Superficie de infiltración.</li> <li>Viscosidad.</li> <li>Densidad.</li> </ul> <p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Profundidad del nivel freático.</li> <li>Infiltración.</li> <li>Tensión superficial.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Conductividad hidráulica.</li> <li>Porosidad.</li> <li>Densidad.</li> <li>Dispersividad.</li> <li>Saturación residual en hidrocarburo.</li> <li>Saturación residual en agua.</li> </ul> <p><b>Simulación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Localización de los receptores.</li> <li>Período de simulación.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Simulación de impactos generados por vertidos de combustibles ligeros (de menor densidad que el agua).</li> <li>Determina la evolución del vertido en la zona no saturada y la formación y evolución en su caso de una lentícula de fase no acuosa sobre el nivel freático.</li> <li>Permite valorar también la generación de penachos de contaminación en las aguas subterráneas debido a la fase disuelta.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>No considera procesos de biodegradación, lo cual tiene un especial efecto en los resultados obtenidos en la simulación de la evolución del penacho en las aguas.</li> <li>Sus resultados deben valorarse únicamente como orientativos y tomarse como órdenes de magnitud.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Establece el tiempo de llegada del hidrocarburo al nivel freático y las máximas dimensiones que alcanzará la lentícula.</li> <li>Puede también valorarse la generación y evolución de un penacho contaminante en las aguas, y simular la llegada a receptores sensibles situados aguas abajo del foco de contaminación.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Libre disposición en:  <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html</a>                      Versiones disponibles para WINDOWS y MsDOS.</p>	

\* Con formato: Español (España . alfab. internacional)

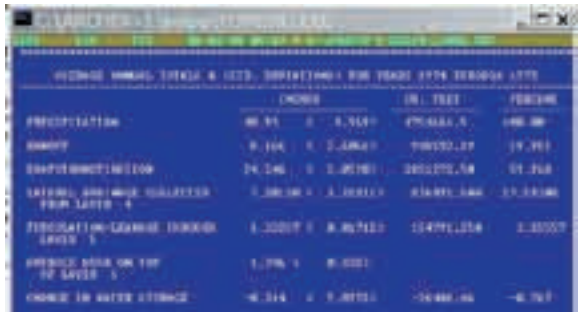
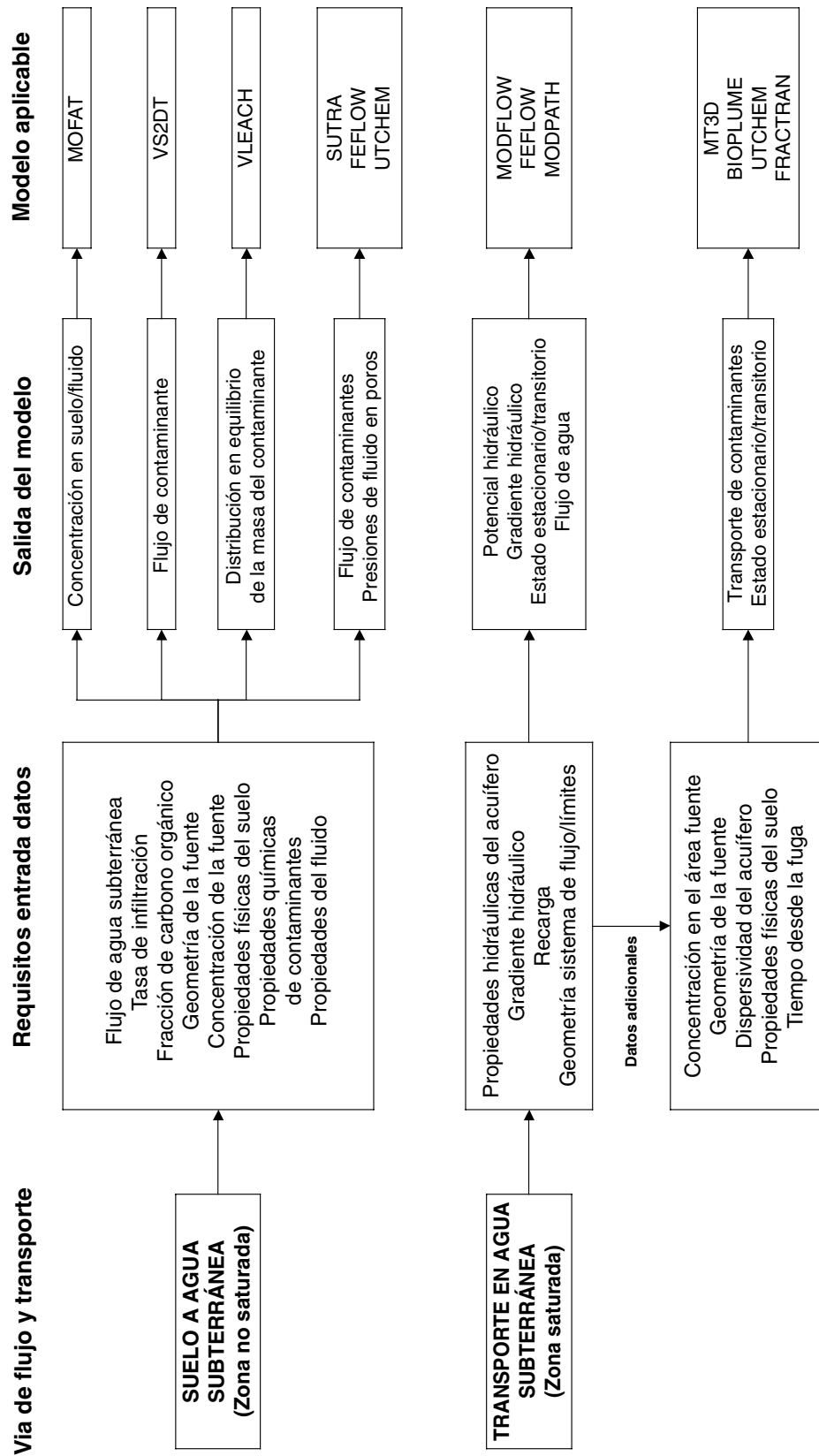
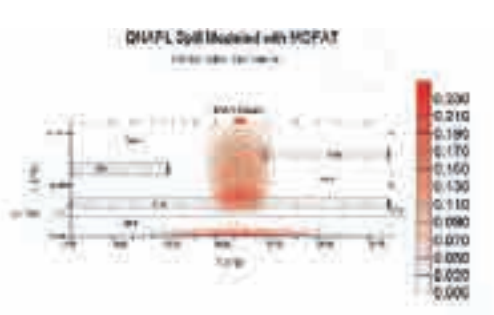
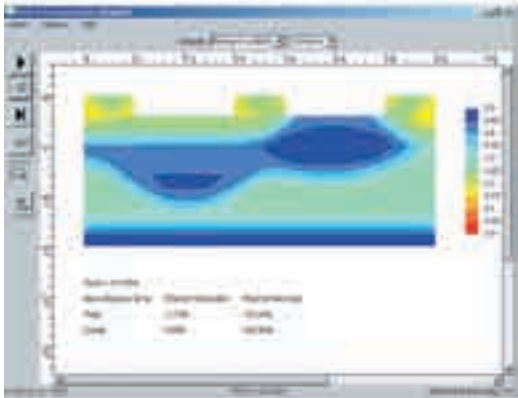

<b>HELP v.3/HELPQ</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• HELP (Hydrogeological Evaluation of Landfill Performance) es un modelo desarrollado por US Army Engineer Waterways Experiment Station para el diseño de vertederos.</li> <li>• Se trata de un modelo quasi-bidimensional basado en el cálculo de los balances de la masa de agua en los vertederos.</li> <li>• HELPQ (Hydrologic Evaluation of Leachate Production and Quality) es una programa que calcula la generación de lixiviados como consecuencia de la percolación del agua a través de materiales contaminados, a partir de los datos suministrados por HELP.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Evapotranspiración.</li> <li>• Régimen de precipitaciones.</li> <li>• Temperatura/radiación solar.</li> <li>• Superficie del vertedero (o zona contaminada).</li> <li>• Superficie que genera escorrentía.</li> <li>• Especificaciones de las geomembranas y drenajes previstos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Características de las capas consideradas: porosidad, saturación residual, punto de marchitez, conductividad hidráulica .</li> <li>• Sorción.</li> <li>• Concentraciones iniciales de contaminantes.</li> <li>• Densidad aparente, contenido en agua.</li> <li>• Coeficientes de dispersión y reparto.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Es un modelo de uso ampliamente extendido y contrastado en el diseño de vertederos de residuos urbanos y peligrosos. Permite evaluar las alternativas de sellados, redes de drenaje, efectuar estimaciones de lixiviados, escorrentías, etc.</li> <li>• Puede utilizarse también para cuantificar la generación de lixiviados en emplazamientos contaminados por hidrocarburos y evaluar la eficacia de las posibles medidas preventivas o correctoras para evitar la afección de las aguas subterráneas.</li> </ul>	<p>Algunas de las limitaciones que presenta el modelo son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Considera intensidad homogénea de las lluvias, por lo que no puede contemplar episodios aislados de lluvia intensa (p.e. grandes tormentas)</li> <li>• No admite escorrentía procedente de áreas adyacentes al vertedero</li> <li>• No pueden representarse vías de flujo preferentes</li> <li>• En el HELPQ no se considera la pérdida de contaminantes por volatilización</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>Se obtienen en forma de tablas y gráficos los siguientes datos:</p> <p><b>HELP:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Escorrentía superficial</li> <li>• Tasas de infiltración.</li> <li>• Volumen de agua almacenada en los residuos.</li> <li>• Zona de evapotranspiración.</li> </ul> <p><b>HELPQ:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Contaminante que sale de la masa de residuos a través de los drenajes y del agua que percola</li> <li>• Contaminante que permanece en la masa de residuos</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Gratuito en la página web de Army Corp Engineers Waterways Experiment Station:  <a href="http://www.wes.army.mil/el/elmodels/">http://www.wes.army.mil/el/elmodels/</a></p> <p>También hay versiones comerciales (International Groundwater Modeling Services, Waterloo Hydrogeologic, etc).</p>	

DIAGRAMA DEL PROCESO DE SELECCIÓN DE UN MODELO NUMÉRICO

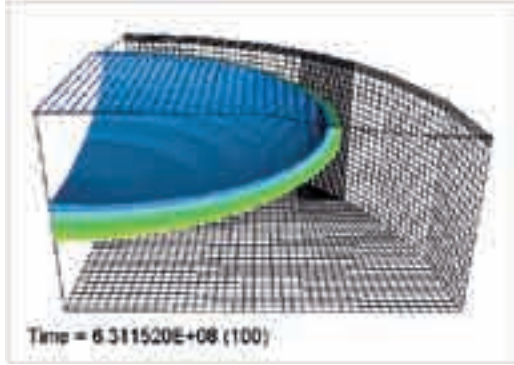


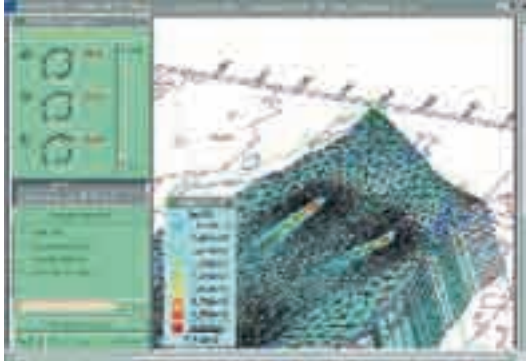
<b>MOFAT</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Programa bidimensional basado en el método de los elementos finitos que permite simular flujo multifase acoplado con transporte en secciones verticales o planos horizontales.</li> <li>• Permite simular el flujo de agua, gas y una fase no acuosa, y transporte de hasta cinco compuestos con coeficientes de reparto tanto en el agua, como en la fase no acuosa, en la fase gaseosa, y en la matriz del suelo.</li> <li>• Permite también estimar propiedades del medio.</li> <li>• Utiliza la ecuación de Van Genuchten para establecer la relación entre la conductividad hidráulica y la presión de succión.</li> <li>• Considera histéresis en la permeabilidad de la fase no acuosa por entrapamiento.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Geometría:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dimensiones y mallado del medio que se pretende modelizar.</li> </ul> <p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Porosidad eficaz/coef. almacenamiento.</li> <li>• Anisotropía de la conductividad hidráulica</li> <li>• Condiciones de contorno.</li> <li>• Condiciones iniciales de presión de agua o de hidrocarburo.</li> </ul>	<p><b>Contaminación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Distribución de las distintas fases.</li> <li>• Densidades.</li> <li>• Parámetros de cinética.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelos de flujo multifase en medios anisótropos y heterogéneos.</li> <li>• Evaluación de vertidos de hidrocarburos en el subsuelo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Trata problemas de geometría relativamente sencilla.</li> <li>• Trata episodios de vertido único.</li> <li>• Se trata de un modelo bidimensional.</li> <li>• Necesita de una interfase de pre y postproceso de datos para facilitar su manejo.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>MOFAT da como resultados ficheros numéricos que precisan de un programa de postproceso de datos para poder representarlos gráficamente. Las principales salidas gráficas que muestra son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Geometría del medio modelizado</li> <li>• Distribución espacial de las distintas fases en régimen estacionario/transitorio</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>El programa MOFAT sin el procesador de datos es de libre disposición en:  <a href="http://www.epa.gov/ada/csamos/models/mofat.html">http://www.epa.gov/ada/csamos/models/mofat.html</a>                  El programa acoplado con el pre-procesador y el post-procesador se puede adquirir en:  <a href="http://www.scisoftware.com/">www.scisoftware.com/</a> <a href="http://www.gwssoftware.com">www.gwssoftware.com</a>                  WINDOWS 95/98/2000/NT with 16 MB RAM.</p>	

<b>VS2DT</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• VS2DT (Variable saturated 2-D flow and transport model) es un modelo desarrollado por el USGS, en diferencias finitas para simular flujo y transporte en medios porosos de saturación variable. Resuelve la ecuación de Richards para flujo de fluidos y la ecuación de dispersión-advención para el transporte de solutos.</li> <li>• El modelo puede analizar problemas en una o dos dimensiones utilizando sistemas de coordenadas cartesianas o radiales.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Hidráulicas:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad hidráulica (modelos de van Genuchten, Brooks y Haverkamp).</li> <li>• Potencial hidráulico.</li> <li>• Contenido de humedad .</li> <li>• Dispersividad.</li> </ul> <p><b>Recarga:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Evaporación.</li> <li>• Tasa de infiltración.</li> <li>• Transpiración vegetal.</li> </ul>	<p><b>Contaminación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Concentración de contaminantes.</li> <li>• Parámetros de adsorción.</li> </ul> <p><b>Procesos de transporte:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Advección.</li> <li>• Dispersión hidrodinámica.</li> <li>• Degradación de primer orden.</li> <li>• Adsorción.</li> <li>• Cambio iónico.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Manejo muy sencillo y de gran versatilidad.</li> <li>• Flujo vertical no saturado, con posibilidad de suponer un perfil multicapa con anisotropías hidráulicas. Es muy utilizado en zonas húmedas.</li> <li>• Simulación de transporte de contaminantes considerando transformaciones en zona no saturada (dispersión, degradación de primer orden, adsorción, cambio iónico).</li> <li>• El programa gemelo VS2HT permite considerar flujo de calor.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Requiere gran cantidad de datos para la resolución numérica.</li> <li>• Limitada base de datos de propiedades del suelo.</li> <li>• Requiere caracterización precisa del medio ya que es muy sensible a las heterogeneidades.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Los resultados de la simulación pueden verse como perfiles de potencial hidráulico, contenido de humedad, saturación en agua, velocidad de flujo, así como concentración de contaminantes en disolución, para cada paso de tiempo. También se obtienen numerosos ficheros de datos en función de los resultados solicitados.</li> <li>• A partir de estos resultados para cada periodo de tiempo, se puede crear una animación visual simple del proceso global, obteniendo perfiles de evolución temporal y espacial, así como parámetros de balance de masas.</li> <li>• El postprocesador gráfico VS2 POST es muy potente.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>El programa está escrito en Fortran 77 y se puede obtener gratuitamente en la red desde la dirección: <a href="http://water.usgs.gov/software/vs2di.html">http://water.usgs.gov/software/vs2di.html</a>, donde se incluyen los módulos VS2DT, VS2HT (transporte de calor), así como un postprocesador para visualizar resultados.</p> <p>Existen en el mercado otras aplicaciones con pre y postprocesadores para facilitar el manejo del programa fuente.</p>	

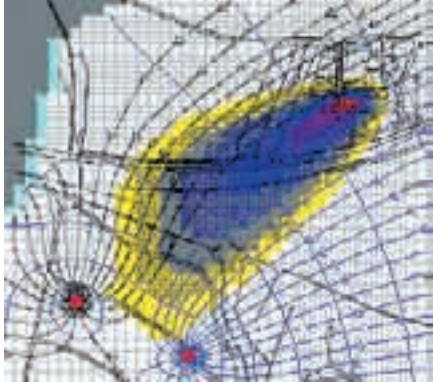
<b>VLEACH</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Desarrollado por la USEPA, VLEACH es un modelo unidimensional de diferencias finitas que permite simular la movilización y migración de contaminantes orgánicos en la zona no saturada.</li> <li>• Mediante una discretización del medio en polígonos (prismas) divididos a su vez en celdas horizontales, modeliza el transporte por advección y difusión en la fase vapor y líquida del contaminante.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<b>Hidrogeología:</b>	<b>Contaminantes:</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Densidad aparente.</li> <li>• Porosidad eficaz.</li> <li>• Humedad del suelo.</li> <li>• Carbono orgánico en suelo.</li> <li>• Tasa de recarga.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Coef. distribución carbono orgánico.</li> <li>• Constante de Henry.</li> <li>• Concentración del agua de recarga.</li> <li>• Concentración inicial de contaminante.</li> <li>• Solubilidad.</li> <li>• Coeficiente de difusión en aire.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se utiliza para evaluar el impacto sobre las aguas subterráneas de fuentes de contaminación industriales como son fugas de tanques enterrados o vertidos desde conducciones.</li> <li>• Se aplica también para evaluar la volatilización de compuestos orgánicos volátiles.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Considera constante la tasa de infiltración (puede suponer una sobreestimación importante del impacto sobre el agua).</li> <li>• No contempla dispersión de la fase líquida ni degradación de los contaminantes.</li> <li>• No permite considerar heterogeneidad dentro de cada polígono.</li> <li>• A pesar de ser un modelo conceptualmente sencillo, su manejo presenta cierta complejidad. No obstante, las simplificaciones que asume obligan a su utilización como modelo aproximativo.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>VLEACH aporta resultados en formato de archivos texto, aunque pueden obtenerse gráficos en combinación con otros programas. Las versiones comerciales suministran estos gráficos directamente.</p> <p>La información que aporta VLEACH es la siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Evolución de la masa de contaminante en la zona no saturada. Los cambios se expresan como advección y difusión a la atmósfera (fase vapor) o al agua subterránea (fase líquida).</li> <li>• Impacto sobre las aguas subterráneas. Puede obtenerse para cada polígono o para todo el área considerada. Viene expresado para un período de tiempo dado o como masa total acumulada.</li> <li>• Concentración de contaminante a una profundidad determinada en fase vapor, líquida o adsorbida al suelo.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Gratuito en la versión para MS-DOS de la US EPA en <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html</a></p> <p>Hay también versiones comerciales para Windows incorporadas en paquetes integrados de programas (WHI UnSat, Seview, etc.)</p>	

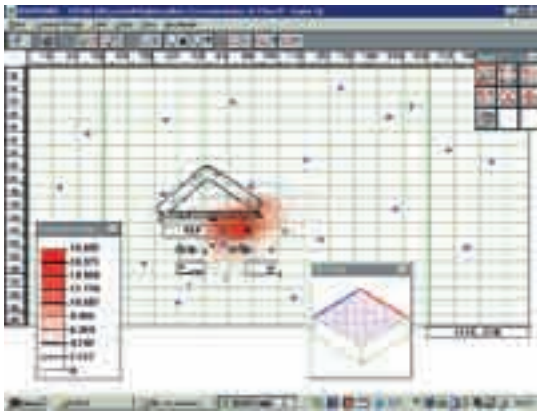


<b>SUTRA</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se trata de un programa de modelización de flujo y transporte convectivo o calor. Utiliza un algoritmo híbrido de elementos finitos bidimensionales cuadráticos y diferencias finitas.</li> <li>• Permite simular un flujo en función de la densidad en medio saturado, acoplarle si se precisa un flujo en medio no saturado, y bien un transporte de solutos, en el que se pueden considerar fenómenos de adsorción por la matriz del suelo, y una cinética de primer orden o de orden cero, o bien, transporte de calor tanto en el agua subterránea como en la matriz del suelo.</li> <li>• Es un modelo en dos dimensiones que permite simular tanto perfiles verticales como tramos horizontales.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Geometría:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Mallado que permita reflejar las heterogeneidades del medio.</li> </ul> <p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Porosidad eficaz/coef. almacenamiento.</li> <li>• Anisotropía de la conductividad hidráulica.</li> <li>• Condiciones de contorno.</li> <li>• Cargas hidráulicas iniciales.</li> <li>• Modelo de infiltración en la zona no saturada.</li> </ul>	<p><b>Contaminación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Concentraciones de contaminantes.</li> <li>• Parámetros de adsorción.</li> <li>• Parámetros de cinética.</li> </ul> <p><b>Calor:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad térmica.</li> <li>• Capacidad térmica.</li> <li>• Anisotropía.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelos de flujo en medios anisótropos y heterogéneos.</li> <li>• Intrusión marina.</li> <li>• Evaluación de recursos geotérmicos.</li> <li>• Transporte de contaminantes.</li> <li>• Definición de perímetros de protección.</li> <li>• Evaluación de impacto de bombeos y obras subterráneas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Es fundamental el trazado de un mallado adecuado ya que puede condicionar la solución final, incluso generar inestabilidades en la solución.</li> <li>• Se trata de un modelo bidimensional.</li> <li>• El modelo de transporte de solutos es relativamente simple y no considera fenómenos de difusión ni dispersión.</li> <li>• Necesita de una interfaz de pre y postproceso de datos para facilitar su manejo (ARGUS ONE).</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>SUTRA da como resultados ficheros numéricos que precisan de un programa de postproceso de datos para poder representarlos gráficamente. Las principales salidas gráficas que muestra son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Piezometría en régimen estacionario/transitorio</li> <li>• Planos de distribución de vectores de velocidad</li> <li>• Distribución de temperaturas en régimen estacionario/transitorio</li> <li>• Concentración de contaminantes/transitorio</li> <li>• Distribución espacial de parámetros hidrodinámicos</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>El programa SUTRA sin el procesador de datos es de libre disposición en:  <a href="http://water.usgs.gov/software/sutra.html">http://water.usgs.gov/software/sutra.html</a></p> <p>El programa acoplado con el procesador ARGUS ONE se puede adquirir en:  <a href="http://www.scientificsoftwaregroup.com/">www.scientificsoftwaregroup.com/</a>          WINDOWS 95/98/2000/NT</p>	

<b>FEFLOW</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo de simulación basado en el método de los elementos finitos desarrollado por WASY Institute (última versión v.5.1).</li> <li>• Se trata de un modelo diseñado para simular en 2D y 3D condiciones de flujo complejas, medios heterogéneos (i.e fracturados), zona saturada / no saturada, transporte de contaminantes y/o temperatura, flujo en función de densidades (i.e. intrusiones marinas).</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Topografía.</li> <li>• Piezometría.</li> <li>• Velocidad de Darcy.</li> <li>• Coeficiente de almacenamiento.</li> <li>• Porosidad.</li> <li>• Dispersividad.</li> <li>• Retardo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Recargas/Descargas.</li> <li>• Densidades (líquidos y sólidos).</li> <li>• Viscosidad.</li> <li>• Difusividad.</li> <li>• Termodispersión.</li> <li>• Concentraciones.</li> <li>• Tasas de degradación.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelización en 2 y 3 dimensiones de flujo y transporte de contaminantes y/o calor.</li> <li>• Evaluación de estrategias de control y remediación de emplazamientos contaminados.</li> <li>• Modelización de medios o condiciones de flujo complejas.</li> <li>• Evaluación de recursos geotérmicos, aguas termales.</li> <li>• Evolución intrusiones aguas salinas.</li> <li>• Diseño de perímetros de protección, localización de vertederos, estudios de impacto ambiental, comportamiento de presas, residuos nucleares.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se trata de un modelo de simulación complejo que requiere: <ul style="list-style-type: none"> <li>- conocimiento exhaustivo del medio a modelizar, disponibilidad de datos</li> <li>- recursos: personal cualificado / dedicación</li> <li>- equipos informáticos adecuados.</li> </ul> </li> <li>• Es un programa comercial de coste elevado (varía en función de los módulos que incorpore FEFLOW).</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>Genera resultados en forma de base de datos que pueden exportarse y compartirse con GIS.  Las salidas gráficas permiten obtener:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Visualización en 3D de parámetros asignados al modelo.</li> <li>• Mapas de isocóncas, secciones.</li> <li>• Diagramas de evolución.</li> <li>• Trazados vectoriales de flujo.</li> <li>• Rastreo de partículas (trayectorias).</li> <li>• Resultados en 3D.</li> </ul> <p>Los gráficos en 3D pueden rotarse para variar los puntos de vista y se pueden seleccionar zonas de interés para su visualización.</p> <p>Dispone también de salidas gráficas para los balances de masa y flujo de calor.</p>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Distribuido por: <i>Waterloo Hydrogeologic Inc., Bossintl, RockWare, Ecoséal, WASY Institute.</i>  Puede funcionar bajo Windows (95,98,NT), UNIX, Digital UNIX, IRIX, AIX, HP-UX y SOLARIS.</p>	

<b>MODFLOW</b> <b>MODular three-dimensional groundwater FLOW model</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo 2D/3D de diferencias finitas para simulación del flujo de agua subterránea, tanto en régimen permanente como transitorio.</li> <li>• Desarrollado por el USGS, es el modelo matemático de flujo más ampliamente extendido debido a su versatilidad, rigor y disponibilidad.</li> <li>• Permite incluir varias capas de diferentes características horizontales y verticales, simulando sus interacciones.</li> <li>• Presenta una estructura modular, que permite diferentes opciones de modelización.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Datos geométricos de los acuíferos (extensión, espesor).</li> <li>• Condiciones de contorno (zonas de nivel constante, de flujo subterráneo nulo, etc.).</li> <li>• Parámetros hidráulicos (conductividad hidráulica, transmisividad, parámetros de almacenamiento, etc.).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Niveles piezométricos iniciales.</li> <li>• Presiones al sistema (ubicación y régimen de extracción de pozos/drenes, recarga, evaporación, relación con aguas superficiales).</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• El sistema a modelizar se divide en celdas. Para cada una de ellas, se resuelve la ecuación de flujo, asumiendo el área de modelización subdividida en bloques de características homogéneas.</li> <li>• Puede simular medios estratificados con capas semipermeables (admite heterogeneidad y anisotropía).</li> <li>• Aunque desarrollado para medios porosos, se puede aplicar, con precauciones, a medios fracturados asimilables.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sólo simula el flujo de agua subterránea, no admite transporte.</li> <li>• Es necesario tener un conocimiento bastante preciso del sistema.</li> <li>• Requiere el uso por parte de un hidrogeólogo experto</li> <li>• Su uso sin pre/post procesadores es tedioso, es fácil introducir errores, y poco visual.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• La salida son los niveles piezométricos (descensos, velocidades, etc.) de cada una de las celdas en que se divide el sistema a modelizar.</li> <li>• Las salidas originales del programa, así como los datos de entrada, se estructuran en ficheros ASCII. Para facilitar la interpretación de estos datos, se emplean programas asociados, predominantemente gráficos.</li> <li>• Funciona normalmente asociado a MODPATH (permite el trazado del movimiento de partículas, aplicable al transporte advectivo).</li> <li>• También cuenta con el WATER BUDGET, aplicación de cálculo de los balances de entradas y salidas de agua del sistema.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Programa básico de distribución libre; también gratuito pre/post procesador PMWIN. Última versión MODFLOW 2000 1.13.00 (2004)(<a href="http://water.usgs.gov/software">water.usgs.gov/software</a>). Existen numerosos programas comerciales que facilitan la introducción de datos y la visualización de resultados, y que pueden incluir programas de estimación de parámetros. Los más usuales son Visual MODFLOW, GMS (Groundwater Modeling System), Groundwater Vistas, Argos ONE</p>	

<b>MT3D</b> <b>Modular Three Dimensional Transport Model</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo 3D de transporte de solutos para la simulación de procesos de advección, dispersión y reacciones químicas (lineales, no lineales, biodegradación) de contaminantes en zona saturada. Dispone de una estructura modular que permite simular cada opción y compuesto de forma independiente.</li> <li>• Cuenta con una interfaz directa con MODFLOW, aunque también puede asociarse a cualquier otro modelo de flujo de diferencias finitas.</li> <li>• MT3D<sup>99</sup> incluye la opción de modelo de doble porosidad, aplicable a medios fracturados.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<b>Datos hidrogeológicos del sistema (modelización de flujo previa para obtener los niveles piezométricos y los flujos).</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Geometría del acuífero.</li> <li>• Características hidráulicas.</li> <li>• Presiones al sistema (recargas, descargas).</li> <li>• Dispersividad.</li> </ul>	<b>Datos químicos generales</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Constante de degradación, de sorción.</li> <li>• Concentraciones de partida, condiciones de borde.</li> <li>• Número y distribución de partículas.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sobre una discretización del sistema en celdas, se obtiene la evolución de plumas de contaminación de acuerdo a las condiciones de flujo subterráneo, considerando los principales procesos asociados al transporte de solutos: advección, dispersión y reacciones químicas.</li> <li>• Es uno de los modelos más utilizados y contrastados.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• El flujo subterráneo no se ve afectado por las concentraciones de compuestos.</li> <li>• Requiere un conocimiento preciso del sistema y que sea utilizado por un técnico experto.</li> <li>• Su uso sin pre/post procesadores es tedioso, es fácil introducir errores, y poco visual.</li> <li>• Es importante seleccionar el método de resolución más adecuado (MOC, MMOC, HMOC).</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Distribución espacial y temporal de concentraciones en el sistema y puntos seleccionados.</li> <li>• Balance de masas</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
Libre ( <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models/mt3d.html">www.epa.gov/ada/csmos/models/mt3d.html</a> ) MT3D v1.1. (1992) Programa comercial. Última versión MT3D <sup>99</sup> (enero 2002) Incorporado en paquetes junto a MODFLOW (GMS, Groundwater Vistas, Visual MODFLOW)	

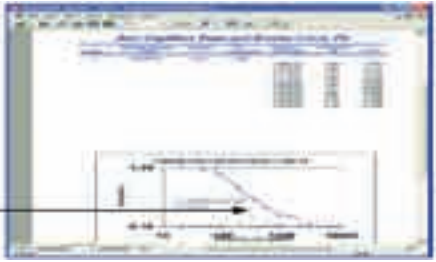
<b>BIOPLUME III</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Basado en el modelo de transporte MOC del Geological Survey de Estados Unidos (USGS).</li> <li>• Es un modelo numérico en 2D para el tratamiento de la atenuación natural de contaminantes orgánicos disueltos en aguas subterráneas. Simula biodegradación aeróbica o anaeróbica, conjuntamente con los procesos de advección, dispersión, sorción e intercambio iónico.</li> <li>• Utiliza como aceptores de electrones: oxígeno, nitratos, hierro (III), sulfatos y CO<sub>2</sub>.</li> <li>• Admite la selección de una cinética de reacción de primer orden, instantánea o Monod.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Porosidad eficaz/Coef. almacenamiento.</li> <li>• Espesor saturado.</li> <li>• Recargas/Descargas.</li> <li>• Dispersividad.</li> </ul> <p><b>Contaminación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Concentración de contaminantes.</li> <li>• Concentración aceptores de electrones.</li> <li>• Concentración carbón orgánico.</li> </ul>	<p><b>Degradación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Tasa de utilización del contaminante.</li> <li>• Cte. saturación media del contaminante.</li> <li>• Tasa de degradación de 1er orden.</li> <li>• Concentración de microorganismos.</li> <li>• Relación aceptor electrones/contaminante consumido.</li> <li>• Tasa degradación microbiana.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simula la evolución de penachos de contaminación sometidos a procesos de degradación. Dada su versatilidad permite evaluar la viabilidad de la atenuación natural como actuación correctora, simular el efecto del control sobre focos de contaminación (retirada fase libre, excavación de suelos) y evaluar la eficacia de técnicas como la infiltración de aceptores de electrones o la inyección de aire (air sparging).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Asume porosidad homogénea en todo el acuífero.</li> <li>• No contempla variaciones en las propiedades de los contaminantes y el agua como consecuencia de las reacciones de degradación.</li> <li>• No considera fenómenos de difusión.</li> <li>• No contempla gradientes verticales en flujo ni en concentraciones.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>Como resultados, Bioplume III muestra gráficamente la evolución de la contaminación en las distintas situaciones contempladas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Piezometría en régimen estacionario/transitorio.</li> <li>• Concentración de contaminantes/tiempo.</li> <li>• Distribución de aceptores de electrones/tiempo.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Libre disposición en:  <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html</a>                  WINDOWS 95/98/NT</p>	

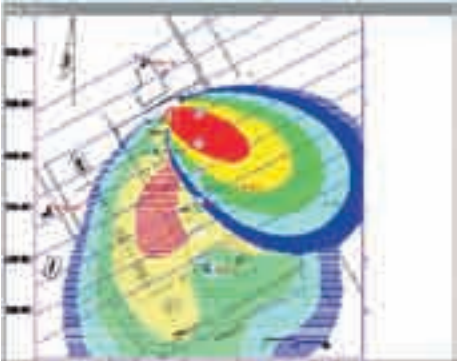
<b>UTCHEM</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Modelo de diferencias finitas que simula en 3D el flujo y transporte en medios hidrogeológicos.</li> <li>Admite cuatro fases: sólida, agua, aire, líquidos no miscibles y microemulsión.</li> <li>Las primeras versiones se centraban en simular procesos de remediación "SEAR" (Surfactant Enhanced Aquifer Remediation).</li> <li>Permite simular tanto zona no saturada como saturada, y régimen estacionario y transitorio; tiene capacidad para simular medios fracturados (modelo de doble porosidad).</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p>A) propiedades del sistema:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Definición de capas acuíferas y/o acuitardos.</li> <li>Permeabilidad, porosidad, gradiente hidráulico.</li> <li>Piezometría.</li> <li>Propiedades del contaminante: densidad, viscosidad, tensión interfacial, composición, solubilidad, etc.</li> <li>Distribución de los datos de saturación y volumen de fases no acuosas.</li> </ul>	<p>B) Datos de los procesos a modelizar:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Presión capilar y condiciones hidráulicas relativas para cada fase considerada.</li> <li>Capacidad cambio iónico, adsorción, coeficientes de dispersión, tasa de transferencia de masas.</li> <li>Tensión interfacial, humectabilidad, densidad.</li> <li>Propiedades del fluido surfactante.</li> <li>Propiedades de la microemulsión.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<p>Ejemplos prácticos más usuales:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Simulación del derrame y migración fase no acuosa en zona no saturada y saturada.</li> <li>Efectividad de una remediación utilizando surfactante/ cosolvente/polímero; surfactante/ espumante; cosolventes.</li> <li>Efectividad de una biorremediación.</li> <li>Reacciones con metales pesados y radionucleidos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Requiere un conocimiento exhaustivo del medio a modelizar. Si no hay datos, se pueden hacer estimaciones con bases específicas.</li> <li>Personal cualificado con altos tiempos de dedicación.</li> <li>Equipos informáticos de elevada memoria, tiempos de cálculo elevados, etc.</li> <li>De manejo difícil si no se cuenta con pre/post procesador.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<p>Algunas de las posibilidades más utilizadas son:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Concentraciones de efluentes de contaminantes, surfactante y cosolvente, con el fin de diseñar un programa de tratamiento superficial.</li> <li>Reducción de la saturación de un líquido en fase no acuosa dentro de la matriz sólida.</li> <li>Recuperabilidad del producto en fase libre.</li> <li>Fluctuaciones del nivel piezométrico por la adición de surfactantes.</li> <li>Recuperabilidad del contaminante, surfactante y cosolvente en fase acuosa.</li> <li>Concentraciones finales de contaminante y de todos los químicos inyectados.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Gratuito en internet: <a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models/utchem/">http://www.epa.gov/ada/csmos/models/utchem/</a> <a href="http://www.pe.utexas.edu/CPGE">http://www.pe.utexas.edu/CPGE</a></p> <p>Es muy conveniente contar con un paquete informático (p.e. tipo GMS v5.0) con pre y postprocesador, para facilitar el manejo e interpretación de la información.</p>	

## HERRAMIENTAS AUXILIARES

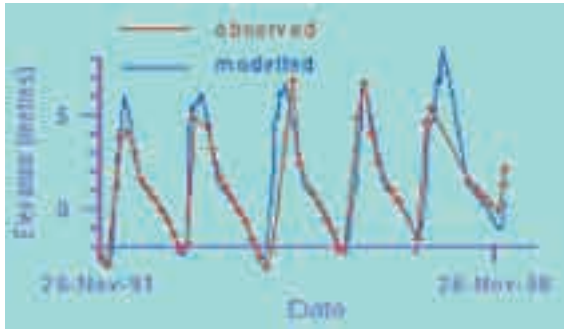
Se describen en este apartado,

- LNAPL, una base de datos de uso común para estimar propiedades físicas del medio y fluidos circulantes.
- OWL, un programa que permite la optimización de redes de control.
- PEST, de gran utilidad en el proceso de calibración de un modelo.

<b>LNAPL Parameters Database v. 2.0</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Desarrollado por API (<i>American Petroleum Institute</i>) en dic-2003, sobre base de datos Microsoft Access™.</li> <li>• Recopila información sobre parámetros físicos de diferentes muestras de fase no acuosa en varios tipos de matriz sólida. Contribuyen a la información Shell, BP, Chevron Texaco, Exxon Mobil, y Conoco Phillips.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p>La base de datos contiene los siguientes tipos de información:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Propiedades de la matriz sólida encajante: <math>d_{\text{aparente}}</math>, <math>d_{\text{real}}</math>, <math>n</math>, <math>k</math>, <math>S_r</math> al agua e hidrocarburo, cond. hidráulica, etc.</li> <li>• Distribución de tamaño de grano.</li> <li>• Propiedades del fluido: viscosidad, densidad, tensión superficial.</li> <li>• Parámetros de capilaridad.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Para obtener información de parámetros de capilaridad es conveniente realizar la búsqueda a partir de un rango de permeabilidad o conductividad hidráulica, ya que la búsqueda a partir de distribución de tamaños de partícula puede dar multiplicidad de resultados.</li> <li>• También se pueden estimar otros parámetros, como tensión superficial, definiendo viscosidad y densidad de producto.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se utiliza ampliamente cuando no se dispone de información completa de los parámetros de un determinado lugar.</li> <li>• En concreto, es de las pocas fuentes de información donde se puede encontrar parámetros de capilaridad según los modelos de Van Genuchten (VG) y Brooks-Corey (B-C), de gran utilidad en cálculos de flujo multifase.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Los datos recopilados se refieren a datos obtenidos en diversos lugares de USA, y puede tener fuertes discrepancias con suelos locales.</li> <li>• Existe la posibilidad de aumentar la base de datos con información propia, pero esto requiere la intervención de personal muy especializado.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• La búsqueda provee de información de parámetros individuales o estadísticos.</li> <li>• Permitir exportar los resultados como hoja de cálculo.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Disposición gratuita en la página de API:  <a href="http://groundwater.api.org/lnapl/database/">http://groundwater.api.org/lnapl/database/</a></p>	

<b>OWL (OPTIMAL WELL LOCATOR)</b>	
<p><b>DESCRIPCIÓN</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Desarrollado por EPA en colaboración con Dynamac Corporation, Certain Tech, Inc y Geotrans.</li> <li>• Sencillo modelo exploratorio diseñado para evaluar la representatividad de los piezómetros de una red de control y definir zonas de interés para la ubicación de nuevos piezómetros en función de la evolución de la contaminación.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<p><b>Contaminación:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ancho área fuente.</li> <li>• Concentración área fuente.</li> <li>• Factor de retardo.</li> <li>• Vida media.</li> </ul>	<p><b>Hidrogeología:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Piezometría.</li> <li>• Conductividad hidráulica.</li> <li>• Porosidad eficaz.</li> <li>• Dispersividad longitudinal.</li> <li>• Dispersividad transversal.</li> </ul>
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simula la evolución de la piezometría a partir de varias series de datos.</li> <li>• Predice la influencia de los cambios de la piezometría en la migración de la contaminación (puede considerarse degradación de 1<sup>er</sup> orden).</li> <li>• Identifica zonas de interés para instalar nuevos piezómetros y evalúa la representatividad de los ya instalados.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo conceptual muy simplificado: no admite heterogeneidades, variaciones acusadas de nivel, recargas, etc.</li> <li>• Limitado a penachos de dimensiones reducidas y fuentes de contaminación pequeñas y estables.</li> <li>• No aplicable para terrenos poco permeables (arcillosos).</li> <li>• Valido únicamente para contaminantes orgánicos.</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dirección de flujo y gradiente para un tiempo dado.</li> <li>• Estimación de la migración del penacho contaminante en función de la piezometría.</li> <li>• Densidad de puntos de control existentes.</li> <li>• Identificación de áreas de interés para la ubicación de nuevos piezómetros de control.</li> <li>• Permite diseñar muestreos optimizando los recursos.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Versión 1.2 (marzo 2004) libre y gratuita en la red. Requiere sistema operativo Windows 95, 98 NT, ME 2000 o XP y carga los datos a través de hojas de cálculo Excel o Lotus.</p> <p><a href="http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html">http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html</a></p>	



<b>PEST</b> <b>(Parameter ESTimation)</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Programa de estimación de parámetros durante la calibración, independiente del modelo de simulación elegido.</li> <li>• No es específico para su uso en combinación con modelos de flujo/transporte comerciales, sino que maneja cualquier programa que trabaje con ficheros ASCII.</li> <li>• Utiliza técnicas de estimación no lineal.</li> </ul>	
<b>PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ficheros “plantilla”, uno por cada fichero de entrada de datos al modelo (“.tpl”).</li> <li>• Ficheros de instrucciones, uno para cada fichero de salida del modelo (“.ins”).</li> <li>• Fichero de control, que especifica los nombres de los ficheros y operaciones (“.pst”).</li> </ul>	
<b>APLICACIÓN</b>	<b>LIMITACIONES</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estimación de parámetros durante la calibración.</li> <li>• Análisis predictivo: optimización de las combinaciones posibles de parámetros para minimizar la función objetivo.</li> <li>• Regularización: inclusión de limitaciones a la variación de los parámetros.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Requiere de datos muy precisos para alcanzar criterios de convergencia aceptables.</li> <li>• Aplicable a funciones continuas.</li> <li>• Requiere un buen conocimiento del sistema a modelizar y sus variables, para controlar la idoneidad de las soluciones .</li> </ul>
<b>RESULTADOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fichero “.par” con el juego de parámetros que proporcionan el valor más bajo de la función objetivo.</li> <li>• Fichero “.sen”, “.seo” con cálculos de las sensibilidades de los parámetros.</li> <li>• Fichero “.res”, de residuales (diferencias de valores medidos y obtenidos de la modelización).</li> <li>• Fichero “.mtt”, de la matrices de covarianza y correlación.</li> <li>• Información general en pantalla durante el proceso.</li> </ul>	
<b>DISTRIBUCIÓN</b>	
<p>Libre (última versión 7.3, noviembre 2003) <a href="http://www.sspa.com">www.sspa.com</a>                  Versión comercial Visual PEST-ASP. Existe una versión para Windows (WINPEST)</p>	



## **ANEXO II: EJEMPLOS**

## Índice

1. EVOLUCIÓN DE UNA PLUMA DE HIDROCARBUROS ORIGINADA EN UNA ESTACIÓN DE SERVICIO .....	75
1.1 MODELO CONCEPTUAL .....	75
1.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR .....	76
1.3 ENTRADA DE DATOS AL MODELO .....	76
1.4 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS .....	77
1.5 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD .....	79
2. EVOLUCIÓN DE LOS PROCESOS DE DEGRADACIÓN EN UNA PLUMA DE DISPERSIÓN DE DISOLVENTES ORGANOCORADOS PCE/TCE .....	80
2.1 MODELO CONCEPTUAL .....	80
2.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR .....	81
2.3 ENTRADA DE DATOS AL MODELO .....	82
2.4 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS .....	83
2.5 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD .....	84
3. SIMULACIÓN DE LA INFILTRACIÓN DE UN DERRAME DE GASOLINA EN UN ACCIDENTE DE UN CAMIÓN CISTERNA .....	85
3.1 EVALUACIÓN INICIAL DEL EMPLAZAMIENTO .....	85
3.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR .....	86
3.3 ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS BÁSICOS DEL MEDIO .....	86
3.4 ENTRADA DE DATOS AL MODELO .....	86
3.4.1 Propiedades hidráulicas .....	86
3.4.2 Parámetros de la fase hidrocarburo .....	87
3.4.3 Control de la simulación .....	87
3.5 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS .....	88
3.6 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD .....	88
4. CLAUSURA DE UN VERTEDERO DE RSU INCONTRALADO: SIMULACIÓN DEL IMPACTO AL ACUIFERO Y DISEÑO DE LA RED DE VIGILANCIA .....	90
4.1 MODELO CONCEPTUAL .....	90
4.2 SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN ZONA NO SATURADA .....	91
4.3 SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN ZONA SATURADA .....	94

## 1. EVOLUCIÓN DE UNA PLUMA DE HIDROCARBUROS ORIGINADA EN UNA ESTACIÓN DE SERVICIO

En 1980 se instaló un tanque subterráneo de gasolina en la Estación de Servicio A. En 1995 se detectó un problema de contaminación del acuífero subyacente. El tanque fue extraído en 1997 y en 2000 se instaló un sistema de remediación por bombeo y tratamiento (pump & treat). Desde que se detectó el problema en 1995 hasta la actualidad se viene realizando un control trimestral de calidad del agua subterránea.

**OBJETIVO:** Determinar cómo se encontrará la pluma en el año 2010, y si puede llegar a afectar a un sondeo de abastecimiento situado aguas abajo.

### 1.1 MODELO CONCEPTUAL

Este ejemplo representa una situación muy frecuente en cuanto a contaminación del subsuelo y aguas subterráneas, ya que hay numerosas instalaciones que cuentan con tanques enterrados donde se almacenan productos petrolíferos y que pueden llegar a deteriorarse y producir un impacto en el medio subterráneo.

La formulación del modelo conceptual de flujo y transporte del emplazamiento en particular precisa:

1. Identificar las características hidrogeológicas del acuífero (o acuíferos) que van a ser modelados.
2. Definir el sistema de flujo (especificando condiciones iniciales y de contorno) y fuentes y sumideros de agua en el sistema (por ejemplo, recarga por infiltración, recarga por pérdida en las redes de suministro urbano, bombes, etc.)
3. Definir el sistema de transporte. En concreto la velocidad de flujo y la dispersión condicionarán la forma de la pluma, mientras que la sorción y los procesos de biodegradación influirán en el retardo y la atenuación de las condiciones. También en la definición del sistema de transporte se deberán establecer las fuentes y sumideros del sistema para los compuestos de interés (determinando condiciones de contorno e iniciales).

Estos puntos requieren diversa información experimental mínima. No obstante, puede ser aconsejable acometer una modelización incluso cuando existen pocos datos, ya que puede ayudar a identificar aquellas áreas donde se requiere información adicional detallada.

En la figura 1.1. se representa esquemáticamente la situación inicial del ejemplo presentado.

Como se aprecia, las pérdidas del tanque de gasolina llegan a ocasionar un lentejón de fase no acuosa, de menor densidad que el agua, y una pluma de contaminantes en disolución. Por su mayor solubilidad en agua, los compuestos monoaromáticos (BTEX) son los componentes más móviles de esta pluma, por lo que son los que migrarán a zonas más distantes.

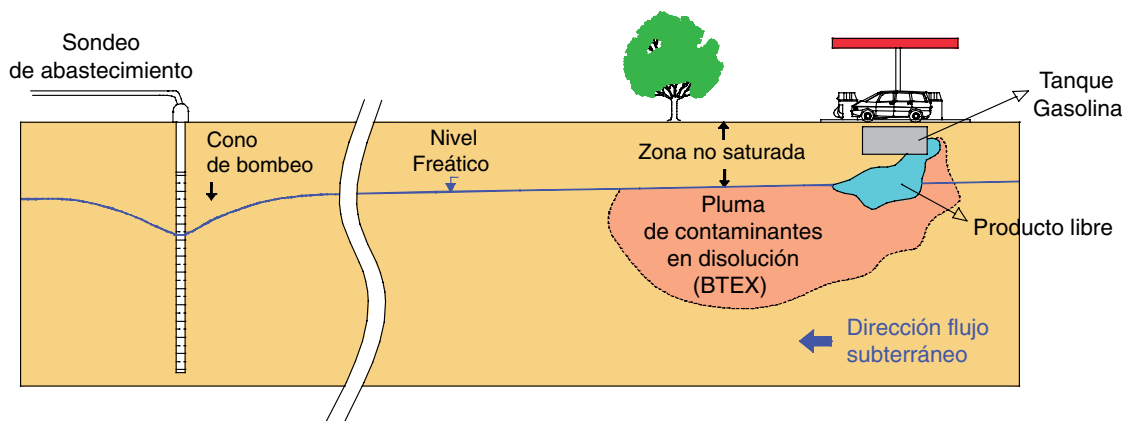


Figura 1.1. Modelo conceptual.

## 1.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR

Para este caso en particular existen diversos criterios para seleccionar el modelo a utilizar.

- Debe poder simular transporte en disolución de hidrocarburos, en particular BTEX, ya que es previsible que estos sean los constituyentes principales de la pluma en movimiento.
- Es conveniente que pueda simular procesos de biodegradación de hidrocarburos en agua subterránea.
- El objetivo planteado requiere que el modelo pueda prever la longitud y anchura de la pluma en un futuro (año 2010). Existe la posibilidad de que la simulación se realice en dos dimensiones.

Existen diversos modelos analíticos y numéricos que podrían dar respuesta, con mayor o menor detalle, al objetivo formulado. En este ejemplo se ha considerado BIOPLUME III por su fácil manejo y por permitir describir los procesos de degradación intrínseca de hidrocarburos, que repercutirán de forma importante en el tamaño final de la pluma en movimiento.

## 1.3 ENTRADA DE DATOS AL MODELO

La entrada de datos a BIOPLUME III requiere:

- La discretización del espacio. El primer paso para aplicar BIOPLUME III consiste en la selección del tamaño de malla y el número de celdas que se considerarán. El modelo necesita límites de no-flujo, por lo que se deben incluir celdas adicionales para tener en cuenta esta característica. En el presente ejemplo, el sondeo de abastecimiento debe incluirse en el dominio espacial. No conviene definir dominios espaciales muy amplios, ya que las incertidumbres se amplían considerablemente.
- Definir las características hidrogeológicas del acuífero: porosidad eficaz, dispersividad longitudinal, coeficiente de almacenamiento, transmisividad, recarga, potencia del acuífero.

- La discretización del tiempo. Es importante definir los periodos de tiempo durante los cuales las condiciones hidrológicas no se han modificado y es posible proceder a una calibración de los datos existentes. En el ejemplo que se está tratando, donde hay que simular 30 años (entre 1980 y 2010), se puede identificar:
  - a) periodo 1980-1997. Es cuando se produce la fuga, en algún momento entre la instalación del tanque y 1995 y aún no se había acometido ninguna medida de remediación.
  - b) 1997-2000. En este periodo se “corta” con la fuente primaria de contaminación, pero aún no se ha comenzado con la remediación del subsuelo.
  - c) 2000-2010. Este periodo se caracteriza por la instalación de un sistema de bombeo y tratamiento.

En este caso se ha considerado que el sondeo de abastecimiento sigue un esquema de bombeo constante en los 30 años considerados. Si no hubiera sido así, sería preciso modificar la discretización del tiempo para contemplar las variaciones producidas.

- Definir las condiciones de contorno. Se pueden simular dos tipos de condiciones de contorno: flujo constante o potencial hidráulico constante. Para un caso donde puede ser de importancia simular procesos de biodegradación intrínseca, puede ser recomendable utilizar la opción de flujo constante, ya que permite simular el paso de aceptores de electrones desde posiciones aguas arriba de la zona contaminada.
- Indicar las condiciones iniciales. Es necesario definir para cada periodo de simulación la posición del nivel piezométrico, las concentraciones iniciales de contaminantes (fundamentalmente BTEX), oxígeno, nitratos, hierro ferroso y férrico, sulfatos y dióxido de carbono.
- Identificar las fuentes y sumideros del sistema. Las entradas y salidas del sistema se pueden simular considerando pozos de inyección/bombeo, celdas de recarga/descarga o celdas de potencial constante. Durante el último periodo de simulación del ejemplo considerado, será necesario incluir el efecto de los pozos de bombeo del sistema de tratamiento. Se considera régimen transitorio en la simulación.
- Definir las variables de reacción: disminución del aporte en la fuente, sorción, cambio iónico y en especial reacciones de biodegradación aeróbica y anaeróbica (deberán estar claramente definidas en el modelo conceptual previo).
- Definir, según las necesidades de detalle de las salidas del modelo, algunos parámetros numéricos y de control (número de partículas consideradas en cada celda, número de iteraciones máximo, criterios de convergencia, etc.). En general, es conveniente seguir las recomendaciones del manual de uso.

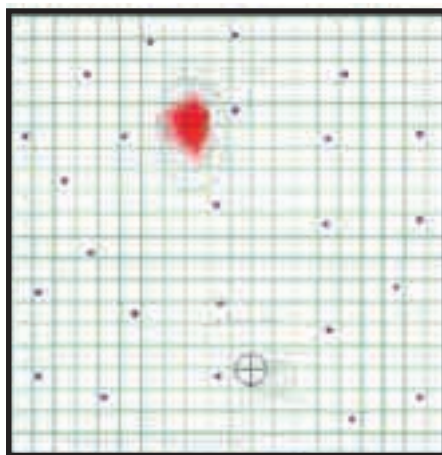
#### 1.4 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS

La ejecución secuencial del programa incluye:

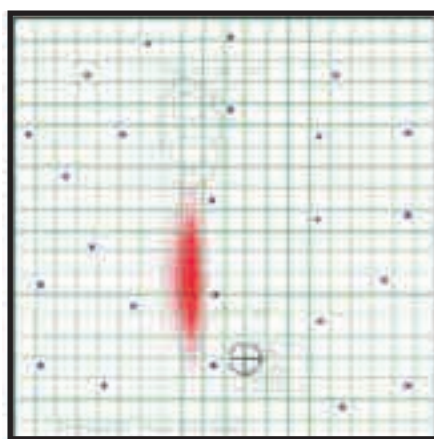
- La modelización básica de flujo. Se ejecutarán los tres periodos de simulación definidos, con el fin de mejorar la calibración de los parámetros de flujo.
- Una primera aproximación al transporte de hidrocarburos, sin considerar fenómenos de atenuación

- y finalmente, la simulación del transporte, teniendo en cuenta procesos de atenuación natural.

La figura 1.2 muestra la salida gráfica del programa con la distribución de hidrocarburos al comienzo de las actuaciones de bombeo y tratamiento (esto es, el inicio del tercer periodo considerado, año 2000). Después de 10 años de simulación del funcionamiento del sistema de bombeo, la pluma de hidrocarburos tendría el aspecto de la figura 1.3. sin tener en cuenta procesos de atenuación natural. Mientras, en la figura 1.4, el aspecto de la pluma de contaminación es mucho más atenuado, ya que se han asumido procesos de degradación microbiana. En todas las figuras se señala la posición del sondeo de abastecimiento.



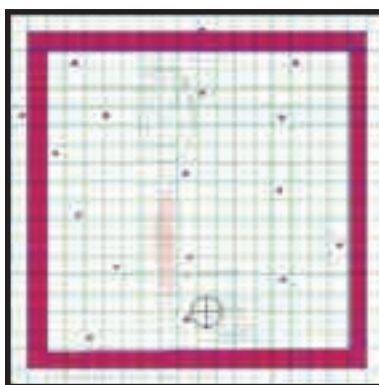
**Figura 1.2. Distribución de hidrocarburos al inicio de las labores de bombeo y tratamiento.**



**Figura 1.3. Pluma de hidrocarburos simulada después de 10 años de funcionamiento del sistema de bombeo y tratamiento, sin tener en cuenta procesos de atenuación natural.**

BIOPLUME III, en su versión Windows 95 y superiores, también tiene la posibilidad de presentar una animación de video de la migración de la pluma en los diversos escenarios considerados. De esta forma se pueden visualizar en una rápida sucesión de imágenes los resultados para cada uno de los pasos de tiempo considerados.





**Figura 1.4. Pluma simulada de hidrocarburos después de 10 años de funcionamiento del sistema de bombeo y tratamiento, asumiendo procesos de atenuación natural.**

Durante el proceso de calibración, se modifican diversas condiciones: iniciales, de contorno o perturbaciones del medio (bombeo, inyección, etc.) para examinar si el modelo es capaz de reproducir las condiciones medidas experimentalmente, tanto de niveles piezométricos, como de concentraciones (dentro de un margen de error).

El procesador gráfico de BIOPLUME no lleva acoplado ningún procedimiento de calibración automática. El proceso de calibración en BIOPLUME III es manual, y precisa de la reinterpretación detallada de la información de campo, evaluando los rangos de variación más probables para cada variable.

Para el ejemplo considerado, los principales parámetros de calibración de flujo serán: transmisividad, potencia del acuífero, recarga y condiciones de contorno. Entre los que se utilizarán para la calibración del transporte se pueden mencionar: definición de la fuente, dispersión, sorción y los parámetros de biodegradación.

Una vez calibrado el modelo, si se dispone de un segundo conjunto de observaciones (p.e., los resultados de una monitorización anteriormente no usada o de un periodo de tiempo diferente), puede procederse a validarlo. Cuanto más se valide el modelo, mayor será la garantía de cualquier predicción de futuro.

## **1.5 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD**

El análisis de sensibilidad es especialmente útil en el proceso de predicción. El propósito de realizarlo es cuantificar los efectos de las incertidumbres asociadas a la estimación de parámetros de entrada al modelo sobre los resultados del modelo.

Así, durante un análisis de sensibilidad, los valores calibrados de transmisividad, potencia, recarga, dispersividad, etc. se cambian sistemáticamente dentro del rango de valores aplicables. De esta manera se llegan a identificar las variables de mayor repercusión en los resultados, pudiéndose plantear nuevas pruebas experimentales para conseguir una definición más precisa de valores. Este tipo de análisis debe realizarse siempre para cada modelización.

## 2. EVOLUCIÓN DE LOS PROCESOS DE DEGRADACIÓN EN UNA PLUMA DE DISPERSIÓN DE DISOLVENTES ORGANOCLORADOS PCE/TCE

Una instalación dedicada al montaje de componentes electrónicos tuvo en funcionamiento un tanque de desengrasado desde 1960 hasta 1977. Los agentes desengrasantes fueron percloroetileno (PCE) y tricloroetileno (TCE). En 2002 se detectó contaminación en un pozo situado 330 m aguas abajo. En la actualidad se está realizando la investigación de detalle, así como el análisis cuantitativo de riesgos.

**OBJETIVO:** Evaluar la longitud total que puede alcanzar la pluma y determinar si en algún momento se alcanzará un estado estacionario. Estos datos serán de utilidad para definir la mejor alternativa para gestionar la pluma contaminante.

### 2.1 MODELO CONCEPTUAL

La contaminación por disolventes organoclorados presenta una complejidad importante en los medios hidrogeológicos. La mayor densidad de estos compuestos respecto al agua hace que puedan penetrar hasta la base del acuífero. Por otra parte, su potencial toxicidad y la dificultad para degradarse en muchos medios naturales hace que los riesgos para la salud humana puedan apreciarse a distancias importantes.

La fase de diagnóstico en el tipo de problemas presentado en este ejemplo es crucial para poder definir el modelo conceptual de flujo y de transporte, lo que a su vez repercutirá en la selección de la técnica de remediación más adecuada al emplazamiento.

En la figura 2.1 se presenta un esquema de la situación existente en el emplazamiento.

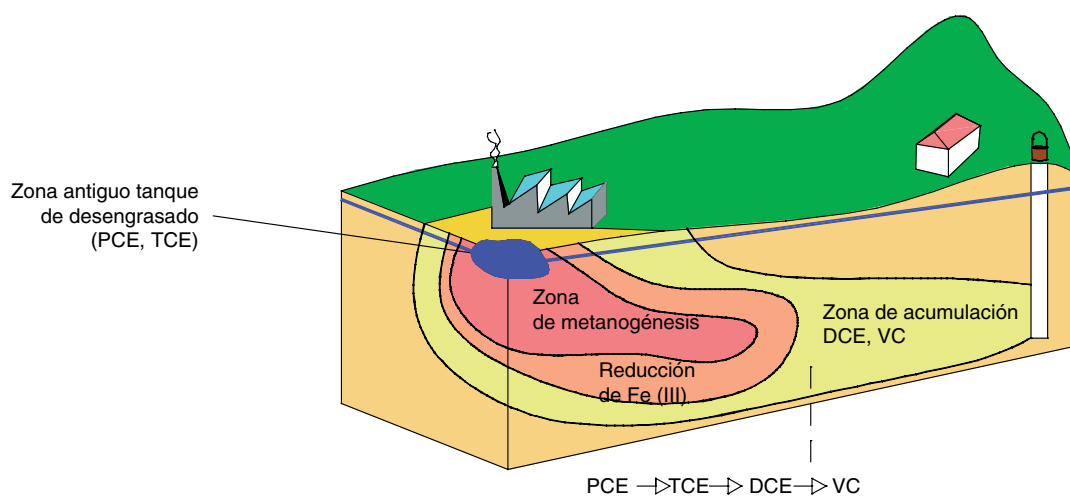


Figura 2.1 Modelo conceptual del emplazamiento.

En las fases iniciales se suele contar con información precaria sobre las dimensiones de la pluma (longitud, anchura, profundidad) y con las tasas de degradación existentes.

Se ha de poner especial énfasis en conocer si se producen reacciones de degradación en el medio. Tanto el PCE como el TCE en medio anaerobio generan una cadena de descomposición en la que los productos tienen progresivamente menor proporción de átomos de cloro (ver figura 2.2): los diferentes isómeros del dicloroetileno (DCE), cloruro de vinilo (VC) y como producto final, eteno.

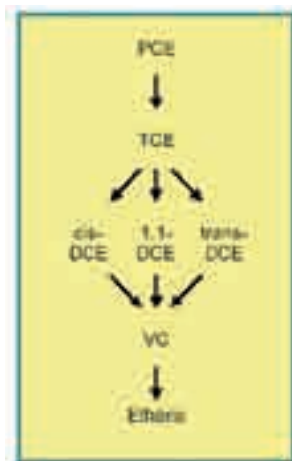


Figura 2.2. Secuencia de dechloración reductiva de los etenos clorados.

En esta cadena de reacciones, mientras los miembros más clorados, PCE o TCE, se degradan rápidamente en medio anaeróbico, los productos menos clorados prefieren progresivamente condiciones aeróbicas.

Esto ocasiona que no exista una única pluma de contaminación, sino la superposición de plumas de cada especie individual. En general, las plumas de TCE y cis-DCE son las que alcanzan mayores longitudes.

## 2.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR

En este caso, la aplicación del modelo analítico BIOCHLOR es muy adecuada, ya que simula el transporte reactivo en medio saturado, teniendo en cuenta reacciones de dechloración reductiva. Este modelo asume:

- Condiciones geológicas e hidrogeológicas uniformes en todo el dominio de interés.
- Fuente de la contaminación en un plano vertical, de manera que permita la representación en 2D.
- Dechloración reductiva con cinética de primer orden.

BIOCHLOR se ha desarrollado en hoja de cálculo tipo Excel, lo que facilita mucho su manejo. Esto hace muy aconsejable su utilización en emplazamientos poco complejos.

No obstante, hay casos, en los que la complejidad geológica o hidrogeológica, o el grado de precisión que se requiere, hace que sea necesario acometer una simulación numérica. En este caso, se suele utilizar el modelo MODFLOW para simulación de flujo, que luego se acopla con un modelo de transporte como RT3D, que permite simular reacciones de degradación reductiva de disolventes clorados.

### 2.3 ENTRADA DE DATOS AL MODELO

El primer paso para realizar la simulación con BIOCHLOR requiere la estimación de los parámetros de entrada en el formato del modelo.

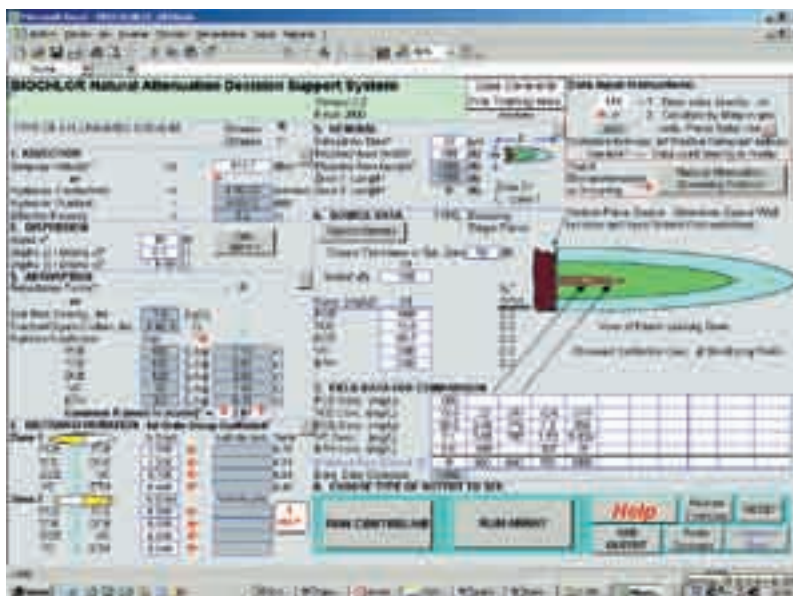


Figura 2.3. Pantalla de BIOCHLOR para la entrada de datos.

En la figura 2.3 se presenta la pantalla de entrada de datos al modelo.

El modelo requiere información sobre los procesos de:

- *Advección*. Se pueden calcular a partir de los valores de conductividad hidráulica, gradiente y porosidad.
- *Dispersión*. Se puede estimar a partir de la anchura estimada de la pluma.
- *Adsorción*, para estimar los factores de retardo (a partir de la cantidad de materia orgánica presente en la matriz sólida, de la  $K_{oc}$  de los compuestos considerados y de la densidad del terreno).
- *Biotransformación*. Este es claramente un parámetro de calibración del modelo, pero se puede comenzar con estimaciones a partir de las concentraciones registradas en campo.

- *Datos generales*: tiempos de simulación, longitud y anchura del área modelada.
- *Datos de la fuente*. En el caso del ejemplo, se considera decreciente en el tiempo (simulando unos 33 años desde el momento probable de fuga (alrededor de 1969), dimensiones del área fuente (en pies).
- *Datos de campo* para la comparación con los resultados de la simulación. Se han de escoger los puntos más cercanos al eje de la pluma.

## 2.4 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS

En general, en la ejecución de BIOCHLOR es preciso realizar el ajuste de las constantes de biodegradación de primer orden, mediante sucesivas aproximaciones por el método de “prueba y error”. La comparación de la distribución simulada con la real obtenida en campo, permite la calibración del modelo.

Las tasas de atenuación natural para concentraciones decrecientes son valores positivos. Es conveniente contrastar los valores obtenidos con los publicados en la bibliografía (por ejemplo, los recogidos en BIOCHLOR-Chlorinated Solvent Plume Database- AFCEE, 2000). Hay que tener presente que hay más de 4 órdenes de variación posible para estos parámetros.

En este caso, las tasas de biodegradación son positivas, lo que indica que se está produciendo biodegradación de los compuestos clorados una vez fuera del área fuente. Las tasas más altas las presentan PCE y TCE (con valores de 2 y 1 respectivamente y tiempos de vida medios de 0,34 y 0,7 años respectivamente), mientras que VC es la más baja ( 0,4- tiempo de vida medio de 1,7 años).

Cuando se consigue una calibración aceptable, es el momento de continuar con una simulación predictiva, probando con incrementos de tiempo, hasta alcanzar un aparente estado estacionario. En el ejemplo, el tiempo de simulación fue de los primeros 33 años de movimiento de la pluma. Este tiempo se ha prolongado hasta 100 años para alcanzar un estado estacionario.

A los 100 años, apenas se ha incrementado la longitud de la pluma de TCE, pero la pluma de cis-DCE ha aumentado hasta el doble, y la de VC ha triplicado su extensión (ver figura 2. 4).

Para confirmar la tendencia de expansión de las plumas de cis-DCE y VC puede ser necesario instalar más pozos de observación que permitan delinear adecuadamente la pluma. Así también será de interés tener datos con una periodicidad más frecuente en todos los pozos de control de la zona.

A pesar de conocer las tasas de biodegradación y las tendencias futuras de las plumas en movimiento, no es posible estimar la duración de la pluma (ni en consecuencia, estimar cuándo se conseguirá alcanzar un determinado valor objetivo), ya que se desconoce el volumen de fase no acuosa que aún queda en el foco secundario de contaminación.

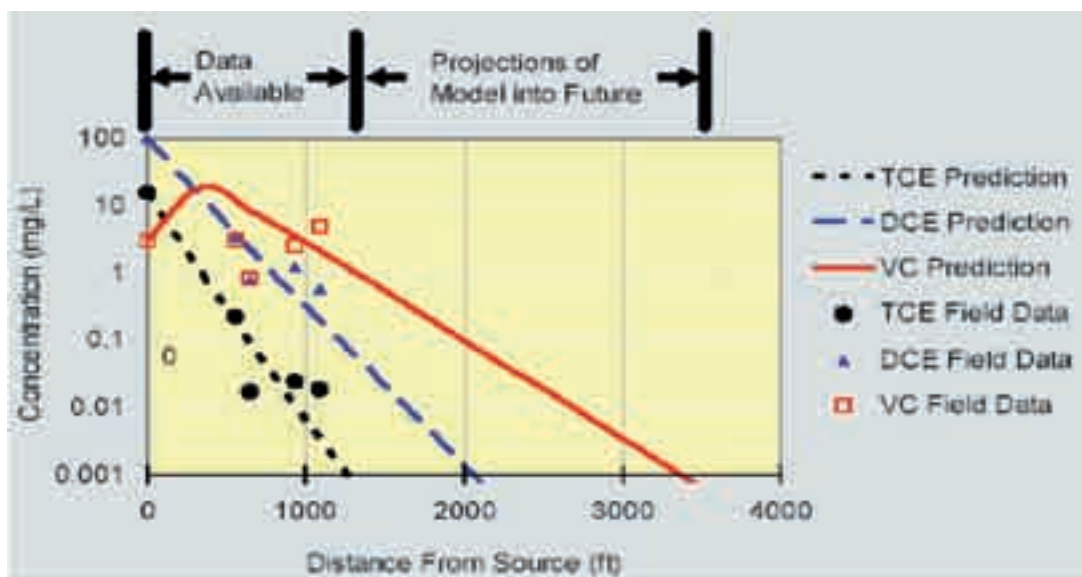


Figura 2.4. Resultados para la predicción hasta conseguir un estado estacionario.

## 2.5 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Para ilustrar la respuesta del modelo a modificaciones de los parámetros de entrada, se ha llevado a cabo un análisis de sensibilidad enfocado en los coeficientes de degradación de primer orden y en los factores de retardo.

Se han modificado los valores de los factores de degradación, probando con cifras aumentadas al doble y con otras reducidas a la mitad. Como resultado, se aprecia una gran sensibilidad del modelo en este ejemplo frente a estos parámetros. Las concentraciones aumentan considerablemente al disminuir los coeficientes, y recíprocamente, descienden al aumentar estos parámetros (en especial para el caso del eteno).

En cambio, la modificación de los factores de retardo, sólo cambian ligeramente las concentraciones finales, por lo que estos parámetros, para el caso aquí examinado, tienen una repercusión muy inferior a los coeficientes de degradación.

### 3. SIMULACIÓN DE LA INFILTRACIÓN DE UN DERRAME DE GASOLINA EN UN ACCIDENTE DE UN CAMIÓN CISTERNA

En una carretera se produce un accidente de un camión cisterna, de forma que se vierten 30.000 l de gasolina directamente al terreno. Inicialmente se produce un charco de unos 2m de radio, que se infiltra totalmente en unas 4-5 horas.

La información regional y observaciones de *visu* indican que el terreno es de tipo areno-arcilloso. El nivel freático se encuentra entre 5 y 5,5 m de profundidad (Fuente: *URS*, 2005).

**OBJETIVO:** Estimar el tiempo de llegada de la gasolina al acuífero, con objeto de poder ayudar a planificar las actuaciones de emergencia.

#### 3.1 EVALUACIÓN INICIAL DEL EMPLAZAMIENTO

Para que una modelización en un caso así pueda ser útil se precisa llegar a resultados en el menor tiempo posible, por lo que el modelo conceptual no podrá elaborarse de forma muy detallada; será muy esquemático.

En este ejemplo, donde se ha vertido un hidrocarburo ligero de baja viscosidad, es previsible que el movimiento descendente sea suficientemente rápido para despreciar en primera aproximación los efectos de disolución. Habrá, pues, una frontera neta entre la gasolina y el agua, sin que en esta fase haya que considerarse la formación de plumas en disolución.

En la figura 3.1. se representa el modelo conceptual de migración de un vertido de esta naturaleza en un medio homogéneo e isótropo.

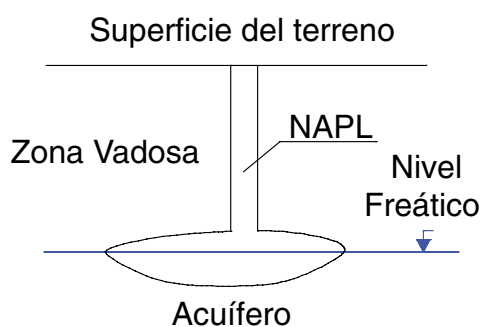


Figura 3.1. Modelo conceptual.

### 3.2 SELECCIÓN DEL MODELO A UTILIZAR

El modelo a utilizar deberá poder simular:

- Transporte en zona no saturada.
- Flujo multifase: agua-hidrocarburo-aire.
- Condiciones simples, que permitan estimaciones rápidas.

En este caso, el modelo HSSM (*“Hydrocarbon Spill Screening Model”*, EPA, 1994) es el más adecuado. En concreto, se utilizará su módulo KOPT para simulación del movimiento descendente en zona no saturada.

### 3.3 ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS BÁSICOS DEL MEDIO

Como se ha comentado, por información regional y observaciones de *visu*, se clasifica el suelo donde se ha producido el derrame como de tipo areno-arcilloso. No obstante, no se tiene información más detallada para realizar los cálculos de flujo multifase en medio no saturado, por lo que se debe acudir a estimarlos a partir de las bases de datos disponibles.

El programa HSSM toma como referencia parámetros de los publicados por *Brakensiek et al.* en 1981<sup>1</sup>, aunque hay bases de datos más recientes como *LNAPL Parameter Database (API, 2003)*, *Rosetta (USDA, Schaap, 1999)*, etc. que pueden dar mayor fiabilidad a la estimación.

### 3.4 ENTRADA DE DATOS AL MODELO

La entrada de datos a HSSM, y en especial para la utilización exclusiva del módulo KOPT, es sencilla. Requiere tres grupos de datos fundamentales: los relativos a las propiedades hidráulicas, los relacionados con las propiedades del hidrocarburo, y los que definen las opciones de simulación.

#### 3.4.1 Propiedades hidráulicas

Se toman las propiedades estándar del agua y se deben definir las condiciones de velocidad de recarga en la zona (bien a partir de la pluviometría o de la saturación residual del terreno respecto del agua).

Para el tipo de suelo del ejemplo, se ha considerado un valor de conductividad hidráulica saturada de 0,75 m/d. Hay que tener en cuenta que durante el descenso del hidrocarburo por

---

<sup>1</sup> Brakensiek, D.; Engleman, R.; Rawls, W. (1981) *“Variations within texture classes of soil water parameters”*. Transactions of the American Society of Agricultural Engineers 335-339.



el perfil del suelo, la conductividad hidráulica se puede estimar que descenderá aproximadamente a la mitad (a partir de gráficos de *Mercer* y *Cohen*, 1990). El programa calcula a partir de estas estimaciones la cantidad de aire atrapado que no llega a desplazar ni el agua ni la gasolina en su movimiento descendente.

Otro aspecto clave para definir el movimiento en zona no saturada es la curva de presión capilar. El programa puede realizar la simulación bien según el modelo de *Brooks* y *Corey*, bien según el de *van Genuchten*. Estos parámetros se estimarán a partir de la información de las bases de datos disponibles, como ya se ha comentado anteriormente.

En este ejemplo, donde sólo interesa el transporte por zona no saturada, no es necesario definir muchas de las propiedades del medio saturado (p.e. gradiente hidráulico, dispersividad, espesor capilar, etc.), que pueden quedar por defecto como ceros. En este caso, se debe desactivar la comprobación automática de rango, para que la simulación no dé continuos problemas para verificar estos datos.

### 3.4.2 Parámetros de la fase hidrocarburo

Los parámetros en relación con la fase no acuosa (densidad, viscosidad, saturación residual, tensión superficial, etc.) también se pueden estimar a partir de las bases de datos disponibles.

Para definir el derrame existen varias opciones. En el caso planteado, donde se ha producido una fuga “instantánea”, la opción más adecuada es la de “flujo especificado” en la que se define el caudal de entrada en un cierto periodo de tiempo. Los datos que se conocen del vertido es que fue de 30 m<sup>3</sup> de producto, que se produjo sobre una superficie de radio estimado de unos 2 m, y que se infiltró todo el volumen en algo menos de 5 horas (0,2 días). De esta manera se puede calcular el flujo de entrada durante el periodo de infiltración:

$$Q_{\text{entrada}} = 30 \text{ m}^3 / [\pi * (2\text{m})^2 * 0,2 \text{ días}] = 11,9 \text{ m/d}$$

### 3.4.3 Control de la simulación

En este ejemplo, será preciso definir el tiempo total de simulación y los momentos para los que se desea representar gráficamente los perfiles de saturación.

El modelo HSSM-WIN requiere que se indique por lo menos un receptor de agua subterránea, que para el propósito del ejemplo, bastará en situarlo en las coordenadas (0 , 0), es decir, justamente bajo el lugar de vertido.

### 3.5 EJECUCIÓN DEL MODELO Y RESULTADOS

En el ejemplo presentado sólo es necesario correr el módulo KOPT. Los perfiles de simulación que resultan se dibujan con HSSM-PLT. En la figura 3.2 se representan los resultados obtenidos para las estimaciones realizadas.

En el gráfico se aprecia cómo el frente de hidrocarburo va profundizando en el perfil no saturado al transcurrir el tiempo. En los primeros momentos, el contenido en hidrocarburo en el primer tramo de suelo es muy elevado, pero con el tiempo, la saturación se va suavizando en todo el perfil.

Según esta primera simulación, la gasolina nunca alcanzaría el nivel freático, ya que quedaría “colgada” en el primer metro y medio de suelo, donde se alcanzarían valores de saturación residual, que el modelo considera inmóvil.

Si se llegan a considerar estos valores como verdaderos, las alternativas de actuación (extracción del terreno contaminado, aplicación de técnicas de biorremediación para valores residuales, etc.) pueden plantearse con plazos amplios.

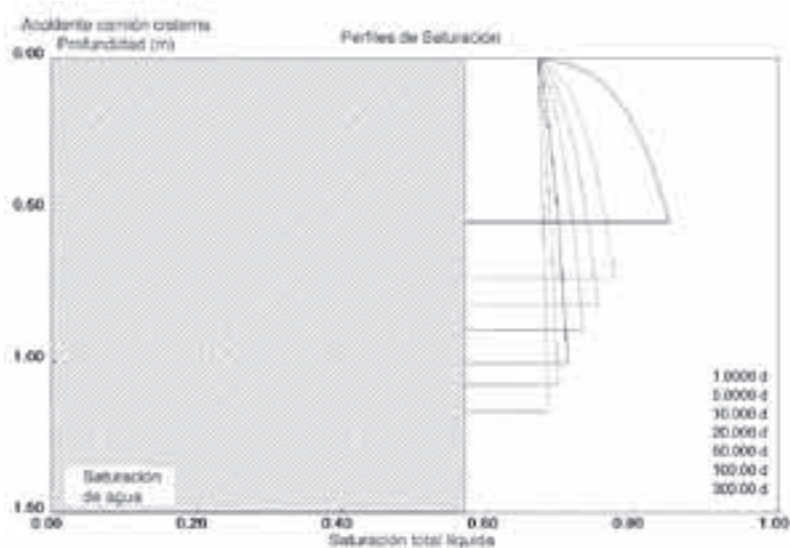


Figura 3.2. Resultados de la primera simulación.

### 3.6 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Los resultados obtenidos en la simulación anteriormente realizada se basan en parámetros tomados de la bibliografía, por lo que es imprescindible realizar un análisis de sensibilidad para determinar las variaciones que se pueden producir al considerar valores diferentes dentro del rango posible para el tipo de terreno existente.

Si la conductividad hidráulica fuera un orden de magnitud mayor del considerado (lo que implica que la proporción de arcilla fuera bastante menor de la inicialmente estimada), la gasolina podría fluir más rápidamente hacia zonas más profundas del perfil. Si se toma un valor de 7,5 m/día, los resultados son muy diferentes. Como se aprecia en la figura 3.3., la gasolina alcanzaría el nivel freático entre 5 y 10 días de producirse el accidente.

Habiéndose identificado este parámetro como clave de la simulación, cabe pensar en realizar determinaciones de granulometría rápidas sobre muestras de suelo para poder afinar el rango de variación en el caso particular estudiado.

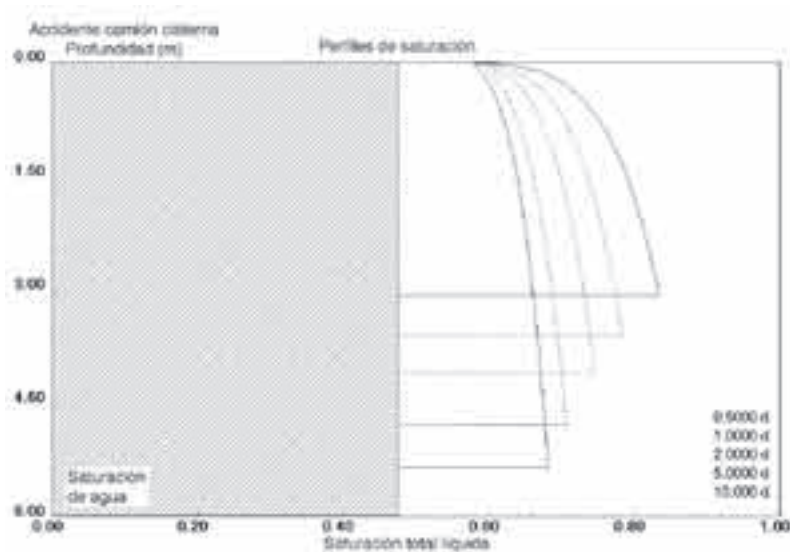


Figura 3.3. Resultados de la simulación con una conductividad hidráulica un orden de magnitud superior.

#### 4. CLAUSURA DE UN VERTEDERO DE RSU INCONTROLADO: SIMULACIÓN DEL IMPACTO AL ACUÍFERO Y DISEÑO DE LA RED DE VIGILANCIA

Un vertedero incontrolado de RSU, localizado en la zona más baja de un valle, se ha acondicionado con un cubrimiento superior de baja permeabilidad. Así mismo, se han realizado unos canales perimetrales al vertedero para derivar las aguas del arroyo estacional que fluye durante la época de lluvias. En la zona, aguas abajo del vertedero, se ha construido una berma de contención y un foso de recogida de lixiviados.

Por las condiciones climatológicas de la zona, existe una alternancia de periodos muy breves de inundaciones que elevan rápidamente el nivel de agua subterránea hasta tocar la parte inferior del vertedero y periodos secos, donde el nivel freático se descuelga a niveles inferiores.

(Fuente: URS, 2005).

**OBJETIVO:** Estimar si se puede producir afección al acuífero y diseñar una red de control para poder localizar la pluma en el acuífero y su movimiento en el tiempo.

##### 4.1 MODELO CONCEPTUAL

El establecimiento del modelo conceptual es particularmente importante en los casos que se plantean problemas en medio saturado y no saturado.

En la figura 4.1. se muestra una vista panorámica del emplazamiento.

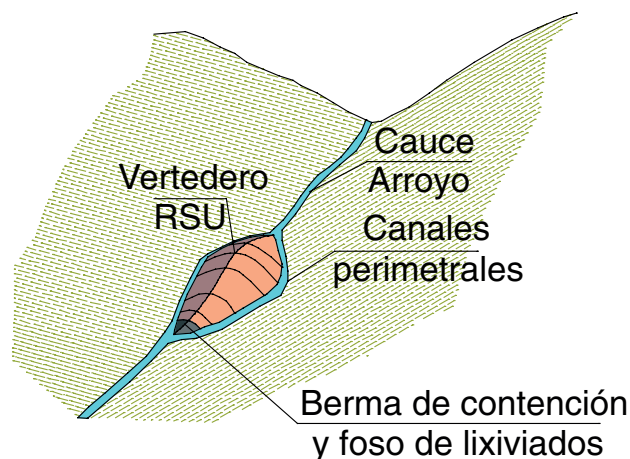
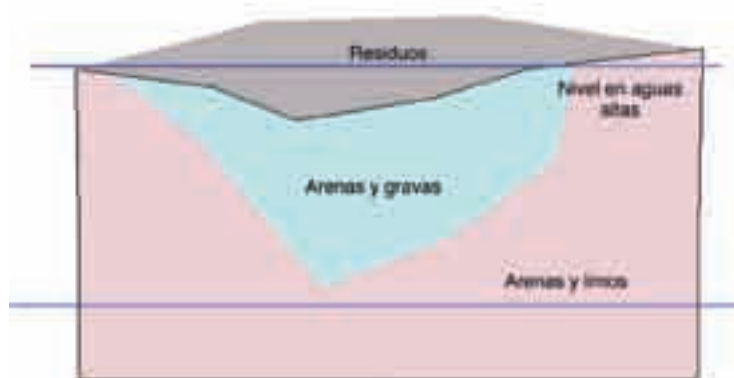


Figura 4.1. Perspectiva panorámica del emplazamiento.

El recubrimiento de los residuos hace que la recarga por infiltración directa de agua de lluvia sea muy baja (despreciable en la práctica). Sin embargo, los materiales reciben agua lateralmente,

durante los momentos de lluvias intensas, lo que de forma previsible originará un lixiviado con carga contaminante, que cuando bajen los niveles migrará en profundidad.

En la figura 4.2 se representa el modelo de funcionamiento del emplazamiento, según un corte transversal. Los residuos se acumulan sobre los materiales cuaternarios de arenas y gravas del antiguo cauce. Subyacentes a este cuaternario se encuentran materiales algo menos permeables, fundamentalmente arenas, con mayor porcentaje en limos. En la figura se ha representado el rango de oscilación del nivel freático, con la franja de materiales que quedarían humedecidos durante los momentos de máximo ascenso.



**Figura 4.2. Modelo conceptual de funcionamiento hidrogeológico. Corte transversal.**

Durante los episodios de inundación, el ascenso rápido de niveles hace que los residuos más profundos del vertedero lleguen a mojarse por aporte lateral de agua. Con posterioridad, al bajar rápidamente el nivel de agua, el agua retenida en los residuos, se irá liberando y percolará hacia el nivel freático. Será preciso describir el movimiento del lixiviado a través de la zona no saturada para poder establecer las concentraciones que pueden estar llegando al acuífero.

En principio, a partir de los datos analíticos del agua que se recoge en el foso de lixiviados, se considera que la salinidad no es excesiva, por lo que no es probable que existan problemas de flujo denso independiente del agua. Esto es, los contaminantes se considerarán en disolución acuosa.

#### **4.2 SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN ZONA NO SATURADA**

Para esta simulación se ha tenido en cuenta el módulo de transporte VS2DTI del programa VS2DI. Este programa es un paquete gráfico de pre y postproceso de VS2DI que permite simular flujo y transporte en medios porosos parcialmente saturados. VS2DI es un modelo numérico en diferencias finitas que resuelve la ecuación de Richard para flujo y la ecuación de advección-dispersión para el transporte de solutos.

Posee unas utilidades gráficas muy cómodas tanto en el preprocesador como en el postprocesador, facilitando mucho tanto la entrada de datos como la interpretación y animación de los resultados.

Para la entrada de datos es necesario definir:

- El dominio del modelo y el espaciado de malla.
- Las propiedades hidráulicas y de transporte. Las curvas de características pueden definirse a partir de los modelos de van Genuchten, Brook y Corey, Haverkamp *et al.* o entrar como tabla. Los procesos de transporte que considera incluyen advección, dispersión, degradación de primer orden, adsorción y cambio iónico.
- Las condiciones de contorno: zonas de recarga, de potencial constante, superficie de goteo, etc.
- Condiciones iniciales (bien como perfil de equilibrio, perfil de succiones, perfil de humedad).
- Las concentraciones iniciales.

Para el presente ejemplo, se ha considerado que la recarga del nivel de arenas y gravas se produce por todo el contacto con los residuos, con una concentración constante inicial que arbitrariamente se ha considerado 100 mg/l (que puede ser, por ejemplo, el contenido en amonio en el lixiviado). En la figura 4.3 se presentan las condiciones iniciales definidas en la simulación.



**4.3. Condiciones de entrada en la simulación.**

Durante el proceso de cálculo, el programa genera los gráficos de evolución del contaminante a su paso por zona no saturada hasta llegar a la zona saturada en aguas bajas. Estos gráficos pueden verse de manera seguida para diferentes tiempos, creando una animación muy expresiva.

En la figura 4.4 se ha reunido una secuencia para el ejemplo considerado.

Como puede apreciarse, el drenaje del agua retenido en los residuos genera un pulso contaminante hacia zona no saturada. Mientras en el dominio de arenas y arcillas, la pluma es muy extendida,

cuando el transporte se produce en un material de menor permeabilidad, la zona afectada se acorta verticalmente y se ensancha en la horizontal.

Cuando el frente contaminante llega a la franja capilar se comienzan a hacer patentes los efectos de dilución, mucho más netos al entrar en la zona saturada, donde las concentraciones son muy inferiores a las que se estimaban durante el tránsito por la zona no saturada.

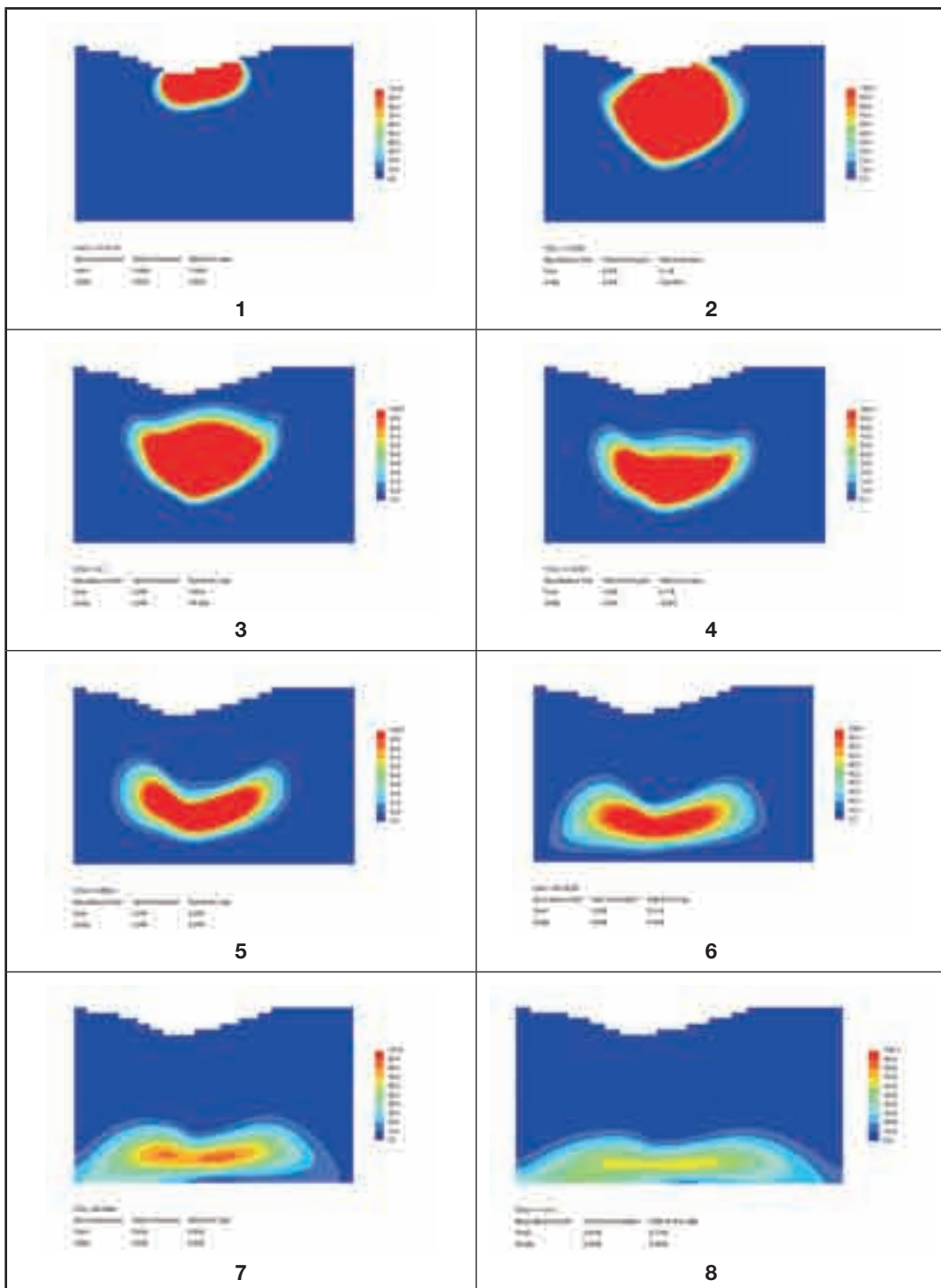


Figura 4.4. Movimiento del contaminante en la zona no saturada hasta llegar al nivel freático.

Al igual que cualquier proceso de modelización, es conveniente realizar un análisis de sensibilidad, para comprobar la repercusión que produce en los resultados la modificación de los diferentes parámetros de entrada.

### **4.3 SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN ZONA SATURADA**

Una vez que se ha simulado de manera adecuada el proceso de migración de la contaminación en el subsuelo no saturado, y que se han podido definir las concentraciones de llegada al acuífero, es momento de analizar el comportamiento de la pluma en zona saturada. Los resultados de VS2DTI se pueden utilizar como condición de contorno en modelos de simulación de zona saturada más complejos.

Para tratar de delinear de forma genérica las dimensiones de la pluma contaminante en movimiento, se puede utilizar un modelo analítico, tipo Doménico, FATE 5 o AT123. En el presente ejemplo, si considerará un medio acuífero homogéneo e isótropo.

Para llegar a una mayor precisión sería conveniente utilizar modelos de más detalle, como MODFLOW-MT3D. No obstante, en muchos casos, donde los recursos económicos y/o de tiempo son muy limitados, se pueden conseguir estimaciones de gran utilidad con la aplicación de modelos analíticos.

En el caso del emplazamiento descrito en el ejemplo, la modelización se puede plantear mediante el modelo DOMENICO, empleando como concentraciones iniciales en el acuífero, las resultantes en el modelo previamente desarrollado en zona no saturada.

Como resultado de la modelización, se llegará a una estimación de la extensión longitudinal y transversal de la pluma.

A partir de dicha estimación, se podrá plantear la red de control más adecuada (figura 4.5.), con puntos en:

- La zona de mayor impacto o zona fuente. Para no perforar los materiales del vertedero.
- Puede ser interesante plantear sondeos inclinados en esta zona.
- El eje de la pluma. Las distancias entre puntos se estimarán a partir de los valores de velocidad de flujo.
- Las zonas periféricas de la pluma, para controlar la anchura del penacho contaminante (es función de la dispersión transversal).



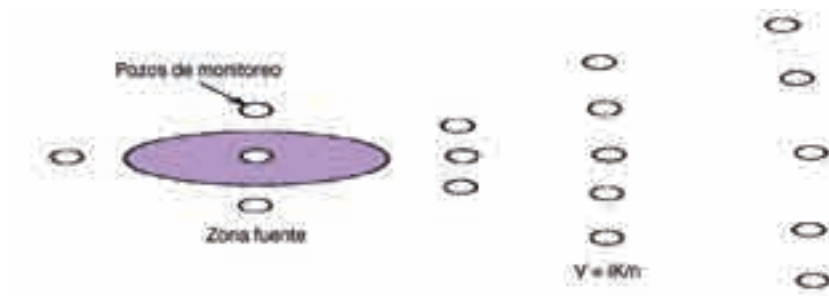


Figura 4.5. Esquema con la disposición de la red de control. Vista areal.

Si la potencia del acuífero libre es suficientemente importante y la recarga se produce uniformemente en toda su extensión, puede ser necesario considerar efectos de estratificación de calidades, y plantear una red de control multinivel como el expresado en la figura 4.6. Aunque el penacho contaminante tenga la misma densidad que el agua, la entrada de agua de recarga produce un efecto neto de profundización.

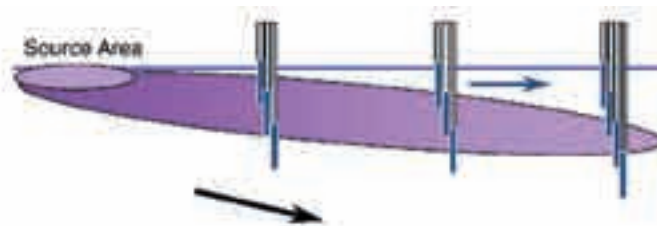


Figura 4.6. Planteamiento de una red de control multinivel.



## **ANEXO III: GLOSARIO**



- **Absorción.** Incorporación de un compuesto a la fase sólida del medio por difusión (movimiento que se produce a escala molecular desde las zonas de mayor a menor concentración).
- **Acuífero.** Es cualquier formación geológica por la que circulan o se almacenan aguas subterráneas.
- **Acuífero confinado.** Es aquel acuífero que está limitado en su parte superior por una unidad de baja conductividad hidráulica y cuyo nivel piezométrico presenta una presión superior a la atmosférica.
- **Acuífero libre.** Es un acuífero en el cual el nivel de saturación se encuentra a la presión atmosférica.
- **Acuífero multicapa.** Acuífero en el que se alternan capas con un comportamiento hidrogeológico muy diferente, debido al contraste de las propiedades hidráulicas de los distintos materiales.
- **Adsorción.** Adhesión de contaminantes a la fase sólida del medio, debido a las fuerzas que se generan a escala molecular (fisisorción) o bien por reacciones químicas (quimisorción).
- **Advección.** Transporte de contaminantes producido por el flujo de las aguas subterráneas.
- **Anisotropía.** Condición en la que una o más de las propiedades hidráulicas de un acuífero varían según la dirección de flujo considerada.
- **Coefficientes de reparto.** Parámetros que describen la distribución de un compuesto entre las distintas fases existentes en el subsuelo (p.e. suelo/agua, aire/agua, octanol/agua). Son adimensionales.
- **Conceptual (modelo).** Representación simplificada del comportamiento de un sistema basada en el análisis cualitativo de las observaciones disponibles.
- **Conductividad hidráulica.** Es el parámetro que describe la capacidad del agua para desplazarse a través de un medio poroso saturado. Se expresa generalmente en m/día y depende tanto de las características del medio como del fluido que lo atraviesa (densidad, viscosidad cinética).
- **Confianza (intervalo).** Intervalo al que se asigna una determinada probabilidad de contener un valor real para un parámetro desconocido.
- **Continua (variable).** Parámetro que varía de forma continua en tiempo y espacio.
- **Determinístico (modelo).** Un modelo en el que todos sus elementos corresponden a valores únicos.
- **Dispersividad.** Propiedad que cuantifica la dispersión física de un soluto o fluido que es transportado en un medio poroso.
- **Discreta (variable).** Variable que se define como una serie de valores distintos, pero que no puede tomar valores intermedios.
- **Fase acuosa (contaminantes en).** Contaminantes disueltos en las aguas subterráneas.
- **Fases no acuosas.** Contaminantes orgánicos líquidos inmiscibles en agua. Pueden ser fases ligeras, de menor densidad que el agua y que forman lenticulas sobrenadantes, o bien fases densas, que tienden a hundirse y acumularse en zona profundas del acuífero.
- **Fracción de carbono orgánico.** Se refiere al porcentaje de carbono existente en el suelo, procedente de restos orgánicos, fundamentalmente restos de plantas. Es un parámetro importante en la retención de contaminantes orgánicos.

- **Fuente difusa.** No tiene un punto de origen específico. Generalmente los contaminantes son arrastrados por el agua de lluvia. Algunos ejemplos de fuentes difusas son la agricultura y la deposición atmosférica.
- **Fuente puntual de contaminación.** Aquella identificable e individual. Un ejemplo son los tanques de combustible enterrados en fábricas.
- **Incertidumbre.** Grado de desconocimiento de una determinada variable.
- **Isotropía.** Condición en la que un medio mantiene las mismas propiedades en todas las direcciones.
- **Matemático (modelo).** Expresiones matemáticas que aproximan las relaciones observadas entre parámetros de entrada (recarga, explotación, etc.) con variables de salida (superficies piezométricas, caudales).
- **Medio fracturado.** Aquel en el que el agua circula a través de fisuras y grietas.
- **Medio poroso.** Medio permeable que contiene intersticios conectados que pueden considerarse un medio continuo en lo que se refiere a sus propiedades hidráulicas.
- **Nivel freático.** Límite entre la zona saturada y no saturada del terreno, en el que el agua está sometida a la presión atmosférica.
- **Nivel piezométrico.** Carga hidráulica (altura de agua) observada en un determinado punto de un acuífero con respecto a un plano horizontal tomado como referencia.
- **Permeabilidad.** Capacidad del medio para transmitir fluidos; la cantidad de un fluido que pasa a través del medio en una determinada dirección.
- **Porosidad efectiva.** Cantidad de poros interconectados a través de los cuales puede circular un fluido. Se expresa como la relación entre el volumen de intersticios interconectados y el volumen total del medio poroso, incluidos los huecos.
- **Potencial de óxido reducción (ORP).** Potencial eléctrico requerido para transferir electrones de un compuesto o elemento (oxidante) a otro (reductor); se utiliza como medida cualitativa del estado de oxidación de las aguas.
- **Probabilístico (modelo).** Aquel en el que las variables de entrada están definidas por distribuciones probabilísticas.
- **Régimen permanente.** Aquel en el que los niveles de agua permanecen constantes en el tiempo.
- **Régimen transitorio.** Aquel en el que los niveles de agua varían con el tiempo.
- **Saturación residual.** Grado de saturación en el cual la permeabilidad efectiva del fluido considerado se reduce a valores despreciables. A efectos prácticos se asume que el fluido es inmóvil.
- **Zona no saturada (vadosa).** Zona del terreno comprendida entre la superficie topográfica y la zona saturada. Los huecos se encuentran parcialmente ocupados por agua, a una presión inferior a la atmosférica, y parcialmente por gases (aire y otro tipo de gases).
- **Zona saturada.** Zona del terreno (suelo o roca) en la que los huecos están ocupados por agua a una presión igual o superior a la atmosférica.

## **ANEXO IV: BIBLIOGRAFÍA**





- Anderson, Mary P. y William W. Woessner, 1992. *Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport*. Academic Press, San Diego, CA. 381 p.
- API, 2001. *Methods for Determining Inputs to Environmental Petroleum Hydrocarbon Mobility and Recovery Models*. API Publication Number 4711.
- API, 2002. *Evaluating Hydrocarbon Removal from Source Zones and its Effect on Dissolved Plume Longevity and Magnitude*. Publication Number 4715.
- API, 2002. *Groundwater Sensitivity Toolkit Users Guide*, Versión 1.0, API Publication 4722, California MTBE Research Partnership.
- API, 2003. *Groundwater Remediation Strategies Tool, Regulatory Analysis & Scientific Affairs Department*, API Publication Number 4730.
- ASTM, 1998. *RBCA Fate and Transport Models: Compendium and Selection Guidance*.
- Batu, Vedat, 1998. *Aquifer hydraulics: a comprehensive guide to hydrogeologic data analysis*. John Wiley & Sons, New York, NY. 727 p.
- Bauer, P. 1998. *Disperse VI.1. Advection/Dispersion Model for MTBE and TBA*. Departamento de protección medioambiental del estado de Nueva Jersey, EEUU. Gorelik, S.M., Freeze, R.A., Donohue, D. y Keely, J.F., 1993. *Groundwater Contamination. Optimal Capture and Containment*. Ed Lewis Publishers.
- Chabernau, R. J., 2003. *Models for Design of Free-Product Recovery Systems for Petroleum Hydrocarbon Liquids*, publicación del American Petroleum Institute (API) número 4729, University of Texas at Austin.
- Domenico, P.A., 1987. *An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species*. Journal of Hydrology, 91, pp 49-58.
- Domenico, Patrick A. y Franklin W. Schwartz, 1990. *Physical and chemical hydrogeology*. Wiley, New York, NY. 506 p.
- Fetter, C. W., 1994. *Applied Hydrogeology*, tercera edición. Ed. Macmillan College Publishing Company.
- Gelhar, L. W., C. Welty y K. R. Rehfeldt, 1992. *A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers*, Water Resources Research, 28(7).
- Konikow, L.F., 2000. *Use of numerical models to simulate groundwater flow and transport*. En "Environmental Isotopes in Hydrological Cycle. Principles and Applications". Volume VI. Modelling". Editor, W.G. Mook. IAEA. Vienna/Paris. <http://www.iaea.org/programmes/ripc/ih/volumes/volume6.htm>
- Konikow, L.F., y J.D. Bredehoeft. 1992. *Groundwater models cannot be validated*, *Advances in Water Resources*, 15: 75-83.
- Konikow, L.F., Goode, D.J., y Hornberger, G.Z., 1996, *A three-dimensional method-of-characteristics solute-transport model (MOC3D)*. US Geological Survey Water-Resources investigations. Report 96-4267, 87 p.
- Konikow, L.F., y Bredehoeft, J.D., 1978. *Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water*. US Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 7, chap. C2, 90 p.
- McMahon, A., Heathcote, J., Carey, M., Erskine, A. y Barker, J., 2001. *Guidance on Assigning Values to Uncertain Parameters in Subsurface Contaminant Fate and Transport Modelling*. National Groundwater & Contaminated Land Centre, UK Environmental Agency, NC/99/38/3.
- McMahon, A., Heathcote, J., Carey, M. y Erskine, J., 2001. *Guidance on the Assessment and Interrogation of Subsurface Analytical Contaminant Fate and Transport Models*. National Groundwater & Contaminated Land Centre, UK Environmental Agency, NC/99/38/1.
- McMahon, A., Heathcote, J., Carey, M. y Erskine, J., 2001 *Guide to Good Practice for the Development of Conceptual Models and the Selection and Application of Mathematical Models of Contaminant Transport Processes in the Subsurface*. National Groundwater & Contaminated Land Centre, UK Environmental Agency, NC/99/38/2.
- Nofziger, D.L. y Wu, J., 2000. *CHEMFLO-2000, Interactive Software for Simulating Water and Chemical Movement in Unsaturated Soils*, Department of Plant and Soil Sciences, Universidad de Oklahoma.

- Nevin, J.P., Newell, C.J., Khan y Gustafson, J.B., 1997. *User's Manual for FATE 5: Groundwater Plume Calibration Tool*, Groundwater Services Inc.
- Pickens, J.F., and G.E. Grisak, 1981. *Scale-Dependent Dispersion in a Stratified Granular Aquifer*. Water Resources Research, Vol. 17, No. 4, p.1191-1211.
- Ravi, V. y Johnson, J.A., 1997 *VLEACH A One-Dimensional Finite Difference Vadose Zone Leaching Mode*, Versión 2.2, US EPA.
- Schaap, M.G., y F.J. Leij, 1998. *Database Related Accuracy and Uncertainty of Pedotransfer Functions*, Soil Science 163:765-779.
- US Geological Survey, 1996. *User's Documentation for Modflow-96, an update to the US Geological Survey Modular Finite-Difference Ground-Water Flow Model*. Open File Report 96-485.
- US EPA, 1991. *MOFAT: A two-dimensional finite element program for multiphase flow and multicomponent transport. Program documentation and user's guide*. EPA/600/2-91/020.
- US EPA, 1996. *BIOSCREEN: Natural Attenuation Decision Support System User's Manual*, Versión 1.3, EPA/600/R-96/087.
- US EPA, 1998. *BIOPLUME III: Natural Attenuation Decision Support System User's Manual*, Versión 1.0, EPA/600/R-98/010.
- US EPA, 1999. *Understanding Variation in Partition Coefficient, Kd, Values. Volume 1: The Kd Model, Methods of Measurement, and Application of Chemical Reaction Codes*.
- US EPA, 1999. *Understanding variation in partition coefficient, Kd, values*. Volúmenes I y II. EPA 402-R-99-004A&B.
- US EPA, 1999. *Three-dimensional NAPL fate and transport model*. EPA/600/R-99/011.
- US EPA, 2000. *BIOCHLOR: Natural Attenuation Decision Support System User's Manual*, Versión 1.0, EPA/600/R-00/008.
- US EPA, 2002. *BIOCHLOR: Natural Attenuation Decision Support System User's Manual Addendum*, Versión 2.2.
- US EPA, 2004. *OPTIMAL WELL LOCATOR (OWL). A Screening Tool for Evaluating Locations of Monitoring Wells*, User's Guide, Versión 1.2, EPA 600/C-04/017.
- US EPA, 2002. *Model-independent parameter estimation*. User's guide for the PEST software. <http://www.epa.gov/ceampubl/tools/pest/PESTMAN.PDF>.
- US Geological Survey, 1999. *VS2DTI – A graphical user interface for the variably saturated flow and transport computer program VS2DT*. Water Resources Investigations Report 9994130.
- US Geological Survey, 1997. *A graphical-user interface for the US Geological Survey's SUTRA code using Argus One (for simulation of variable-density saturated-unsaturated groundwater flow with solute or energy transport)*. Open file report 97-421.
- Weaber, J.W., Chabernau, R.J., Tauxe, J.D., Lien, B.K., y J.B. Provost, 1994. *The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM)*, Volume 1: User's Guide, EPA/600/R-94/039a.
- Xu, M. y Eckstein, Y.J., 1995. *Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and scale*. Groundwater, 33(6): 905-908.
- Yeh, G.T. 1981. *AT123D: Analytical transient one-, two-, and three-dimensional simulation of waste transport in the aquifer system*.
- Zheng, C., 1990. *MT3D. A modular three dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems*.
- Zheng, C. y Bennett, G.D., 1995. *Applied Contaminant Transport Modeling. Theory and Practice*. Van Nostrand Reinhold.