

Proyecto Procesamiento de Hidrógeno para Energías Sostenibles IQ3843

Simulación de flujo de agua en suelos usando el modelo de Van Genuchten-Mualem

Autor

Vicente Ignacio Casas Almonacid

Introducción

El Almacenamiento de Energía Térmica Subterránea (UTES, por sus siglas en inglés) representa una tecnología emergente y sostenible en el ámbito de la gestión energética, especialmente relevante en la búsqueda de soluciones alternativas ante el aumento de la demanda energética y la necesidad de reducir el impacto ambiental asociado a fuentes de energía convencionales (Charbi et al., 2018). Este sistema se basa en la capacidad del subsuelo para almacenar calor, permitiendo su posterior uso en calefacción y refrigeración, lo cual contribuye a la eficiencia energética y a la mitigación de gases de efecto invernadero al reducir la dependencia de combustibles fósiles. En países como Chile, donde las políticas energéticas enfatizan la transición hacia una matriz más limpia y sostenible, el UTES podría desempeñar un papel clave en la implementación de estas estrategias para el año 2050 (Ministerio de Energía de Chile, 2015).

Actualmente, en el ámbito internacional, el desarrollo de UTES ha avanzado desde la etapa de prototipo hacia aplicaciones industriales en regiones de alta demanda térmica. Suecia, por ejemplo, ha implementado sistemas de almacenamiento de energía en acuíferos para abastecer de calefacción a diversas comunidades, demostrando el potencial de esta tecnología en climas fríos (Doulati Ardegeni et al., 2014). Por otro lado, estudios recientes destacan el aprovechamiento de pozos de petróleo abandonados como una solución económica para la extracción de energía geotérmica, lo que reduce significativamente los costos de desarrollo y contribuye a la sostenibilidad del sistema energético al utilizar infraestructura existente (Charbi et al., 2018).

En Chile, aunque el UTES se encuentra en etapas iniciales de desarrollo, el país presenta condiciones geológicas y climáticas favorables, especialmente en la zona norte, donde la alta radiación solar podría potenciar sistemas de almacenamiento térmico subterráneo. Según la política Energía 2050, se proyecta un incremento en la participación de energías renovables en la matriz energética chilena, lo que abre oportunidades para la integración de tecnologías como UTES en proyectos de gran escala para usos industriales y residenciales (Ministerio de Energía de Chile, 2015).

Conexión entre DAM y UTES en el Contexto de la Sostenibilidad Energética

El almacenamiento de energía térmica subterránea (UTES) y la mitigación del drenaje ácido de mina (DAM) comparten principios fundamentales en cuanto al flujo de fluidos y transporte reactivo en medios porosos. Aunque parecen problemas distintos, ambos están vinculados a la sostenibilidad energética y ambiental:

- Reducción de DAM y sostenibilidad energética:**
 - El control del DAM mejora la calidad del agua subterránea, preservando este recurso vital en regiones donde el agua es escasa, como en zonas mineras de Chile. Esto es fundamental para apoyar proyectos de almacenamiento de energía térmica subterránea, ya que UTES requiere acuíferos limpios para funcionar eficientemente.
 - La sostenibilidad de UTES depende de la estabilidad química y térmica del subsuelo. Si no se controla el DAM, los contaminantes como el hierro y el sulfato pueden interferir en los intercambios térmicos, limitando la capacidad de almacenamiento de energía.
- Similitudes en los modelos matemáticos:**
 - Ambos problemas se modelan con una ecuación de conservación del momentum para describir el flujo del fluido en el medio poroso. En el caso del DAM, se modela el transporte de contaminantes; en UTES, se modela la transferencia de calor.
 - La ecuación base, como la ecuación de Richards, sigue siendo válida para ambos sistemas, aunque las ecuaciones secundarias cambian.

Cambios en el Modelo para UTES

Si adaptamos el modelo matemático utilizado para DAM a UTES, los principales cambios serían:

- Conservación del Momentum (sin cambios):** La ecuación de conservación del flujo (ecuación de Richards) sigue describiendo el movimiento del fluido a través del medio poroso, ajustándose a las propiedades hidráulicas del suelo.
- Conservación de Energía:** En lugar de una ecuación de transporte de especies químicas, UTES utiliza una ecuación de transferencia de calor para modelar cómo la energía térmica se distribuye en el subsuelo:
$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) - \rho \cdot c_p \cdot v \cdot \nabla T$$
donde:
 - T : Temperatura ($^{\circ}C$ o K).
 - ρ : Densidad del fluido ($\frac{kg}{m^3}$).
 - c_p : Capacidad calorífica específica ($\frac{J}{kg \cdot K}$).
 - k : Conductividad térmica ($\frac{W}{m \cdot K}$).
 - v : Velocidad del flujo ($\frac{m}{s}$).
- Condiciones Térmicas:** En UTES, se debe modelar la interacción entre la energía térmica y el medio poroso, incluyendo efectos como conductividad térmica variable con la saturación del fluido.
- Interacciones Químicas (secundarias):** Aunque no es el enfoque principal de UTES, la calidad del fluido (afectada por contaminantes como DAM) puede influir en la eficiencia del intercambio térmico.

Importancia del Modelado Numérico

La relevancia de esta tecnología y su integración en la matriz energética requieren de una comprensión detallada de los procesos de flujo y transferencia de calor en medios porosos, lo cual es posible mediante el modelado numérico de ecuaciones como la de Richards. Este enfoque permite simular el comportamiento del subsuelo y optimizar el diseño de sistemas de UTES en función de variables como la conductividad hidráulica y la saturación del suelo (Doulati Ardegeni et al., 2014).

Principio de Operación de la Unidad de Proceso

La unidad de proceso en cuestión simula el comportamiento del flujo de agua y transporte de contaminantes en medios no saturados, como ocurre en los sistemas de drenaje ácido de minas. Este modelo aborda la simulación del flujo de agua en materiales de desecho minero, incorporando el flujo de agua, transporte advectivo-dispersivo y reacciones químicas.

1. Ecuación de Richards para el Flujo en Medios No Saturados

El flujo de agua en medios parcialmente saturados está gobernado por la ecuación de Richards:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} = \nabla \cdot (K(h) \nabla h) + Q_v$$

- donde:
- θ_w representa la porosidad saturada de agua, (adimensional).
 - t es el tiempo, en (min o s).
 - h es el head de presión, en (cm o m).
 - $K(h)$ es la conductividad hidráulica en función de h en ($\frac{cm}{min}$ o $\frac{m}{s}$).
 - Q_v es un término de fuente o sumidero en ($\frac{cm^3}{cm^2 \cdot min}$).

Esta ecuación se usa para modelar el flujo de agua en sistemas como pilas de desechos de minería, en donde la variabilidad de la saturación afecta directamente la capacidad de transporte de contaminantes y la generación de drenaje ácido de mina (Muniruzzaman et al., 2020).

2. Modelo de Retención de Humedad de van Genuchten-Mualem

Para describir la relación entre el contenido de agua y el head de presión, se utiliza el modelo de van Genuchten-Mualem. Este modelo relaciona la saturación efectiva S_e con h mediante:

$$S_e(h) = (1 + (\alpha|h|)^n)^{-(1+1/n)}$$

Y el contenido de agua θ se define como:

$$\theta(h) = \theta_{wv} + (\theta_{ws} - \theta_{wv}) S_e(h)$$

- donde:
- θ_{wv} y θ_{ws} son el contenido de agua residual y saturado, respectivamente (adimensionales).
 - α es un parámetro de ajuste, en ($\frac{1}{cm}$).
 - n es el head de presión, en (cm o m).
 - n es un parámetro de ajuste, (adimensional).
 - $\theta(h)$ es el contenido volumétrico de agua, (adimensional)
 - $S_e(h)$: Saturación efectiva, (adimensional)

Estos modelos permiten calcular la conductividad hidráulica relativa como:

$$k_r(h) = S_e(h)^l \left(1 - (1 - S_e(h)^{1/n})^2\right)^2$$

donde l es un parámetro de ajuste empírico. Estos modelos son esenciales para la caracterización de los materiales de desecho en pilas de desechos mineros y su capacidad para transmitir agua.

3. Relación entre la conductividad hidráulica relativa y la conductividad hidráulica total

La conductividad hidráulica relativa $k_r(h)$ es una fracción de la conductividad hidráulica total $K(h)$ que depende del nivel de saturación del suelo. La relación es:

$$K(h) = K_s \cdot k_r(h)$$

- donde:
- $K(h)$: Conductividad hidráulica total (unidades: $\frac{cm}{min}$).
 - K_s : Conductividad hidráulica en condiciones saturadas (unidades: $\frac{cm}{min}$).
 - $k_r(h)$: Conductividad hidráulica relativa (adimensional).

Esto significa que la conductividad hidráulica total es modulada por $k_r(h)$, que varía entre 0 y 1 dependiendo del contenido de agua en el suelo. En suelos completamente saturados $S_e = 1$, $k_r(h) = 1$ y la conductividad hidráulica total es igual a K_s .

4. Transporte Multicomponente y Reactivo

Además del flujo de agua, en sistemas de drenaje ácido de minas es fundamental modelar el transporte y reacción de múltiples especies químicas. Para ello, se integra la ecuación de transporte reactivo, que considera el movimiento advectivo y dispersivo de las especies químicas, así como las reacciones en fase acuosa y sólida:

$$\frac{\partial \theta_w c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta_w J_i) = R_i$$

- donde:
- c_i es la concentración de la especie i .
 - J_i representa el flujo de la especie i , que incluye términos de advección y dispersión.
 - R_i es el término de reacción de la especie i .

La dispersión está gobernada por la ley de Fick, y para el transporte en la fase gaseosa, se utiliza la formulación de Maxwell-Stefan, la cual captura las interacciones entre especies en sistemas multicomponentes y es particularmente útil para modelar el movimiento de gases como el oxígeno y el dióxido de carbono en desechos mineros.

Esquema de Operación

- Flujo de Agua:** La infiltración de agua ocurre en la pila de desechos, y el modelo predice cómo se distribuye el contenido de agua en función de la saturación y la presión en cada punto de la pila.
- Transporte de Contaminantes:** Los contaminantes se movilizan mediante el flujo de agua y se dispersan a través del medio poroso. La disolución y precipitación de minerales afecta las concentraciones de especies en el agua.
- Reacciones Químicas:** Reacciones de oxidación de sulfuros generan acidez, que puede ser neutralizada o aumentada dependiendo de los minerales presentes, afectando el pH y la calidad del drenaje.

Ejemplo Visual

Un esquema del flujo y transporte reactivo en un sistema de drenaje ácido de mina incluiría capas de material con distinta capacidad de retención de humedad y reactividad química. La infiltración de agua activa el transporte de contaminantes hacia las capas más profundas, y las reacciones químicas entre minerales y contaminantes modifican las condiciones del medio.

Este modelo es útil en aplicaciones ambientales para prever el impacto de sistemas de desechos en el agua subterránea y evaluar la efectividad de posibles estrategias de mitigación del drenaje ácido.

Estos conceptos están basados en modelos similares implementados en software como AMD-PHREEQC y otros modelos de transporte reactivo (Muniruzzaman et al., 2020).

Desarrollo de Modelo Matemático y Simulación del proceso bajo distintas condiciones

1. Supuestos en la ecuación de transporte multicomponente y reactivo

La ecuación de transporte multicomponente y reactivo generalmente se expresa como:

$$\frac{\partial (\theta_w c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta_w \cdot J_i) = R_i$$

Los principales supuestos asociados son:

- Saturación del medio $\theta_w = 1$:** Se asume que el medio está completamente saturado, lo que implica que todo el espacio poroso está ocupado por agua, eliminando efectos asociados a fases gaseosas.
 - Crítica de reacción lineal $R_i = k \cdot c_i$:** Se considera que las reacciones químicas son de primer orden, donde la velocidad de reacción R_i es directamente proporcional a la concentración de la especie c_i con una constante cinética k .
- ### 2. Expansión de J_i
- El flujo J_i representa el transporte de la especie i y puede descomponerse en los siguientes componentes:

$$J_i = -D_{eff} \nabla c_i + v c_i$$

- donde:
- D_{eff} : Coeficiente de dispersión efectiva (unidades: ($\frac{m^2}{s}$)).
 - ∇c_i : Gradiente de concentración de la especie i (unidades: ($\frac{mol}{m^3}$)).
 - v : Velocidad de advección del flujo (unidades: ($\frac{m}{s}$)).
 - c_i : Concentración de la especie i (unidades: ($\frac{mol}{m^3}$)).

En esta formulación:

- El término $-D_{eff} \nabla c_i$ representa el transporte difusivo, que depende del gradiente de concentración.
- El término $v \cdot c_i$ representa el transporte advectivo, que depende de la velocidad del flujo y la concentración de la especie.

Definición de parámetros

Primero, presentaremos la configuración de los parámetros de modelo, que define el dominio y las propiedades del suelo. Estos parámetros se basan en la ecuación de Richards para el flujo de agua en medios no saturados y el modelo de retención de humedad de van Genuchten

Actualizaremos los vectores iniciales para el contenido de agua (θ) y el head de presión (h), y preparamos matrices para almacenar los resultados en cada paso de tiempo.

- ```
In [11]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

Parámetros de simulación
L = 10 # Longitud del dominio en cm
dx = 0.1 # Tamaño de la malla en cm
Nx = int(L / dx) # Número de nodos
dt = 0.05 # Paso de tiempo en min
t_total = 110 # Tiempo total de simulación en min
theta_w0 = 0.5 # Contenido de agua saturado
theta_wR = 0.1 # Contenido de agua residual
Ks = 0.0218 # Conductividad hidráulica en cgs/cm
alpha = 0.059 # Parámetro de van Genuchten en 1/cm
n = 1.2 # Parámetro de van Genuchten
l = 0.5 # Parámetro de van Genuchten
```
- Aquí, definimos:
- $L$  como la longitud del dominio, que representa la profundidad del suelo.
  - $dx$  como el tamaño del paso en la malla espacial.
  - $N_x$  es el número de nodos en el dominio, calculado como  $N_x = L/dx$ .
  - $dt$  es el paso de tiempo, que define cómo avanzamos en la simulación temporal.
  - $t_{total}$  indica la duración total de la simulación en minutos.
  - $\theta_{w0}$  y  $\theta_{wR}$  representan el contenido de agua en condiciones de saturación y residual, respectivamente.
  - $K_s$ ,  $\alpha$ ,  $n$ , y  $l$  son parámetros específicos del modelo de van Genuchten para representar la relación entre el contenido de agua y el head de presión.

### Inicialización de condiciones iniciales

- ```
In [11]: # Configuramos los vectores iniciales para el contenido de agua (theta) y el head de presión (h), y preparamos matrices para almacenar los resultados en cada paso de tiempo.
def Se(h):
    theta = theta_wR + np.ones(Nx) # Vector de contenido de agua inicial
    h = -1000 # Head inicial en cm
    time_steps = int(t_total / dt) # Número de pasos de tiempo
    z = np.linspace(0, L, Nx) # Vector de profundidad

    # theta: Iniciamos con un contenido de agua uniforme igual a theta_w0 en cada nodo.
    # h: Iniciamos el head de presión en -1000 cm, indicando un suelo inicialmente no saturado.
    # time_steps calcula el número de pasos de tiempo en función de la duración total de la simulación.
    # z es un vector que representa las profundidades en el dominio.
```

Funciones del Modelo de van Genuchten-Mualem

Estas funciones representan el modelo de retención de humedad y la conductividad hidráulica relativa en función del head de presión h . La saturación efectiva S_e y la relación $\theta(h)$ determinan el contenido de agua en cada nodo de acuerdo con el modelo de van Genuchten.

- ```
In [14]: # Funciones para el modelo de van Genuchten-Mualem
def Se(h):
 return np.maximum(0, 1 + (alpha * np.abs(h)**n)**(1 - 1/n))

def theta_h(h):
 return theta_wR + (theta_w0 - theta_wR) * Se(h)

def Kr(h):
 return Se(h)**l * (1 - (1 - Se(h)**(1/n))**2)**2
```
- Se(h):** Calcula la saturación efectiva del suelo en función del head de presión  $h$ .
  - theta\_h(h):** Calcula el contenido de agua en función de  $h$ , utilizando la relación de saturación efectiva  $S_e$ .
  - Kr(h):** Calcula la conductividad hidráulica relativa, que es necesaria para definir el flujo de agua entre nodos.

### Creación de matrices para almacenamiento de resultados

En esta sección, preparamos matrices para registrar el head de presión y el contenido de agua en cada paso temporal. Esto permitirá graficar la evolución del sistema a lo largo del tiempo.

- ```
In [17]: # Matrices para almacenar resultados
h_history = np.zeros(Nx, time_steps)
theta_history = np.zeros(Nx, time_steps)
```
- h_history y theta_history:** Estas matrices almacenan los valores del head de presión y del contenido de agua en cada nodo para cada paso de tiempo.
- El bucle de tiempo es el núcleo de la simulación, donde aplicamos el modelo de Richards para cada nodo y actualizamos los valores de h y θ en cada paso de tiempo.

Dentro del Bucle Temporal:

- h_old:** Almacena el head de presión de la iteración anterior.
- theta:** Se actualiza en cada paso de tiempo, calculando el contenido de agua en función del nuevo head (h).

Construcción del Sistema Lineal

Dentro del bucle, creamos la matriz A y el vector b , que representan el sistema lineal. Este sistema permite calcular el nuevo head de presión h en cada nodo para el siguiente paso de tiempo, basándonos en la ecuación de Richards.

Explicación de los Términos en el Sistema Lineal:

- Matriz A :** Representa las relaciones entre los nodos adyacentes. Los términos de la matriz A se derivan de la discretización de la ecuación de Richards y consideran la conductividad hidráulica en cada nodo.
- $A[i, i-1]$ y $A[i, i+1]$:** representan los flujos entre el nodo i y sus nodos adyacentes.
- $A[i, i]$:** es el término diagonal, que incluye la capacidad de almacenamiento de agua en el nodo i y la conductividad de Richards hacia sus vecinos.
- Vector b :** Contiene los términos independientes basados en el contenido de agua del paso anterior. Esto asegura que el cálculo de h se actualice de acuerdo con el contenido de agua y el head de presión previo.

Implementación de las Condiciones de Borde

Las condiciones de borde establecen los valores del head de presión en los extremos del dominio para simular el flujo de agua:

- Borde superior:** Fijamos un head de presión constante en el nodo superior para inducir un flujo hacia abajo, representando infiltración de agua.
- Borde inferior:** Establecemos el head en el borde inferior igual al del nodo anterior, permitiendo la salida de agua y simulando condiciones de drenaje abierto.

- ```
In [20]: # Bucle de tiempo
for t in range(1, time_steps):
 h_old = h.copy() # Guardar el valor anterior de head
 theta = theta_h(h) # Actualizar contenido de agua

 # Guardar valores para gráficos
 h_history[:, t] = h
 theta_history[:, t] = theta

 # Matriz y vector para el sistema lineal
 A = np.zeros(Nx, Nx)
 b = np.zeros(Nx)

 # Ensamblar matriz A y vector b
 for i in range(1, Nx - 1):
 Kr_up = Kr(h[i - 1])
 Kr_down = Kr(h[i + 1])
 K_up = Kr_up * dx
 K_down = Kr_down * dx

 A[i, i - 1] = -K_up / dx**2
 A[i, i + 1] = -K_down / dx**2
 A[i, i] = 1 + K_down / dx**2
 b[i] = theta[i] / dt + h_old[i]

 # Condiciones de frontera
 b[0] = 1 # Head fijo en la frontera superior para generar infiltración
 b[Nx - 1] = h[Nx - 2] # Head dinámico en la frontera inferior

 A[Nx - 1, Nx - 1] = 1
 b[Nx - 1] = h[Nx - 2] # Head dinámico en la frontera inferior

 # Resolver el sistema lineal
 b = np.linalg.solve(A, b)

 # Actualizar theta basado en el nuevo h
 theta = theta_h(b)
```

### Resolución del Sistema Lineal y Actualización de $\theta$

Una vez ensamblados  $A$  y  $b$ , resolvemos el sistema lineal para obtener el nuevo head de presión  $h$  en cada nodo, y posteriormente actualizamos el contenido de agua  $\theta$  en función del nuevo  $h$ :

- Resolución del sistema:** Utilizamos `np.linalg.solve(A, b)` para resolver el sistema  $A \cdot h = b$ , obteniendo los valores de  $h$  para el siguiente paso de tiempo.
- Actualización de  $\theta$ :** Con el nuevo head de presión  $h$ , calculamos el contenido de agua en cada nodo mediante la función `theta_h(h)`.

### Método numérico utilizado

Para resolver el sistema de ecuaciones, se utilizó el método de diferencias finitas Forward-Time Centered-Space (FTCS), aplicable a problemas parabólicos.

La ecuación de conservación del flujo es:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial h}{\partial z} \right)$$

El método FTCS discretiza los términos como sigue:

- En el tiempo:** Se utilizan diferencias hacia adelante  $\frac{\partial \theta}{\partial t} \approx \frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t}$ .
  - En el espacio:** Se aplican diferencias centradas  $\frac{\partial}{\partial z} \approx \frac{\theta_{i+1}^n - \theta_{i-1}^n}{2 \Delta z}$ .
- Este esquema es adecuado siempre que:
- El término de dispersión (representado por  $D_{eff}$ ) sea comparable o mayor que el término de advección. Esto asegura que las oscilaciones numéricas sean controladas.
  - Se elijan pasos de tiempo ( $\Delta t$ ) y de espacio ( $\Delta z$ ) que cumplan con criterios de estabilidad.

Sin embargo, si la convección domina sobre la dispersión, el método podrá generar inestabilidades, lo que requeriría un esquema numérico más robusto, como diferencias hacia arriba o métodos implícitos.

### Visualización de los Resultados

Al final de la simulación, generamos gráficos para observar cómo evolucionan el head de presión y el contenido de agua a lo largo del tiempo. Estos gráficos permiten visualizar el comportamiento del flujo de agua en el suelo y cómo las condiciones de saturación cambian con la profundidad y el tiempo.

- ```
In [21]: # Lista de tiempos de iteración en pasos de tiempo, iniciándose a time_steps - 1
time_to_plot = [min(int(10 / dt), time_steps - 1),
                min(int(30 / dt), time_steps - 1),
                min(int(50 / dt), time_steps - 1),
                min(int(70 / dt), time_steps - 1),
                min(int(90 / dt), time_steps - 1),
                min(int(110 / dt), time_steps - 1)]

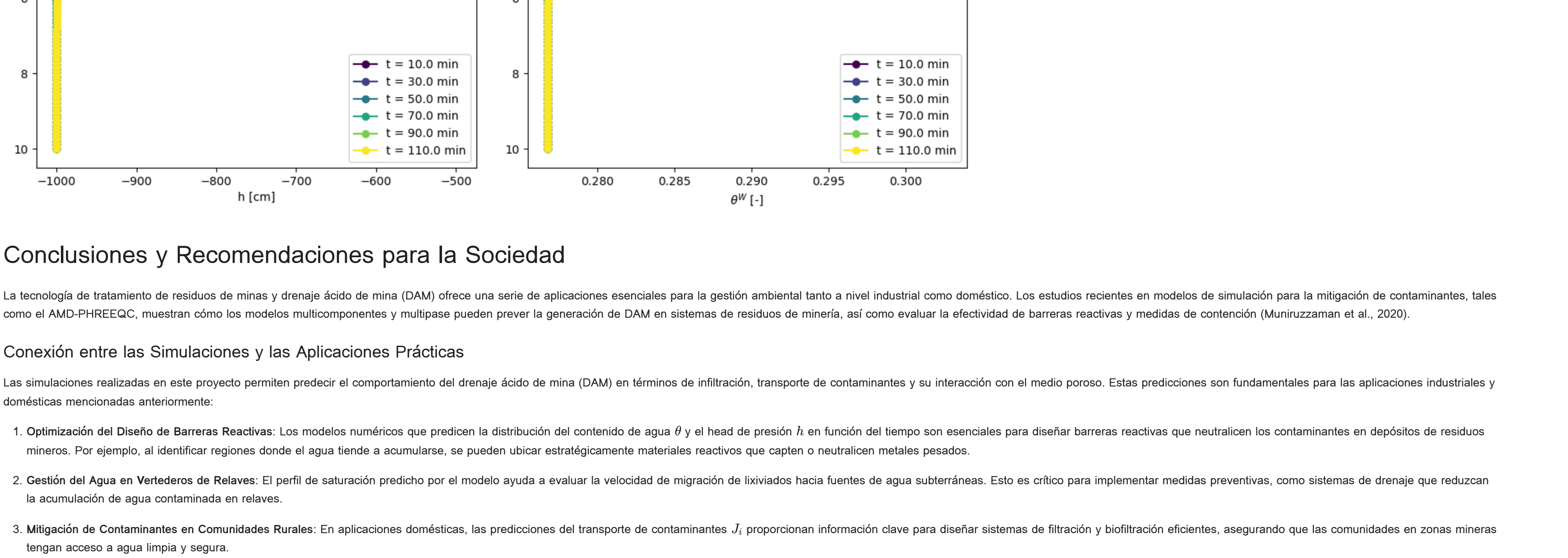
colors = plt.cm.Viridis(np.linspace(0, 1, len(time_to_plot)))

fig, axes = plt.subplots(2, 2, figsize=(12, 6))

# Gráfico de head (h)
axes[0].imshow(h_history)
for k, time_idx in enumerate(times_to_plot):
    axes[0].plot(theta_history[:, time_idx], z, '-', color=colors[k], label=f't = {time_idx * dt:.1f} min')
    axes[0].set_ylabel('h [cm]')
    axes[0].set_title('Pressure Head')
    axes[0].legend()

# Gráfico de contenido de agua (theta)
axes[1].imshow(theta_history)
for k, time_idx in enumerate(times_to_plot):
    axes[1].plot(theta_history[:, time_idx], z, '-', color=colors[k], label=f't = {time_idx * dt:.1f} min')
    axes[1].set_ylabel('theta [cm]')
    axes[1].set_title('Water Content')
    axes[1].legend()

plt.tight_layout()
plt.show()
```



Conclusiones y Recomendaciones para la Sociedad

La tecnología de tratamiento de residuos de minas y drenaje ácido de mina (DAM) ofrece una serie de aplicaciones esenciales para la gestión ambiental tanto a nivel industrial como doméstico. Los estudios recientes en modelos de simulación para la mitigación de contaminantes, tales como el AMD-PHREEQC, muestran cómo los modelos multicomponentes y multipase pueden prever la generación de DAM en sistemas de residuos de minería, así como evaluar la efectividad de barreras reactivas y medidas de contención (Muniruzzaman et al., 2020).

Conexión entre las Simulaciones y las Aplicaciones Prácticas

Las simulaciones realizadas en este proyecto permiten predecir el comportamiento del drenaje ácido de mina (DAM) en términos de infiltración, transporte de contaminantes y su interacción con el medio poroso. Estas predicciones son fundamentales para las aplicaciones industriales y domésticas mencionadas anteriormente.

- Optimización del Diseño de Barreras Reactivas:** Los modelos numéricos que predicen la distribución del contenido de agua y el head de presión h en función del tiempo son esenciales para diseñar barreras reactivas que neutralicen los contaminantes en depósitos de residuos mineros. Por ejemplo, al identificar regiones donde el agua tiende a acumularse, se pueden ubicar estratégicamente materiales reactivos que reaccionen o neutralicen metales pesados.
- Creación del Agua en Vertederos de Residuos:** El perfil de saturación predicho por el modelo ayuda a evaluar la velocidad de migración de lixiviados hacia fuentes de agua subterráneas. Esto es crítico para implementar medidas preventivas, como sistemas de drenaje que reduzcan la acumulación de agua contaminada en rellenos.
- Mitigación de Contaminantes en Comunidades Rurales:** En aplicaciones domésticas, las predicciones del transporte de contaminantes J_i proporcionan información clave para diseñar sistemas de filtración y biofiltración eficientes, asegurando que las comunidades en zonas mineras tengan acceso a agua limpia y segura.

Aplicaciones Industriales

En Chile, donde la minería representa una parte fundamental de la economía, la implementación de tecnologías de mitigación de DAM es particularmente relevante. Esta tecnología podría aplicarse en depósitos de residuos mineros mediante el uso de barreras reactivas y el diseño de verdaderos de rellenos que optimicen la gestión del agua y la reducción de contaminantes. Estos modelos también permiten anticipar la migración de metales pesados y otros elementos tóxicos hacia fuentes de agua subterránea, brindando herramientas predictivas para su gestión.

A nivel global, las tecnologías de modelado de drenaje ácido de mina se utilizan para prever impactos a largo plazo, permitiendo establecer programas de remediación en sitios mineros abandonados, especialmente en regiones con altos niveles de contaminación ambiental.

Aplicaciones Domésticas

Si bien el uso doméstico de esta tecnología es limitado, existen oportunidades para pequeñas aplicaciones de tratamiento de aguas que podrían adaptar algunos de los principios de estos modelos. Por ejemplo, en el diseño de sistemas de biofiltración para hogares o comunidades en áreas mineras. Estos sistemas de filtración, basados en el mismo principio de neutralización de ácidos y captación de metales pesados, pueden implementarse de manera sencilla y económica en sistemas de agua doméstica, especialmente en zonas rurales afectadas por actividades extractivas.

Barreras Tecnológicas, Económicas y Sociales

El avance en la Implementación de estas tecnologías enfrenta varios desafíos. Desde un punto de vista tecnológico, la modelización precisa de estos sistemas requiere una alta capacidad computacional y conocimientos especializados en geohidrología y química de suelos. Socialmente, uno de los obstáculos principales es la falta de capacitación y educación sobre los efectos del drenaje ácido en la salud humana y el medio ambiente. "Las barreras tecnológicas y la falta de educación y conciencia ambiental entre las comunidades mineras" representan obstáculos importantes para implementar esta tecnología a nivel masivo (Muniruzzaman et al., 2020). Por ello, es fundamental aumentar los esfuerzos de educación ambiental en las comunidades mineras y formar alianzas entre el gobierno, la industria y las organizaciones civiles para promover el uso de tecnologías de mitigación de DAM.

Recomendaciones para la Implementación

Para fomentar una adopción efectiva de esta tecnología en Chile e internacionalmente, se sugieren las siguientes recomendaciones:

- Fortalecimiento de la regulación:** Los resultados de las simulaciones pueden integrarse como parte de los estudios de impacto ambiental exigidos por los organismos reguladores. Esto asegurará que los proyectos mineros adopten medidas de contención y remediación basadas en datos sólidos y científicamente confiables.
- Subsidios y financiamiento:** La implementación de tecnologías derivadas de modelos numéricos puede optimizar los costos de mitigación al identificar las áreas más críticas que requieren intervención, maximizando el impacto de los recursos invertidos.
- Educación y capacitación:** El uso de modelos computacionales como herramientas educativas puede empoderar a las comunidades y trabajadores mineros, brindándoles una comprensión clara de cómo los contaminantes se transportan y cómo mitigarlos efectivamente.
- Investigación y desarrollo:** Promover la investigación en tecnologías emergentes de tratamiento de DAM a nivel universitario e industrial, para mejorar la eficiencia y reducir los costos asociados con estas tecnologías.

Conclusión

Los resultados de este proyecto no solo contribuyen a una mejor comprensión del flujo y transporte reactivo en medios porosos, sino que también tienen aplicaciones prácticas en la mitigación de los impactos del drenaje ácido de mina. Las herramientas numéricas, como las implementadas en este trabajo, proporcionan un valioso apoyo para la toma de decisiones en la gestión de recursos hídricos y la remediación ambiental. Su implementación efectiva puede transformar la manera en que se enfrentan los desafíos ambientales asociados a la minería, promoviendo una minería más sostenible y responsable.

Bibliografía

- Charbi, S., Morhezaazeh, E., Hashemi Aghvahi Bodi, S. J., & Vafari, A. (2018). Feasibility study of geothermal heat extraction from abandoned oil wells using a U-tube heat exchanger. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.04.003>
- Doulati Ardegeni, F., Jannasr, M. (2015). Política Energética de Chile. Santiago de Chile: Ministerio de Energía. https://www.energia.gob.cl/sites/default/files/energia_2050_-_politica_energetica_de_chile.pdf
- Muniruzzaman, T., Jannasr, M., Shafiei, S. Z., & Shahhosseini, M. (2014). A Numerical Multi-Component Reactive Model for Pyrite Oxidation and Pollutant Transportation in a Pyritic, Carbonate-Rich Coal Waste Pile in Northern Iran. *Mine Water and the Environment*, 33(2), 121-132.