

Implicaciones de los modelos numéricos en el marco del otorgamiento de licencias ambientales para vertimientos en suelos

Sharel Alexa Charry Ocampo¹, Luis Raúl Echeverry Barreto¹, Vanessa Rodríguez Rueda¹, Aníbal José Pérez García¹

Abstract

In this work, we present the implications of implementing a numerical approach to ensure that the decision-system of the Colombian National Authority of Environmental Licensing is based in a robust methodology. In particular, we propose a protocol for simulating dumping associated to the oil industry. This methodology is integrated to the Terms of References used by the national authority so that it includes a more comprehensive characterization of the study area in terms of hydrogeological parameters. Moreover, the re-designed Terms of Reference propose a detailed methodology to estimate aquifers vulnerability using well known methodologies. Based on the vulnerability analysis a modeling approach is proposed. Although it is not the purpose of this paper, the ultimate goal of this investigation is to implement a model in the context of the Casanare state, where oil industry has expanded throughout. In that sense, the proposed methodology represents the starting point towards this objective.

Resumen

En este trabajo se presentan las implicaciones de usar una aproximación metodológica basada en modelos numéricos para fortalecer el sistema de otorgamiento de licencias de la Autoridad Nacional de Licencias Ambientales (ANLA). En particular, se propone un protocolo para simular vertimientos asociados al sector de hidrocarburos. Este protocolo es integrado a los términos de referencia usados por la Autoridad, de tal manera que las actualizaciones propuestas a los términos de referencia incluyan una profunda caracterización del área de estudio en lo relacionado

con parámetros hidrogeológicos. Adicionalmente, estos términos propuestos incluyen una metodología para estimar la vulnerabilidad de los acuíferos asociados a los vertimientos. Esta metodología constituye el soporte de decisiones para establecer si es necesaria la implementación de un modelo numérico, el cual debe seguir el protocolo propuesto. Aunque no es el propósito de este artículo, el objetivo principal de esta investigación es implementar un modelo numérico en el contexto del departamento del Casanare, el cual presenta una intensiva explotación a lo largo de toda su extensión.

Metodología

La metodología para el fortalecimiento del sistema de licenciamiento se propone en cuatro etapas fundamentales: (i) en la primera etapa se hace una revisión de la información disponible y una revisión bibliográfica, (ii) en la segunda etapa se plantea el desarrollo de un protocolo para la simulación de vertimientos de contaminantes en el suelo que sea aplicable para diferentes tipos de vertimientos, en la (iii) se plantea la integración del protocolo de modelación en los términos de referencia del ANLA, incorporando los requerimientos de información determinados por el protocolo, y en la (iv) se propone la implementación del modelo usando el protocolo para casos particulares en el departamento del Casanare. En este artículo se presentan los resultados de las tres primeras etapas.

Revisión de información secundaria y de referencias bibliográficas

La primera etapa inició con el apoyo en la construcción de una base de datos geográfica digi-

tal con la información disponible de tal manera que se acompañaron los procesos de análisis y clasificación de la información existente en el ANLA (Autoridad Nacional de Licencias Ambientales). En particular, la información recopilada incluye puntos de extracción petrolera de proyectos actualmente implementados en el departamento del Casanare. El objetivo de este proceso era conocer la información disponible actualmente de tal manera que se pueda incorporar en los términos de referencia requerimientos adicionales para una implementación más adecuada del modelo numérico.

Seguidamente, se desarrolló una revisión bibliográfica de referencias nacionales e internacionales en lo relacionado con la simulación de vertimientos en suelos. En este punto se construyó un análisis comparativo de modelos numéricos con potencial uso en Colombia en este caso particular de vertimientos del sector hidrocarburos. Los criterios generales que se tuvieron en cuenta en este análisis fueron: (i) aspectos técnicos que incluyen tipo de procesos que simula, sistema de ecuaciones que resuelve, suposiciones necesarias, simplificaciones usadas, disponibilidad de solución numérica en paralelo entre otros, (ii) económicos asociados con costos por tipo de licencia, (iii) legales relacionados con licenciamiento, (iii) de acceso relacionados con la flexibilidad del código, disponibilidad del código fuente, (iv) de operación relacionados con disponibilidad de interface gráfica, conexión con otros software para la generación de gráficos, sistema operativo en el cual puede ser usado, entre otros y (v) mantenimiento que están asociados a soporte post-venta, actualización entre otros.

Basado en estos criterios, considerando los objetivos del análisis y después de una cuidadosa revisión de modelos hidrogeológicos se decidieron evaluar cinco (5) modelos:

1. *ModFlow* es un paquete computacional desarrollado por el Servicio Geológico de los Estados Unidos (USGS) basado en un esquema de diferencias finitas que resuelve las ecuaciones de flujo subterráneo, escrito inicialmente en Fortran.
2. *Feflow* que es un programa desarrollado en el Instituto de Mecánica de la Academia Alemana de las Ciencias por el profesor Jörg Diersch y comercializado por DHI group software desde 2007 cuando compró la licencia.
3. *Hydrogeosphere* es un paquete computacional que es capaz de simular flujo superficial y subsuperficial y sus interacciones. Fue desarrollado en la Universidad de Waterloo (Canadá).
4. *FEHM* es un modelo computacional que ha sido desarrollado en la División de Ciencias Ambientales y de La Tierra en el Laboratorio de Los Alamos (CA, USA). Este paquete es capaz de simular una gran diversidad de procesos incluido transporte de solutos y de calor, así como la migración de contaminantes en la zona vadosa.
5. *OpenGeoSys (OGS)* es un proyecto de código abierto desarrollado inicialmente en la Universidad de Tübingen y actualmente en el Umwelt Forschung Zentrum (UFZ) en Leipzig (Alemania) capaz de simular los procesos de flujo en medio poroso y fracturado.

Teniendo en cuenta los parámetros descritos anteriormente se construyó una tabla comparativa de los modelos presentada en la tabla 1.

Protocolo para la simulación de vertimientos de contaminantes en el suelo

El proceso de modelación inicia con (i) la definición del propósito del modelo seguido por (ii) el desarrollo del modelo conceptual.

Tabla 1. Análisis comparativo de modelos

MODELO COMPUTACIONAL	SIMULA TRANSPORTE	SIMULA ZONA NO SATURADA	CONEXIÓN SUPERFICIE - SUBSUPERFICIE	ESQUEMA NUMÉRICO	VERSIÓN PARALELA	COSTO (US\$)	ES OPEN -SOURCE	TIENE INTERFACE GRÁFICA	DOCUMENTACIÓN
Modflow	NO	NO	SI*	Dif. Finitas	NO	Freeware*	NO	NO**	SI
Feflow	NO	NO	NO	Elem. Finitos	NO	\$4000	NO	SI	SI
HGS	SI	SI	SI	Elem. Finitos	SI	CC	SI	NO**	SI
FEHM	SI	SI	NO	Elem. Finitos	NO	CC	NO	SI	NO
OGS	SI	SI	NO	Elem. Finitos	SI	CC	SI	SI	NO

** Necesita aplicaciones adicionales para hacerlas disponibles

El desarrollo del modelo conceptual incluye la definición de (1) el área de interés y los límites físicos del modelo; (2) las unidades hidroestratigráficas de tal manera que podamos definir la variabilidad espacial de las propiedades hidráulicas de los materiales; (3) el sistema de flujo que nos permite entender el movimiento del agua y determinar áreas de descarga y recarga del acuífero así como también la conexión entre diferentes formaciones permeables, y (4) definir las características físico-químicas del vertimiento y geoquímicas del suelo que nos permite definir las reacciones que deberán ser tenidas en cuenta en la modelación. El desarrollo del modelo conceptual está limitado entonces por la definición dada las unidades estratigráficas del acuífero y por sus respectivas propiedades hidráulicas. En general, el modelo conceptual nos permite definir las variables y los parámetros que son relevantes en los procesos que se requiere simular asociados a cada área de estudio.

A continuación se hace (iii) la selección del sistema de ecuaciones que mejor describen las dinámicas de flujo para el modelo conceptual de cada uno de los problemas que se enfrentan, y la escogencia, desarrollo e implementación de los códigos que serán usados para solucionar este sistema de ecuaciones.

A continuación se hace (iv) la selección del código computacional que es el algoritmo di-

señado para resolver el modelo matemático (el sistema de ecuaciones que describen los procesos físicos) de manera numérica. Comúnmente, se debe hacer una verificación de ambos del código computacional y del sistema de ecuaciones. La verificación del código computacional está asociada a la comparación de los resultados numéricos del modelo con una o varias soluciones analíticas o con otras soluciones numéricas ya comprobadas.

A continuación se debe llevar a cabo (v) el diseño del modelo mediante el cual el modelo conceptual es expresado en una forma adecuada de tal manera que pueda ser introducido al modelo computacional (código computacional). Este paso incluye (1) el diseño de la grilla, (2) la definición de las condiciones de frontera, y (3) la definición de las condiciones iniciales del modelo. Para diseñar la grilla se construye un dominio discretizado, que consiste en un arreglo de nodos comúnmente asociados a elementos finitos o diferencias finitas (Anderson y Woessner, 1992) que constituyen la estructura del modelo numérico.

Para el modelo de flujo se deben definir las condiciones de frontera de acuerdo a lo definido en el modelo conceptual (Dirichlet o Neuman) Para el modelo de transporte, las condiciones de frontera más usadas son las de tipo Dirichlet que definen una concentración del contaminante en la frontera; de tipo



Neumann que describen la entrada de masa de contaminante al sistema en la frontera. Finalmente, se definen las condiciones iniciales de los modelo de flujo y transporte. Idealmente, la condición inicial se debe definir a través de una amplia y completa colección de datos que nos provee con una fotografía de toda la situación al inicio del período que queremos simular. Desafortunadamente, debido a limitaciones económicas y físicas típicamente no se cuenta con esta condición de frontera, por esta razón debe ser generada a través de distintos métodos (Pej. Sudicky et al. 2008; Perez et al. 2011; Perez, 2011).

A continuación se lleva a cabo (vi) la calibración del modelo, el propósito de la calibración del modelo es establecer que el modelo puede reproducir las mediciones de campo, Pej. alturas piezométricas o concentraciones, así como también estimar los valores de los parámetros del modelo basados en mediciones. Estos valores calibrados son obtenidos mediante la modificación sistemática de los valores de los parámetros hasta que los datos de salida medidos y simulados son similares. Para establecer hasta que punto estos valores deben ser similares se usa el χ^2 -test (Cirpka, 2010; Perez et al., 2011) que tiene en cuenta la incer-

tidumbre de las mediciones y los errores epistémicos intrínsecos del modelo (i.e. errores en la definición de las condiciones de frontera o en las condiciones iniciales). El siguiente paso es (vii) la validación del modelo, el propósito de la validación es establecer una mayor confianza en el modelo mediante el uso del set de parámetros calibrados para reproducir un segundo grupo de datos de campo (e.g Abbott and Refsgaard, 1996; Ebel and Loague, 2006; Kirchner, 2006; Klemes, 1986, 1987; Loague and VanderKwaak, 2004). Una vez el modelo ha sido calibrado y validado, se puede obtener información confiable a partir de (ix) simulación de alternativas asociadas a los tipos y/o características de los vertimientos.

Propuestas para el rediseño de los términos de referencia del anla

En esta fase se revisaron los términos de referencia (TDR) para el sector hidrocarburos en lo relacionado con Estudios de Impacto Ambiental. Como primera medida se analizó el documento para identificar los componentes relacionados con los objetivos este estudio, en ese respecto se encontró que los principales aportes se podían hacer en varios capítulos, siendo de particular importancia para este estudio los apartes que se recomienda adicionar

al capítulo 4. Demanda, uso, aprovechamiento y/o afectación de recursos naturales en la sección 4.3 Vertimientos. Dichos apartes se presentan a continuación:

1. Realizar la caracterización fisicoquímica del área de disposición (textura, capacidad de intercambio catiónico, pH, Relación de adsorción de sodio (RAS), porcentaje de sodio intercambiable, Contenido de humedad), para la disposición de aguas industriales se deberá adicionalmente evaluar grasas y aceites, hidrocarburos totales y metales (los metales a evaluar dependerán de la composición fisicoquímica del vertimiento, para el caso de hidrocarburos, se deberá evaluar arsénico, bario).
2. Suministrar una caracterización físico-química típica de referencia del agua que se pretende verter.
3. Definir la geometría de las unidades hidrogeológicas que intervendrá el vertimiento a través de sondeos sísmicos o geoelectrónicos
4. Espesor de las capas confinantes
5. Identificar las zonas de recarga y descarga del acuífero del área de influencia.
6. Definir parámetros hidráulicos de las unidades hidrogeológicas a través de pruebas de bombeo. Se deben definir: transmisividad y/o conductividad hidráulica, nivel dinámico y nivel estático, prueba de infiltración y balance hídrico del suelo coeficiente de almacenamiento.
7. Estimación de la variación del nivel freático
8. Espesor de las capas confinantes.
9. Levantar información piezométrica que permita definir las principales direcciones de flujo en el acuífero asociado. Y las aguas subterráneas del área de influencia.
10. Identificar el tipo de acuífero.
11. Ubicación geoespacial de la zona de estudio y el punto de referencia donde se realizan las pruebas
12. Análisis de las características físico-químicas de las aguas subterráneas asociadas al área de influencia recolectadas a través de una campaña de monitoreo.
13. Identificar las zonas de recarga y descarga del acuífero del área de influencia.
14. Desarrollar un modelo conceptual hidrogeológico que permita integrar toda la información disponible. Dicho modelo conceptual debe incluir:
 - Un mapa hidrogeológico georeferenciado de acuerdo a los lineamientos del ANLA que incluya un inventario de pozos, aljibes, jagüeyes, así como la vectorización de cuerpos de agua superficial.
 - Un mapa de isolíneas de niveles piezométricos que describa las direcciones de flujo principales en el área de influencia del vertimiento
 - Se deben definir las fronteras del modelo. El modelo debe incluir las estructuras que intervendrá el vertimiento.
 - Se deben identificar las conexiones del acuífero con cuerpos de agua superficiales y otros subsuperficiales.
 - En el caso de rocas fracturadas es indispensable determinar la conductividad real del sistema roca-fracturas
 - Teniendo el modelo conceptual se debe elaborar un mapa de vulnerabilidad intrínseca de los acuíferos a la contaminación usando los métodos GOD y DRASTIC.

En caso de encontrar áreas con moderada o alta vulnerabilidad usando cualquiera de los dos métodos, es necesario construir un modelo numérico que permita calcular el movimiento derivado de los procesos de construcción, operación y explotación asociadas a la actividad petrolera, que debe tener como punto de partida el modelo conceptual y debe seguir el protocolo de modelación. Adicionalmente se debe garantizar que:

- El modelo computacional usado debe adaptarse a los requerimientos conceptuales del caso particular estudiado (P.ej. Si existe un acuífero en roca fracturada se debe usar un modelo que sea capaz de considerar flujo preferencial en fracturas (modelos de doble porosidad).
- En caso que exista conexión con cuerpos de agua superficiales el modelo debe ser capaz de simular estas conexiones.
- En caso que la zona no saturada tenga un espesor relevante (> 1 m), sobre todo para la ocurrencia de reacciones químicas y biológicas, el modelo debe ser capaz de simular el flujo y transporte de contaminantes en esta zona.
- El modelo numérico debe ser usado para desarrollar un análisis de vulnerabilidad más profundo. La vulnerabilidad en este caso no debe ser evaluada usando indicadores categorizados (subjetivos) sino parámetros físicos medibles que son variables de salida del modelo (P.ej. concentraciones vs. concentraciones admisibles).
- El modelo de flujo debe ser calibrado y validado utilizando al menos tres piezómetros de control con al menos 8 mediciones de nivel piezométrica en un lapso de 3 meses. Los piezómetros deben estar localizados en la dirección principal de flujo.
- Se deben realizar simulaciones de los vertimientos teniendo en cuenta consideraciones de incertidumbre y diferentes metodologías/tipos de vertimiento al suelo.

La habilidad del modelo para la calibración y validación se debe evaluar usando metodologías tradicionales tales como por ejemplo: RMSE y el χ^2 -test

Bibliografía

Anderson, M., Woessner, W., 1992. Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press.

Jones, J., Sudicky, E., McLaren, R., 2008. Application of a fully-integrated surface-subsurface flow model at the watershed-scale: a case study. *Water Resources Research* 44 (3), W03407.

Kolditz, O., Delfs, J., Burger, C., Beinhorn, M., Park, C., 2008. Numerical analysis of coupled hydrosystems based on an object-oriented compartment approach. *Journal of Hydroinformatics* 10 (3), 227–244. Kolditz, O., Du, Y., Burger, C., Delfs, J., Kuntz, D., Beinhorn, M., Hess, M., Wang, W.,

Li, Q., Unger, A., Sudicky, E., Kassenaar, D., Wexler, E., Shikaze, S., 2008. Simulating the multi-seasonal response of a large-scale watershed with a 3D physically-based hydrologic model. *Journal of Hydrology*.

Maier, U., DeBiase, C., Baeder-Bederski, O., Bayer, P., 2009. Calibration of hydraulic parameters for large-scale vertical flow constructed wetlands. *Journal of Hydrology* 369 (3–4), 260–273.

A.J Pérez, R. Abrahao, J. Causapé, O.A Cirpka, and C.M Bürger. Implications of diffusive wave cascading plane simulations for the study of surface water – groundwater interaction with a 3-d fully-integrated catchment model. In: XVIII International Conference on Water Resources. 2010

A.J Pérez, R. Abrahao, J. Causapé, O.A Cirpka, and C.M Bürger. Simulating the transition of a semi-arid rainfed catchment towards irrigation agriculture. *Journal of Hydrology*, 409:663–681, 2011.

Smerdon, B., Mendoza, C., Devito, K., 2007. Simulations of fully coupled lake-groundwater exchange in a subhumid climate with an integrated hydrologic model. *Water Resources Research* 43 (1), W01416.