

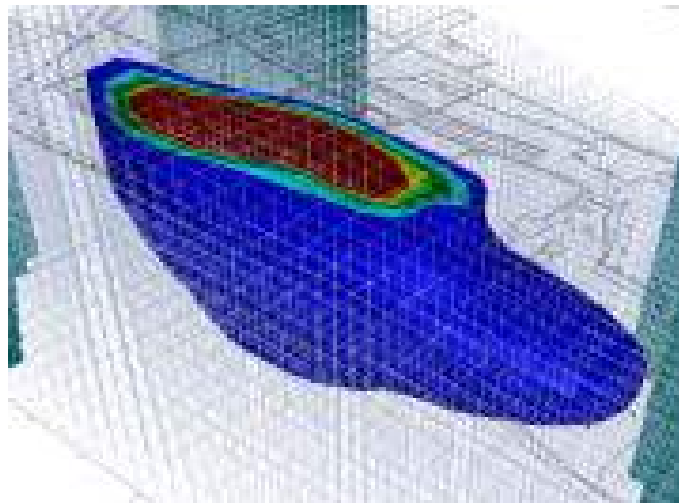


MODELIZACIÓN HIDROGEOLÓGICA

VI CURSO DE GEOTECNIA

*ILUSTRE COLEGIO OFICIAL DE GEÓLOGOS
Delegación de Aragón*

INTRODUCCIÓN A LA MODELIZACIÓN HIDROGEOLÓGICA



Fernando Herrera Rodríguez
Geólogo – Master en Ingeniería Geológica
Director Técnico
GEOTECNIA 2000

VI CURSO DE GEOTECNIA

Modelización Hidrogeológica

© FERNANDO HERRERA RODRÍGUEZ
C/ Ponzano, 69 28003 • Madrid
Teléfono (91) 441 10 63 • Fax (91) 399 36 46
f-herrera@geotecnia2000.com
www.geotecnia2000.com

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	1
1.-MODELIZACIÓN DE LAS AGUAS SUBTERRÁNEAS.....	1
1.1.-LEY DE DARCY	2
1.2.-MODELOS NUMÉRICOS.....	5
1.3.-CONSTRUCCIÓN DEL MODELO HIDROGEOLÓGICO	6
1.3.1.-Definición de objetivos.....	8
1.3.2.-Recopilación de datos.....	8
1.3.3.-Identificación de bordes del modelo.....	10
1.3.4.-Desarrollo del modelo conceptual	10
1.3.5.-Diseño de la Malla del Modelo	11
1.3.6.-Asignación de propiedades del acuífero/contaminante	12
1.3.7.-Calibración y Validación del Modelo.....	12
1.3.8.-Análisis de sensibilidad	14
1.3.9.-Predicciones del modelo.....	14
CAPÍTULO 2	15
2.-FUNDAMENTOS MODELIZACIÓN TRANSPORTE DE CONTAMINANTES.....	15
2.1.-ECUACIÓN GENERAL DE TRANSPORTE DE MASA	15
2.1.1.-Advección.....	17
2.1.2.-Dispersión.....	18
2.1.3.-Fuentes y sumideros	20
2.1.4.-Reacciones Químicas.....	21
2.1.4.1.-Proceso de sorción	22
2.1.4.1.1.-Modelo Lineal	23
2.1.4.1.2.-Modelo no lineal de Freundlich.....	24
2.1.4.1.3.-Modelo de Langmuir	25
2.1.4.2.-Modelos de sorción cinética (No equilibrio).....	27
2.1.4.2.1.-Modelo irreversible	28
2.1.4.2.2.-Modelo reversible lineal	28
2.1.4.2.3.-Modelo reversible no lineal.....	28
2.1.4.2.4.-Modelo reversible bilineal.....	28
2.1.4.2.5.-Modelo reversible de difusión controlada	29
2.1.4.3.-Biodregradación	30
2.1.4.3.1.-Primer orden de degradación.....	31
2.1.4.3.2.-Reacción instantánea.....	32
2.1.4.3.3.-Modelo cinético de Monod.....	33

CAPÍTULO 3	46
3.-MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN GENERAL DEL TRANSPORTE.....	46
3.1.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS (MOC)	46
3.2.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS MODIFICADO (MMOC).....	47
3.3.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS HÍBRIDO (HMOC).....	48
3.4.-MÉTODO DE ALGORITMO ULTIMATE (TVD).....	48
3.5.-MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS.....	48
3.5.1.-Método UPSTREAM	48
3.5.2.-Método CENTRAL	48
 CAPÍTULO 4	 49
4.-MÓDULOS DE PROGRAMAS EXISTENTES EN MODFLOW	49
4.1.-MÓDULO MT3D	49
4.2.-MÓDULO MT3DMS	50
4.3.-MÓDULO RT3D	50

1.-MODELIZACIÓN DE LAS AGUAS SUBTERRÁNEAS

El movimiento del agua subterránea en 3 dimensiones, a través de un medio poroso se representa por la ecuación diferencial siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$\sum \text{Flujos ENTRANTES} - \sum \text{Flujos SALIENTES} = \Delta \text{ Almacenamiento}$$

donde:

K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} = valores de la conductividad hidráulica a lo largo de los 3 ejes ortogonales del espacio, X, Y y Z. ($L T^{-1}$).

h = carga potenciométrica (L).

Q = flujo por unidad de volumen, representa las fuentes y/o sumideros (T^{-1}).

S_s = almacenamiento específico del medio poroso (L^{-1}).

t = tiempo (T).

Por consiguiente, la ecuación fundamental representa matemáticamente una conclusión lógica:

- La diferencia entre la cantidad de agua que entra y sale por las caras de un cubo poroso ideal (por razones de las diferencias de nivel piezométrico entre este cubo y las zonas del acuífero inmediatas), más las entradas de agua exteriores al sistema, tiene que ser igual a la variación del almacenamiento, es decir, a lo que se llena o vacía dicho cubo.

Es evidente que se expresa de una manera muy simple, pero puede ser útil para dejar claro las ideas.

La ecuación puede resultar de difícil o imposible solución, según sean las condiciones de contorno, y es aplicable a los problemas generales de movimiento del agua en los acuíferos.

Se definen dos tipos de régimen, en función de que exista o no variación en el almacenamiento del medio poroso.

- Régimen Transitorio: en el que tenemos variación con el tiempo.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

- Régimen Permanente: en el que no existe variación con el tiempo, por lo que el segundo término de la ecuación fundamental es cero.

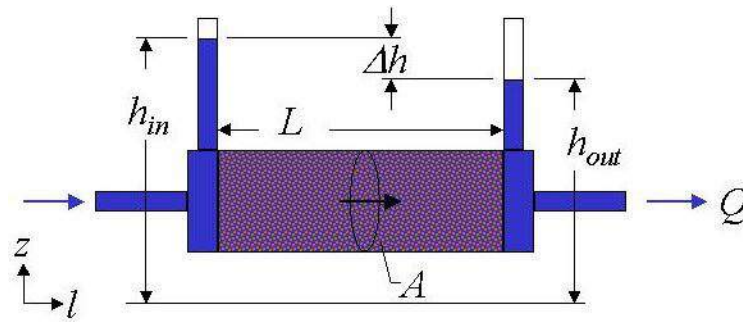
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0$$

1.1.-LEY DE DARCY

El ingeniero francés Henry Darcy, observó que el flujo laminar de un fluido (para densidad y temperatura constante) entre dos puntos de un medio poroso era proporcional al gradiente hidráulico (dh/dl).

La ecuación que representa el Flujo a través de un medio poroso, es conocida como Ley de Darcy (1856) y se expresa:

$$Q = -K \cdot A \cdot \frac{\partial h}{\partial l}$$



donde:

$Q =$ caudal (L^3T^{-1})

$K =$ conductividad hidráulica (LT^{-1})

$A =$ área transversal al flujo (L^2)

$h =$ carga hidráulica (L)

$l =$ distancia entre 2 puntos (L)

El signo negativo (-) es un convencionalismo, para indicar que el flujo es hacia fuera.

La conductividad para un medio, es función de las características del medio y del fluido.

$$K = \frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu}$$

donde:

$k =$ permeabilidad intrínseca del medio poroso (L^2).

$\rho =$ densidad del fluido (ML^{-3}).

$\mu =$ viscosidad dinámica del fluido ($ML^{-1}T^{-1}$)

$g =$ aceleración de la gravedad (LT^{-2})

La permeabilidad intrínseca de un medio poroso depende de la forma y diámetro de los poros del suelo.

Existen numerosas expresiones analíticas para establecer la permeabilidad intrínseca a partir del empaquetado de los granos, de la forma y del tamaño (Fair y Hatch, 1933).

Krumbein (1943) usó el cuadrado del diámetro medio de los granos de un suelo para establecer k .

En la tabla siguiente se muestran valores característicos para la permeabilidad intrínseca (k) y para la conductividad hidráulica (K).

Material	Permeabilidad Intrínseca k (cm²)	Conductividad Hidráulica K (cm/s)
Arcilla	10^{-6} - 10^{-3}	10^{-9} - 10^{-6}
Limos/limos arenosos	10^{-3} - 10^{-1}	10^{-6} - 10^{-4}
Arenas limosas Arenas finas	10^{-2} -1	10^{-5} - 10^{-3}
Arenas graduadas	1- 10^2	10^{-3} - 10^{-1}
Gravas graduadas	10- 10^3	10^{-2} -1

Para conocer la velocidad, debe dividirse el flujo por el área de paso del mismo:

$$v = \frac{Q}{A} = -K \frac{\partial h}{\partial l}$$

Ésta velocidad es conocida como descarga específica o flujo de Darcy. La descarga específica es una velocidad aparente que representa la velocidad del agua en movimiento a través de un acuífero por un conducto completamente abierto. La sección transversal A , no está completamente abierta, ya que está ocupada por los granos del suelo.

La velocidad del agua subterránea se obtiene dividiendo la descarga efectiva por la porosidad efectiva del medio poroso:

$$v = \frac{Q}{n_e A} = -\frac{k \partial h}{n_e \partial l}$$

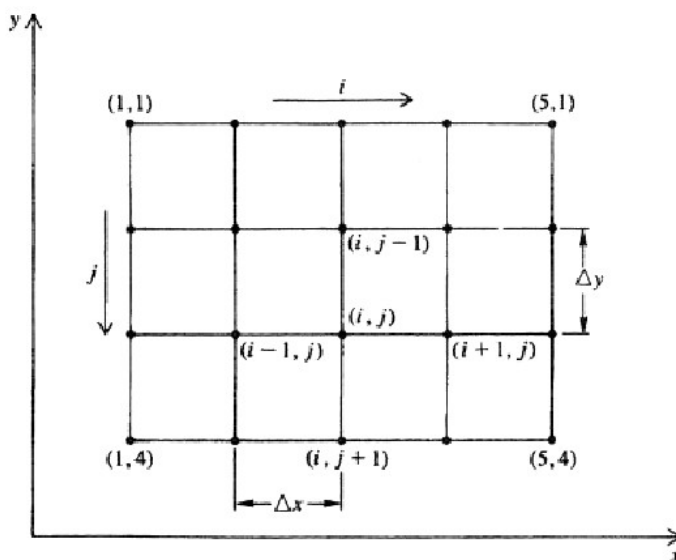
donde:

$n_e =$ porosidad efectiva del medio poroso.

1.2.-MODELOS NUMÉRICOS

Para resolver la ecuación fundamental del flujo se recurre entre otros métodos a los modelos numéricos.

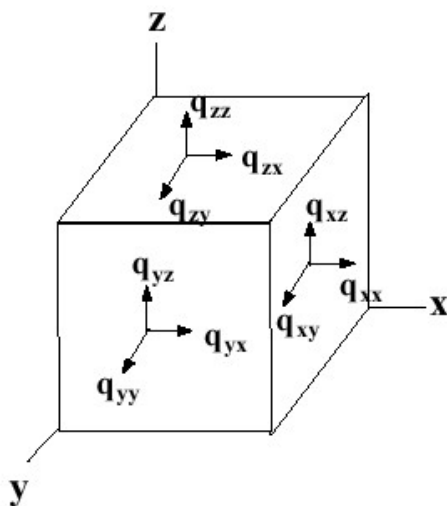
El método utilizado por el algoritmo de MODFLOW es el de las DIFERENCIAS FINITAS, que consiste en reemplazar la diferencia infinitesimal ∂x por una diferencia finita medible Δx .



La ecuación diferencial para la expresión de Laplace para el nodo (i, j) y según la dirección x es:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \approx \frac{h_{i-1,j} - 2h_{i,j} + h_{i+1,j}}{(\Delta x)^2}$$

igual que el resto de ejes del espacio.

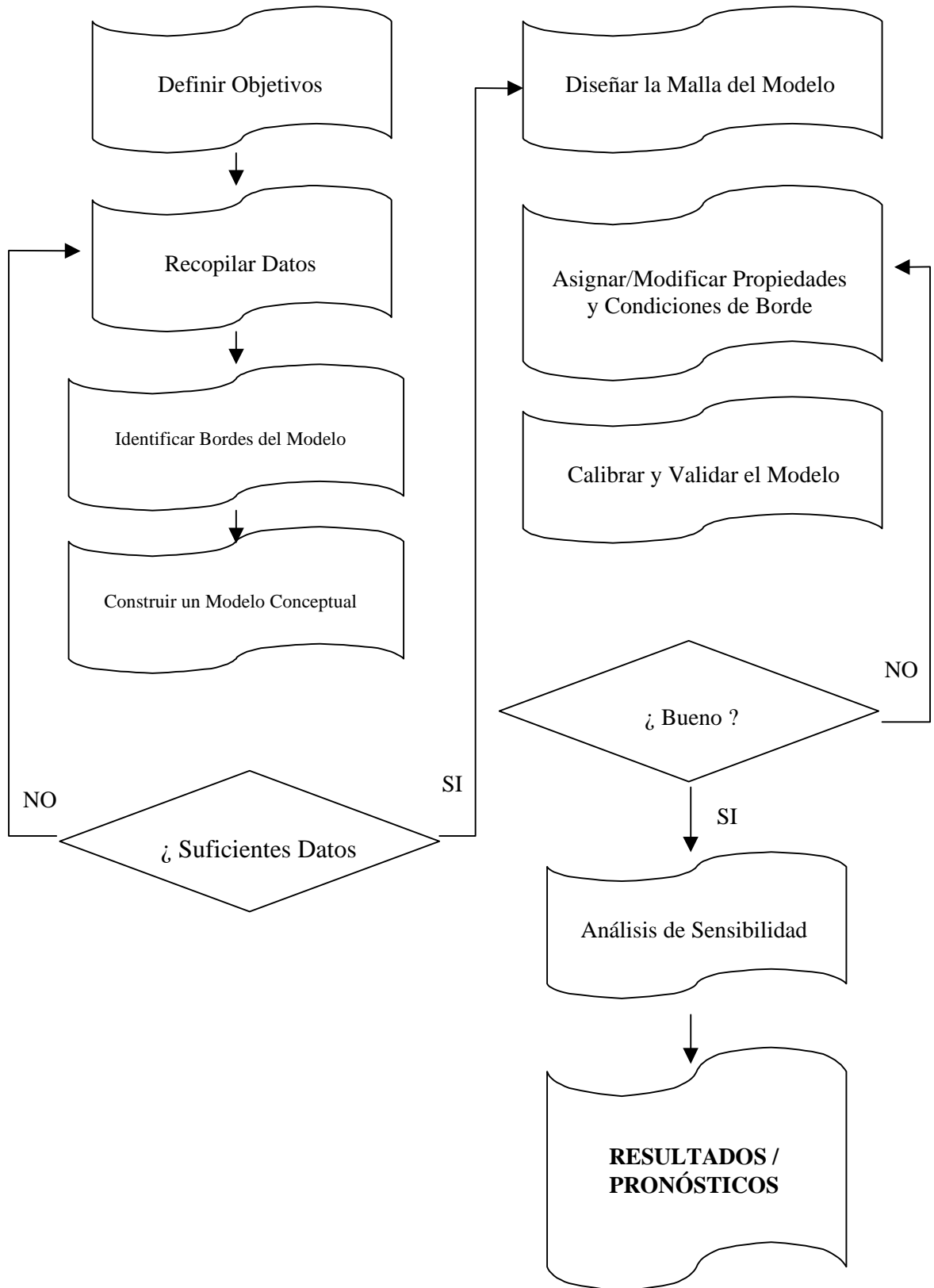


1.3.-CONSTRUCCIÓN DEL MODELO HIDROGEOLÓGICO

La modelización hidrogeológica es una representación matemática aproximada de la hidrogeología y/o química de un determinado lugar. Para ello se utilizan programas informáticos más o menos complejos que resuelven la ecuación fundamental del flujo de las aguas subterráneas en medios porosos y en 3 dimensiones, en base a observaciones reales del emplazamiento a modelizar.

La construcción de un modelo matemático para definir la hidrogeología de un acuífero debe seguir los siguientes pasos fundamentales:

Modelización Hidrogeológica



1.3.1.-Definición de objetivos

El principal objetivo de la modelización hidrogeológica es la de definir los flujos de agua subterránea y/o los procesos de transporte de contaminantes a través del acuífero o medio poroso.

Con el conocimiento de las direcciones de flujo preferenciales podremos:

- Determinar impactos futuros sobre condiciones existentes.
- Predecir trayectorias de flujo y tiempos de desplazamiento.
- Delimitar zonas de protección de captaciones.
- Predecir migraciones de plumas de contaminantes y/o atenuación natural.
- Evaluar/optimizar sistemas de remediación de agua subterránea.
- Diseño de sistemas de drenaje/desagüe.
- Incrementar las tasas de bombeo en pozos existentes.

1.3.2.-Recopilación de datos

La cuantía de datos sobre el medio debe ser lo más extensa y rica posible, con objeto de poder modelizar y comparar con la realidad.

Debemos disponer de datos de:

Datos de la superficie:

- Topografía
- Cursos de aguas superficiales (ríos, lagos, presas).

Datos del subsuelo:

- Propiedades del suelo: conductividad hidráulica, porosidad, coeficiente de almacenamiento, densidad, dispersividad, fracción de materia orgánica, concentración en contaminantes, etc.
- Elevación del agua subterránea: distribución de la piezometría.
- Química del agua subterránea: composición química del agua en cuanto a nutrientes (Nitratos, Sulfatos, Oxígeno disuelto, etc.).

En el cuadro siguiente se muestran los datos necesarios para la alimentación de un modelo hidrogeológico y las fuentes o métodos de conseguirlos:

Tipo de información	Fuente/Método
Geología	Mapas geológicos/registro sondeos
Hidrogeología (piezometría)	Mapas hidrogeológicos y piezométricos
Química	Analítica de pozos
Propiedades del suelo (K, S, n, ρ , Foc, α)	Ensayos de bombeo/slug Ensayos de laboratorio Bibliografía
Propiedades de contaminantes (tasas de degradación, coef. adsorción, concentraciones)	Ensayos de laboratorio Bibliografía

1.3.3.-Identificación de bordes del modelo

Con objeto de establecer las condiciones de borde del modelo matemático y de poner acotación espacial a la ecuación fundamental del flujo en 3D, deben especificarse las condiciones de borde del mismo:

Deben cumplirse al menos estos aspectos:

- El área del modelo debe cubrir con suficiencia todo el área de interés, como para que las condiciones de borde seleccionadas no influyan de manera significativa en los resultados.
- Deben aprovecharse condiciones de borde naturales, como:
 - Cursos de agua superficial (lagos, ríos, vegas, etc.)
 - Bordes geológicos (afloramiento de roca, etc.)
 - Divisorias de aguas subterráneas.

1.3.4.-Desarrollo del modelo conceptual

Consiste en la idealización/simplificación de las características conocidas de un lugar para facilitar una aproximación práctica.

Para ello debe definirse:

- Número de capas (idealización de la hidroestratigrafía).
- Agrupamiento macroscópico de los diferentes tipos de suelo de acuerdo a sus principales características hidrogeológicas.
- Valores y cuantías de las posibles entradas/salidas al sistema (recargas/evapotranspiraciones).
- Condiciones iniciales/originales del nivel freático/piezométrico.
- Identificación de los contaminantes y sus distribuciones.
- Establecimiento de concentraciones basales.
- Caracterizar la ubicación de fuentes e historia.
- Identificar las trayectorias de migración del contaminante.

- Identificación de los receptores medioambientales.
- Determinar procesos y tasas de degradación y mecanismos de adsorción y retardo.

1.3.5.-Diseño de la Malla del Modelo

Una vez definido el modelo conceptual, este deberá ser plasmado geométricamente mediante una malla rectangular en 3 dimensiones, a la que se le asignará capa a capa o celda a celda todas y cada una de las características hidrogeológicas.

El tamaño y geometría de la malla (espaciamiento de la malla) deberá asignarse teniendo en consideración los siguientes objetivos (Spitz y Moreno, 1996):

- Garantizar la estabilidad de la solución del modelo.
- Incrementar la resolución del modelo.
- Minimizar la dispersión numérica.
- Minimizar los seguimientos de computación (tiempo y volumen de almacenamiento).

Para ello debe tenerse en cuenta:

- El espaciamiento de la malla debe ser lo más uniforme posible.
- El incremento en la distancia entre celdas vecinas no debe ser superior a 2 (recomendable 1,5).
- La malla deberá estar orientada paralelamente al flujo regional de las aguas subterráneas, para reducir la influencia de flujos transversales.
- La malla en las cercanías del área de interés debe ser lo suficientemente pequeña para representar de forma adecuada variaciones locales en las características del suelo, carga hidráulica y geoquímica.
- Mayor resolución de la malla en zonas de interés y donde existan pendientes importantes de carga potencial (pozos de bombeo, drenes, trincheras, etc.).

1.3.6.-Asignación de propiedades del acuífero/contaminante

Las propiedades características del acuífero y contaminante, que deben tenerse en consideración para la modelización hidrogeológica son:

- Conductividad.
- Porosidad/Coef.de almacenamiento elástico.
- Adsorción.
- Dispersión.
- Carga neta.
- Condiciones de borde.
- Pozos de bombeo/inyección.

1.3.7.-Calibración y Validación del Modelo

No debe darse un modelo como bueno y mucho menos realizar predicciones hasta no haber realizado calibraciones y validaciones del mismo.

Para ello debe realizarse un estudio estadístico entre los valores observados en campo y los calculados en el modelo.

Entre los parámetros de calibración están:

- Conductividad hidráulica.
- Tasa de recarga.
- Condiciones de borde.
- Goteo de un acuitardo.
- Almacenamiento.

Para flujo y para transporte:

- Ubicación de fuentes.
- Historia y antecedentes de la fuente.
- Dispersividad.

- Coeficiente de difusión.
- Coeficiente de adsorción.
- Tasa de degradación.

Entre los criterios para la calibración cualitativa del modelo:

- Cálculo de los residuos potenciométricos:
 - residuo, $R = h(\text{calculado}) - h(\text{observado})$
 - promedio, $\bar{R} = \sum \frac{R_i}{n}$
 - promedio absoluto, $RA = \sum \frac{|R_i|}{n}$
 - media cuadrática, $RMS = \sqrt{\sum \frac{(R_i^2)}{n}}$
 - promedio normalizado, $RN = \frac{RMS}{\max H - \min H}$
 - desviación estándar, $s = \sqrt{\sum \frac{(R_i - \bar{R})^2}{(n-1)}}$

Puede haber más de una combinación posible de parámetros que proporcionen una buena calibración. Por ello, es bueno realizar una calibración del acuífero en condiciones estáticas y bajo estrés (por ejemplo un bombeo de larga duración).

1.3.8.-Análisis de sensibilidad

Todo modelo hidrogeológico debe contar con un “análisis de sensibilidad”, que debe contestar a éstas preguntas básicas:

- ¿Los supuestos del modelo son válidos?
- ¿Los datos de partida son razonables?
- ¿Variaciones pequeñas generan grandes diferencias en los resultados?
- ¿Es defendible el modelo?

1.3.9.-Predicciones del modelo

Una vez establecido el modelo, calibrado y validado y realizado un análisis de sensibilidad se está en condiciones de poder realizar predicciones o pronósticos sobre:

- Distribuciones de carga hidráulica.
- Distribuciones de velocidades.
- Tiempos de propagación y trayectorias de contaminantes.

2-FUNDAMENTOS DE LA MODELIZACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

2.1.-ECUACIÓN GENERAL DE TRANSPORTE DE MASA

La ecuación de diferencias parciales que describe el movimiento y transporte de contaminante, para la especie K, en las 3 dimensiones del espacio para un sistema de flujo de aguas subterráneas se describe como sigue:

$$\frac{\partial \theta C^k}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right)}_{\text{DISPERSIÓN}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k)}_{\text{ADVENCIÓN}} + \underbrace{q_s C_s^k}_{\text{FUENTES/SUMIDEROS}} + \underbrace{\sum R_N}_{\text{REACCIONES QUÍMICAS}}$$

donde:

C^k = concentración disuelta del contaminante $k(ML^{-3})$

θ = porosidad del suelo (adimensional).

t = tiempo (T).

x_i = distancia a lo largo del eje de coordenadas (L).

D_{ij} = dispersión hidrodinámica, Tensor (L^2T^{-1})

v_i = velocidad lineal de las aguas subterráneas (LT^{-1})

q_s = flujo por unidad de volumen del acuífero, representa la entrada (fuente) o salida (sumidero) al sistema (T^{-1})

C_s^k = concentración en la fuente de la especie k (ML^{-3})

$\sum R_N$ = término que engloba las reacciones químicas.

El término de las reacciones químicas de la ecuación anterior ($\sum R_N$), es usado para reflejar el efecto de las reacciones bioquímicas y geoquímicas durante el proceso de movimiento y transporte de contaminante.

Considerando únicamente los 2 tipos fundamentales de reacciones químicas, por ejemplo: reacción superficial agua-sólido (sorción) y reacción de primer orden de degradación, el término de reacciones químicas puede expresarse como sigue:

$$\sum R_N = -\rho_b \frac{\partial c^{-k}}{\partial t} - \lambda_1 \theta c^k - \lambda_2 \rho_b c^{-k}$$

donde:

$$\rho_b = \text{densidad del suelo } (ML^{-1})$$

$$c^{-k} = \text{concentración de la especie } K \text{ sorbida en la superficie del suelo } (MM^{-1})$$

$$\lambda_1 = \text{tasa de primer orden de degradación para la fase disuelta } (T^{-1})$$

$$\lambda_2 = \text{tasa de primer orden de degradación para la fase sólida } (T^{-1})$$

Sustituyendo el valor deducido de $\sum R_N$ en la ecuación general de transporte:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i c) + q_s c_s - q'_s c - \lambda_1 \theta c - \lambda_2 \rho_b \bar{c}$$

Cuando se asume el equilibrio local, la ecuación anterior se expresa en términos del retardo, R ($R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial c}$):

$$R \theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i c) + q_s c_s - q'_s c - \lambda_1 \theta c - \lambda_2 \rho_b \bar{c}$$

2.1.1.-Advección

El término de advección en la ecuación general de transporte, $\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta v_i C^k)$ describe el movimiento de un contaminante miscible a la misma velocidad que el agua subterránea.

Para la mayoría de los estudios de campo sobre transporte de contaminante, éste término domina sobre el resto de los demás términos de la ecuación general de transporte.

Para medir el grado de dominio de la advección, se utiliza el llamado número de Peclet (adimensional), cuya expresión es la siguiente:

$$P_e = \frac{|v|L}{D}$$

donde:

$|v|$ = *magnitud del vector velocidad de las aguas subterráneas (LT^{-1}).*

L = *longitud característica, normalmente se toma la longitud de una celda de la malla (L).*

D = *coeficiente de dispersión (L^2T^{-1})*

Para un dominio de la advección en el transporte, P_e es un valor grande, mientras que tiende a infinito cuando el dominio es total.

La ecuación general del transporte advectivo en 3D es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial(vc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} + \frac{\partial(vc)}{\partial z} \pm q_s \cdot c_s$$

Si la velocidad es constante y el flujo es unidireccional y no hay fuente ni sumideros ($q_s \cdot c_s = 0$):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = v_x \frac{\partial c}{\partial x}$$

2.1.2.-Dispersión

La Dispersión en un medio poroso es causada como consecuencia de dos mecanismos: como resultado de la variación a escala microscópica de la velocidad en comparación con la velocidad media de las aguas subterráneas (dispersión mecánica) y la difusión molecular debida al gradiente de concentraciones.

La difusión molecular es secundaria y de escasa entidad comparada con la dispersión mecánica, y es realmente importante cuando la velocidad de las aguas subterráneas es muy baja.

La suma de la dispersión mecánica y la difusión molecular es conocido como Dispersión Hidrodinámica o Dispersión.

El tensor de dispersión hidrodinámica, D_{ij} , para un medio poroso isótropo, es definido, de acuerdo a las expresiones de Bear (1979) como:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^*$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^*$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D^*$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|}$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|v|}$$

donde:

D_{xx}, D_{yy}, D_{zz} = componentes principales del tensor dispersión (L^2T^{-1})

$D_{xy}, D_{xz}, D_{yz}, D_{yx}, D_{zx}, D_{zy}$ = resto de componentes del tensor dispersión
(L^2T^{-1})

α_L = dispersividad longitudinal (L)

α_T = dispersividad transversal (L)

D^* = coeficiente de difusión efectiva molecular (L^2T^{-1})

v_x, v_y, v_z = componentes del vector velocidad según X, Y y Z (LT^{-1})

$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ = módulo o magnitud del vector velocidad (LT^{-1})

El fenómeno de difusión molecular ocurre a lo largo de un gradiente de concentración, desde lugares con mayor concentración a lugares con menor, aunque el agua no se mueva.

La masa de fluido difuminado es proporcional al gradiente de concentraciones, y puede ser expresado por la **PRIMERA LEY DE FICK**, que en una dimensión es:

$$F = -Dd\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)$$

donde:

F = flujo de masa de soluto por unidad de área y por unidad de tiempo.

Dd = coeficiente de difusión (L^2/T)

c = concentración de soluto (M/L^3)

$\frac{\partial c}{\partial x}$ = gradiente de concentración ($M/L^3/L$)

El signo negativo indica que el movimiento es de áreas de mayor concentración a áreas de menor concentración.

Para sistemas en que la concentración varía con el tiempo, se cumple la **SEGUNDA LEY DE FICK**, que para una dimensión es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = Dd \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

donde:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{variación de la concentración con el tiempo (M/L}^3\text{/T)}$$

En medios porosos, la difusión no se produce tan rápido como el movimiento de las aguas subterráneas, ya que el soluto recorre un camino más largo, entre los granos del suelo.

De tal forma, el coeficiente efectivo de difusión, D^* es:

$$D^* = w \cdot Dd$$

donde:

$$w = \text{coeficiente relacionado con la tortuosidad (Bear, 1972)}$$

La tortuosidad se define como el cociente entre la longitud de la trayectoria entre dos puntos (L_R) y la distancia en línea recta entre esos dos puntos (L).

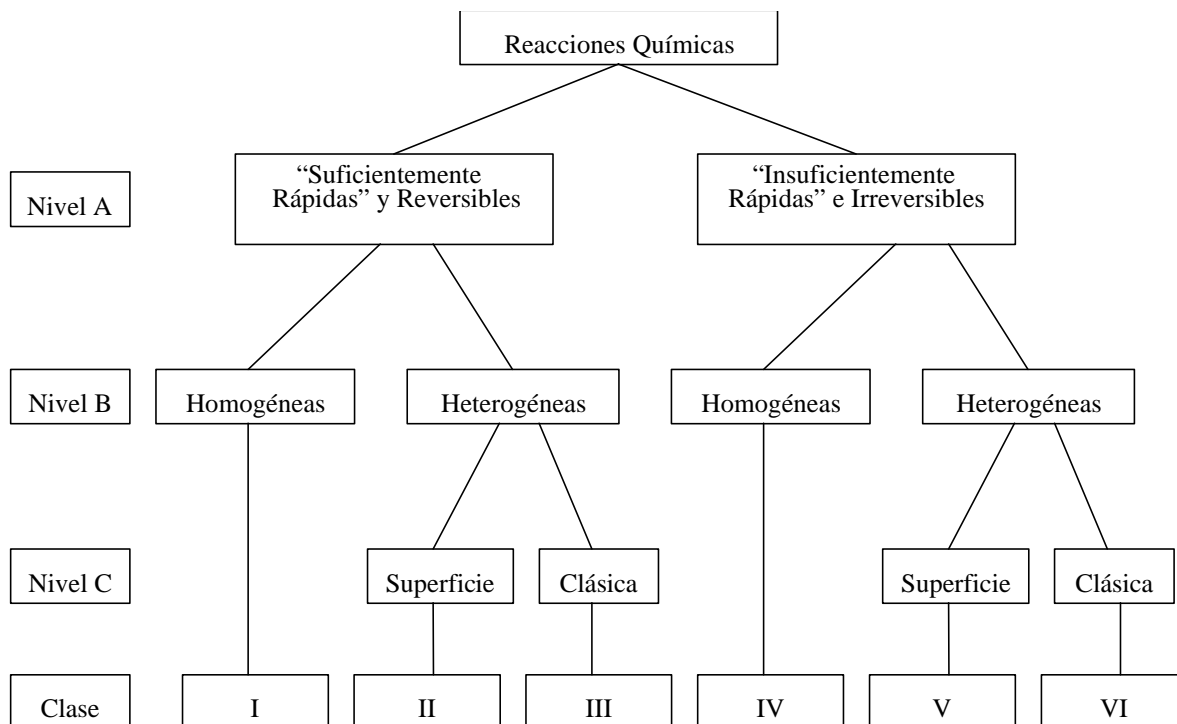
$$T = \frac{L_R}{L} \quad (\text{generalmente, } T \geq 1)$$

2.1.3.-Fuentes y sumideros

El término, q_{sc} , de fuentes/sumideros, representa las entradas o salidas de masa de soluto al sistema. Dentro de éste término estarían englobados las recargas (pozos, ríos, tanques) y las pérdidas (evapotranspiración, pozos).

2.1.4.-Reacciones Químicas

Rubin (1983) estableció 6 tipos diferentes de reacciones químicas que pueden ocurrir en el transporte de solutos.



En el primer nivel (NIVEL A), hay 2 grandes grupos:

- Las reacciones rápidas y reversibles, que se encuentran en equilibrio con su entorno y las menos rápidas, que no alcanzan el equilibrio con su entorno (irreversibles).
- Las reacciones de superficie corresponden a adsorción hidrofóbica de compuestos orgánicos neutros e intercambio iónico.
- Las reacciones clásicas corresponden al proceso de disolución/precipitación.

2.1.4.1.-Proceso de sorción

El proceso de sorción incluye la adsorción, la quimisorción, la absorción y el intercambio iónico.

Este proceso implica una disminución en la velocidad de movimiento, es decir un “retardo” en el transporte.

- Intercambio iónico: consiste en que cationes (carga positiva) de óxidos de hierro o aluminio quedan atrapados por cargas negativas de minerales de la arcilla en su superficie.
- Quimisorción: ocurre cuando el soluto es incorporado a la superficie del sedimento, suelo o roca por reacciones químicas.
- Absorción: Ocurre cuando las partículas del acuífero son porosas y el soluto queda atrapado en su interior.
- Adsorción: proceso por el cual el soluto queda atrapado en la superficie del suelo.

La sorción se determina experimentalmente, calculando la cantidad de soluto retenido en un sedimento, suelo o roca.

Existen 3 modelos para explicar las reacciones de equilibrio superficial:

- Modelo lineal de Sorción
- Modelo no lineal de Freundlich
- Modelo de Langmuir

2.1.4.1.1.-Modelo Lineal

Representa la relación lineal entre la concentración sorbida en el sólido (c^*) y la concentración del soluto (c):

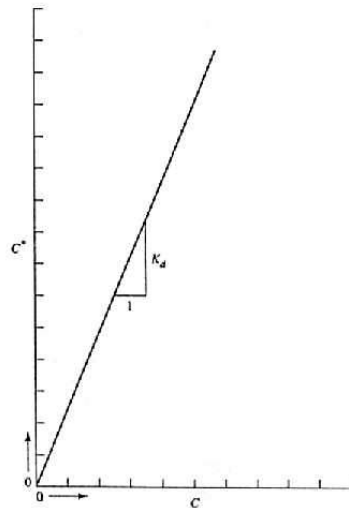
$$c^* = K_d \cdot c$$

donde:

$c^* =$ masa de soluto sorbido por unidad seca de peso de sólido (mg/kg).

$c =$ concentración de soluto en la solución en equilibrio con la masa de soluto sorbido en el sólido (mg/l)

$K_d =$ coeficiente de distribución (l/kg)



Sustituyendo en la ecuación general del transporte de soluto:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\rho_d}{\theta} \frac{\partial (k_d c)}{\partial t}$$

reordenando:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \cdot R = D_L \underbrace{\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}}_{\text{DISPERSIÓN}} - v_x \underbrace{\frac{\partial c}{\partial x}}_{\text{ADVENCIÓN}}$$

donde:

$$R = \text{retardo} = 1 + \frac{\rho_d}{\theta} k_d$$

2.1.4.1.2.-Modelo no lineal de Freundlich

El modelo de Freundlich define la relación entre la concentración sorbida en el sólido de soluto y la concentración de éste en la solución, mediante una ecuación no lineal, expresada por:

$$C^* = K \cdot c^N$$

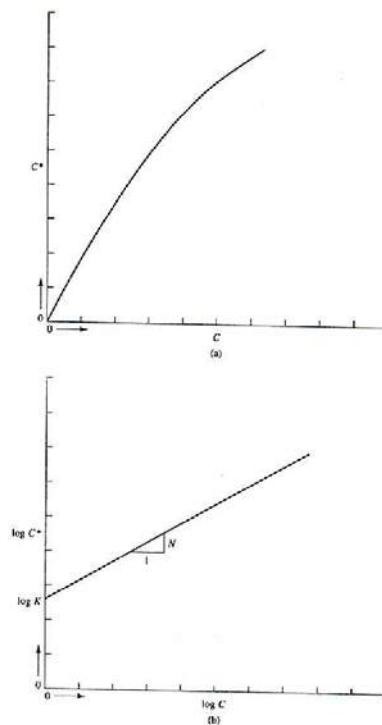
donde K y N son constantes

Sustituyendo en la ecuación general de transporte:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\rho_d}{\theta} \frac{\partial (Kc^N)}{\partial t}$$

y reorganizando:

$$\frac{\partial c}{\partial t} R_F = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x}$$



donde:

$R_F = 1 + \frac{\rho_d \cdot K \cdot N \cdot c^{N-1}}{\theta}$, que representa el factor de retardo para la sorción por el modelo de Freundlich.

Si $N > 1$ frente difuso.

Si $N < 1$ frente neto

Si $N = 1$ modelo lineal

2.1.4.1.3.-Modelo de Langmuir

El modelo de Langmuir asume que la superficie del sólido posee un número limitado de “sitios” de sorción. Cuando estos “sitios” de sorción están rellenos, el sólido es incapaz de sorber más soluto de la solución. Por ello, la capacidad de sorción queda limitada.

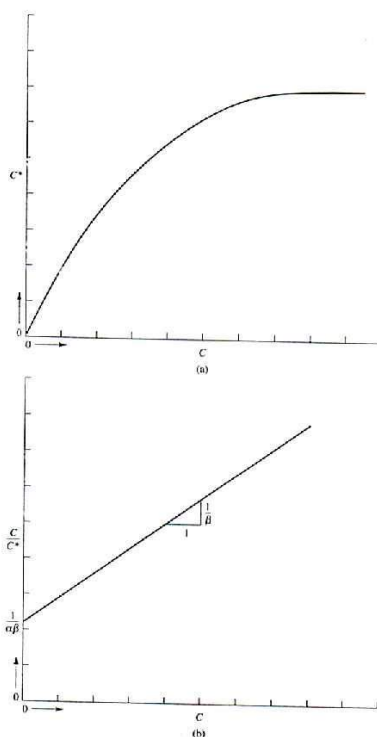
La siguiente expresión corresponde a la formulación matemática de su modelo:

$$\frac{c}{c^*} = \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{c}{\beta} \quad \text{ó} \quad c^* = \frac{\alpha\beta c}{1 + \alpha c}$$

donde:

$\alpha =$ constante de adsorción (L^3/M)

$\beta =$ máxima cantidad de soluto que puede ser sorbido por la masa sólida (M/M).



Sustituyendo en la ecuación general de transporte:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\rho_d \partial \left(\frac{\alpha\beta c}{1 + \alpha c} \right)}{\theta \cdot \rho t} - \frac{\rho d}{\theta} \cdot \frac{\partial \left(\frac{\alpha\beta c}{1 + \alpha c} \right)}{\partial t}$$

Reordenando:

$$\frac{\partial c}{\partial t} R_l = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x}$$

donde:

$$R_l = 1 + \frac{\rho_d}{\theta} \left(\frac{\alpha\beta}{(1 + \alpha c)^2} \right), \text{ que representa el factor de retardo de Langmuir.}$$

2.1.4.2.-Modelos de sorción cinética (No equilibrio)

Debido a que el proceso de sorción es lento, comparado con la velocidad de movimiento de las aguas subterráneas, no se alcanza un equilibrio de concentraciones entre la fase líquida y la fase sólida.

Existen varios modelos que tratan de explicar el proceso de sorción cinética:

- Modelos irreversibles
- Modelos reversibles
 - Lineal
 - No lineal
 - Bilineal
 - De difusión controlada

2.1.4.2.1.-Modelo irreversible

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = K_1 \cdot c$$

donde:

$K_1 =$ constante de degradación de primer orden.

2.1.4.2.2.-Modelo reversible lineal

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = K_2 c - K_3 c^*$$

donde:

$K_2 =$ constante de paso de soluto a la fase sólida.

$K_3 =$ constante de paso de la fase sólida a la líquida.

2.1.4.2.3.-Modelo reversible no lineal

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = K_5 c^N - K_6 c^*$$

donde:

$K_5 =$ constante de paso de soluto a la fase sólida.

$K_6 =$ constante de paso de la fase sólida a la líquida.

2.1.4.2.4.-Modelo reversible bilineal

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = K_7 C(\beta - c^*) - K_8 C^*$$

donde:

$K_7 =$ constante de paso de soluto a la fase sólida.

$K_8 =$ constante de paso de la fase sólida a la líquida.

$\beta =$ máxima cantidad de soluto que puede ser sorbida.

2.1.4.2.5.-Modelo reversible de difusión controlada

Se produce debido a la capacidad que tienen los iones para desplazarse a los sitios donde es posible la sorción.

El modelo asume:

- fase móvil en el líquido.
- Fase inmóvil en las proximidades de la fase sólida.
- Paso de soluto a la fase sólida por difusión.

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \theta_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial z^2} - \theta_m v_m \frac{\partial C_m}{\partial z} - F \rho_d \frac{\partial C_m^*}{\partial t} - \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} - (1 - F) \rho_d \frac{\partial C_{im}^*}{\partial t}$$

donde:

$\theta_m =$ porosidad en la zona de la fase móvil.

$\theta_{im} =$ porosidad en la zona de la fase inmóvil.

$C_m =$ concentración de soluto en la fase móvil.

$C_{im} =$ concentración de soluto en la fase inmóvil.

$C_m^* =$ masa de soluto sorbida en la zona móvil.

$C_{im}^* =$ masa de soluto sorbida en la zona inmóvil.

$v_m =$ velocidad media del flujo en la zona de la fase móvil

$F =$ fracción de la superficie de sólido en contacto con la fase móvil.

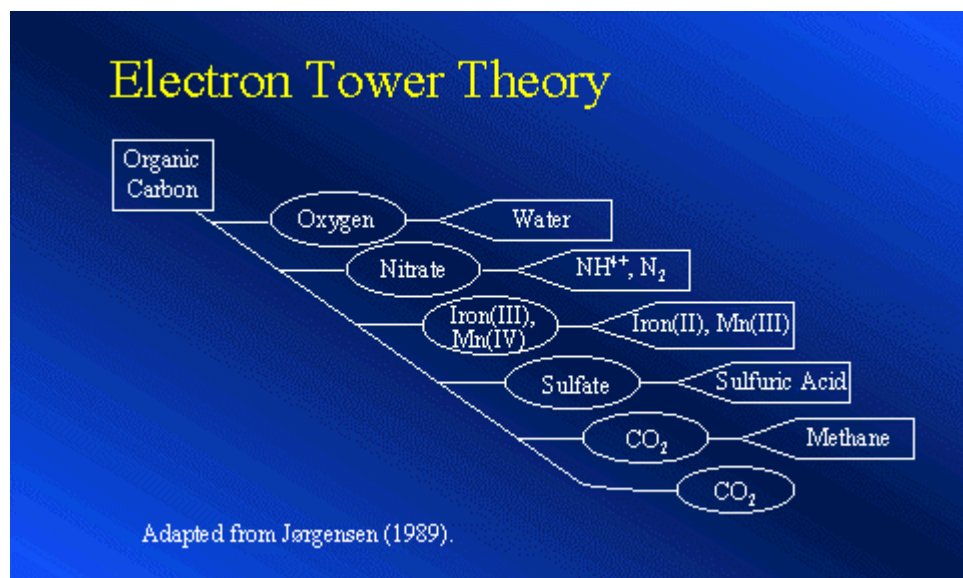
$D_m =$ constante de difusión aparente en fase móvil.

2.1.4.3.-Biodregradación

Es bien conocida la degradación que sufren los compuestos orgánicos (hidrocarburos) en condiciones aeróbicas y anaeróbicas. La primera en presencia de oxígeno y la segunda en presencia de nitratos, hierro (III), sulfatos y dióxido de carbono (aceptadores de electrones).

La biodegradación ocurre secuencialmente como sigue:

Oxígeno → Nitratos → Hierro (III) → Sulfatos → Dióxido de Carbono



Son tres los modelos cinéticos utilizados para explicar la biodegradación:

- *Primer orden de degradación.*
- *Reacción instantánea*
- *Cinética de Monod*

2.1.4.3.1.-Primer orden de degradación

La expresión típica para expresar la biodegradación de un compuesto orgánico es la relación exponencial de degradación:

$$C = C_0 \cdot e^{-kt}$$

donde:

C = concentración biodegradada del compuesto químico

C_0 = concentración inicial del compuesto

k = grado de degradación del compuesto

t = tiempo

La constante de primer orden de degradación viene expresada en función de la vida media del compuesto.

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{0,693}{k} = \frac{\text{Ln } 2}{k}$$

Existen numerosos estudios al respecto que recogen valores de la vida media de buena parte de los compuestos químicos hidrocarburoados.

En el cuadro siguiente se recogen valores característicos de la vida media ($t_{\frac{1}{2}}$) para BTEX:

Compuesto	$t_{\frac{1}{2}}$ (días)
Benceno	10-365-730
Tolueno	10-63
Etilbenceno	10-228
Xilenos	14-365

2.1.4.3.2.-Reacción instantánea

La expresión fue propuesta por Borden y Bedient en 1986 y asumían que la biodegradación cinética microbiana era más rápida en comparación con la velocidad de transporte de oxígeno.

El crecimiento de microorganismos y la utilización de oxígeno y contaminante, puede simularse como reacción instantánea entre los compuestos orgánicos y el oxígeno.

El modelo de reacción instantánea admite que la razón de consumo de oxígeno para degradar compuestos orgánicos por parte de los microorganismos es muy alta y que el tiempo requerido para su mineralización es muy corto, casi instantáneo.

Usando el oxígeno como un “aceptador de electrones”, la expresión es:

$$\Delta C_R = -\frac{O}{F}$$

donde:

$\Delta C_R =$ *Cambio de concentración del contaminante debido a la biodegradación.*

$O =$ *Concentración del oxígeno.*

$F =$ *Cantidad de oxígeno consumido en la biodegradación.*

2.1.4.3.3.-Modelo cinético de Monod

La expresión típica para simular la biodegradación es la función de saturación hiperbólica presentada por Monod en 1942:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{C}{K_c + c}$$

donde:

- μ = Razón de crecimiento (tiempo⁻¹)
- μ_{\max} = Razón de crecimiento máximo (tiempo⁻¹)
- C = Concentración (mg/l)
- K_c = Constante de saturación media

cuando:

- $C \gg K_c$, entonces $K_c + c = C$ y $\mu = \mu_{\max}$
- $C \ll K_c$, entonces $\mu = \frac{\mu_{\max}}{K_c} \cdot C$

La expresión final de la reducción de la concentración del contaminante aplicando el modelo cinético es:

$$\Delta C = M_t \mu_{\max} \left(\frac{C}{K_c + c} \right) \cdot \Delta t$$

donde:

- C = Concentración del contaminante
- M_t = Concentración total de microorganismos
- μ_{\max} = Máxima concentración de consumo de contaminante por unidad de masa de microorganismos
- K_c = Constante de saturación media del contaminante
- Δt = Incremento de tiempo

En presencia de una pluma de contaminación por hidrocarburos y existencia de oxígeno disuelto, la degradación aerobia microbiana predomina sobre la anaerobia. El oxígeno disuelto es rápidamente consumido en el interior de la pluma, convirtiendo la zona en “anóxica” (con bajo nivel de oxígeno). En éstas condiciones, las bacterias anaeróbicas empiezan a utilizar otros aceptadores de electrones para metabolizar los hidrocarburos disueltos.

ACEPTADOR DE ELECTRONES	TIPO DE REACCIÓN	SUBPRODUCTO METABÓLICO	POTENCIAL REDOX (pH=7, en voltios)
Oxígeno	Aerobia	CO ₂	+820
Nitratos	Anaerobia	N ₂ , CO ₂	+740
Fe ⁺³	Anaerobia	Fe ⁺²	-50
Sulfatos	Anaerobia	H ₂ S	-220
CO ₂	Anaerobia	CH ₄	-240

A continuación figuran las reacciones redox para benceno, tolueno, etilbenceno y xilenos.

REACCIONES REDOX PARA BENCENO

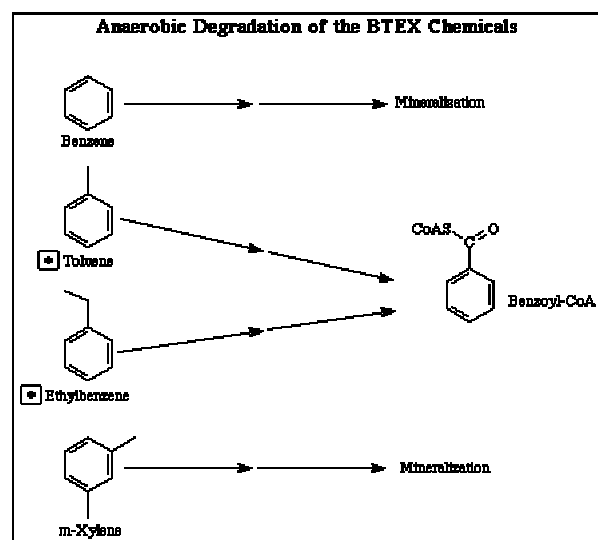
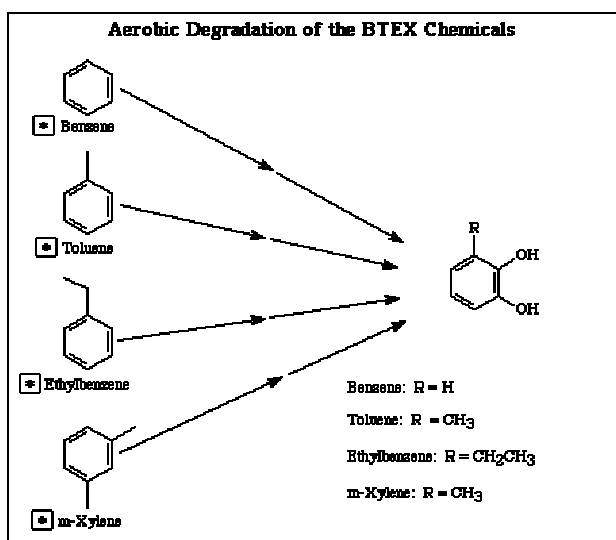
Oxidación	$C_6H_6 + 12H_2O$	→	$6CO_2 + 30H^+ + 30e^-$	
Reducción	$7.5O_2 + 30H^+ + 30e^-$	→	$15H_2O$	Oxígeno
	$6NO_3^- + 36H^+ + 30e^-$	→	$3N_2 + 18H_2O$	Nitratos
	$15Mn^{4+} + 30e^-$	→	$15Mn^{2+}$	Manganeso
	$30Fe^{3+} + 30e^-$	→	$30Fe^{2+}$	Hierro
	$3.75SO_4^{2-} + 37.5H^+ + 30e^-$	→	$3.75H_2S + 15H_2O$	Sulfatos
	$3.75CO_2 + 30H^+ + 30e^-$	→	$3.75CH_4 + 7.5H_2O$	Dióxido de Carbono
Total	$C_6H_6 + 7.5O_2$	→	$6CO_2 + 3H_2O$	Oxígeno
	$C_6H_6 + 6H^+ + 6NO_3^-$	→	$6CO_2 + 3N_2 + 6H_2O$	Nitrato
	$C_6H_6 + 15Mn^{4+} + 12H_2O$	→	$6CO_2 + 30H^+ + 15Mn^{2+}$	Manganeso
	$C_6H_6 + 30Fe^{3+} + 12H_2O$	→	$6CO_2 + 30H^+ + 30Fe^{2+}$	Hierro
	$C_6H_6 + 3.75SO_4^{2-} + 7.5H^+$	→	$6CO_2 + 3.75H_2S + 3H_2O$	Sulfato
	$C_6H_6 + 4.5H_2O$	→	$2.25CO_2 + 3.75CH_4$	Dióxido de Carbono

REACCIONES REDOX PARA TOLUENO

Oxidación	$C_7H_8 + 14H_2O$	→	$6CO_2 + 36H^+ + 36e^-$	
Reducción	$9O_2 + 36H^+ + 36e^-$	→	$18H_2O$	Oxígeno
	$7.2NO_3^- + 43.2H^+ + 36e^-$	→	$3.6N_2 + 21.6H_2O$	Nitrato
	$18Mn^{4+} + 36e^-$	→	$18Mn^{2+}$	Manganeso
	$36Fe^{3+} + 36e^-$	→	$36Fe^{2+}$	Hierro
	$4.5SO_4^{2-} + 45H^+ + 36e^-$	→	$4.5H_2S + 18H_2O$	Sulfato
	$4.5CO_2 + 36H^+ + 36e^-$	→	$4.5CH_4 + 9H_2O$	Dióxido de Carbono
Total	$C_7H_8 + 9O_2$	→	$7CO_2 + 4H_2O$	Oxígeno
	$C_7H_8 + 7.2H^+ + 7.2NO_3^-$	→	$7CO_2 + 3.6N_2 + 7.6H_2O$	Nitrato
	$C_7H_8 + 18Mn^{4+} + 14H_2O$	→	$7CO_2 + 6H^+ + 8Mn^{2+}$	Manganeso
	$C_7H_8 + 36Fe^{3+} + 14H_2O$	→	$7CO_2 + 36H^+ + 36Fe^{2+}$	Hierro
	$C_7H_8 + 4.5SO_4^{2-} + 9H^+$	→	$7CO_2 + 4.5H_2S + 4H_2O$	Sulfato
	$C_7H_8 + 5H_2O$	→	$2.5CO_2 + 4.5CH_4$	Dióxido de Carbono

REACCIONES REDOX PARA ETILBENCENO Y XILENO

Oxidación	$C_8H_{10} + 16H_2O$	\rightarrow	$8CO_2 + 42H^+ + 42e^-$	
Reducción	$10.5O_2 + 42H^+ + 42e^-$	\rightarrow	$21H_2O$	Oxígeno
	$8.4NO_3^- + 50.4H^+ + 42e^-$	\rightarrow	$4.2N_2 + 25.2H_2O$	Nitrato
	$21Mn^{4+} + 42e^-$	\rightarrow	$21Mn^{2+}$	Manganeso
	$42Fe^{3+} + 42e^-$	\rightarrow	$42Fe^{2+}$	Hierro
	$5.25SO_4^{2-} + 52.5H^+ + 42e^-$	\rightarrow	$5.25H_2S + 21H_2O$	Sulfato
	$5.25CO_2 + 42H^+ + 42e^-$	\rightarrow	$5.25CH_4 + 10.5H_2O$	Dióxido de Carbono
Total	$C_8H_{10} + 10.5O_2$	\rightarrow	$8CO_2 + 5H_2O$	Oxígeno
	$C_8H_{10} + 8.4H^+ + 8.4NO_3^-$	\rightarrow	$8CO_2 + 4.2N_2 + 9.2H_2O$	Nitrato
	$C_8H_{10} + 21Mn^{4+} + 16H_2O$	\rightarrow	$8CO_2 + 42H^+ + 21Mn^{2+}$	Manganeso
	$C_8H_{10} + 42Fe^{3+} + 16H_2O$	\rightarrow	$8CO_2 + 42H^+ + 42Fe^{2+}$	Hierro
	$C_8H_{10} + 5.25SO_4^{2-} + 10.5H^+$	\rightarrow	$8CO_2 + 5.25H_2S + 5H_2O$	Sulfato
	$C_8H_{10} + 5.5H_2O$	\rightarrow	$2.75CO_2 + 5.25CH_4$	Dióxido de Carbono



Capacidad de Biodegradación

Es la facilidad que tiene el medio (aguas subterráneas y microorganismos) de degradar los compuestos orgánicos, haciendo uso de las reacciones aerobias y anaerobias de oxidación-reducción, mediante el consumo de oxígeno, nitratos, ión férrico, sulfatos y CO₂.

Capacidad de biodegradación (mg/l)=

$$\frac{(O_1 - O_2)}{3,14} + \frac{(N_1 - N_2)}{4,9} + \frac{(S_1 - S_2)}{4,7} + \frac{(Fe)}{21,8} + \frac{(Met)}{0,78}$$

donde:

O_1 = *Concentración de oxígeno aguas arriba de la pluma.*

O_2 = *Concentración de oxígeno en la pluma*

N_1 = *Concentración de nitratos aguas arriba de la pluma*

N_2 = *Concentración de nitratos en la pluma*

S_1 = *Concentración de sulfatos aguas arriba de la pluma*

S_2 = *Concentración de sulfatos en la pluma*

Fe = *Concentración de hierro en la pluma*

Met = *Concentración de metano en la pluma*

3,14 - 4,9 - 4,7 - 21,8 - 0,78 = *Factores estequiométricos*

En las páginas siguientes se muestran los factores estequiométricos para benceno, tolueno, etilbenceno y xileno.

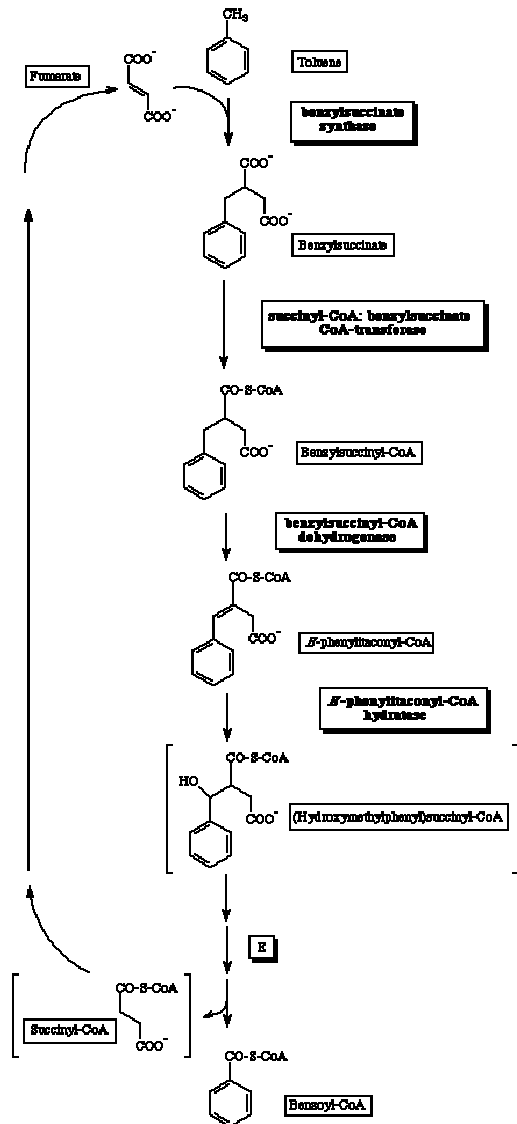
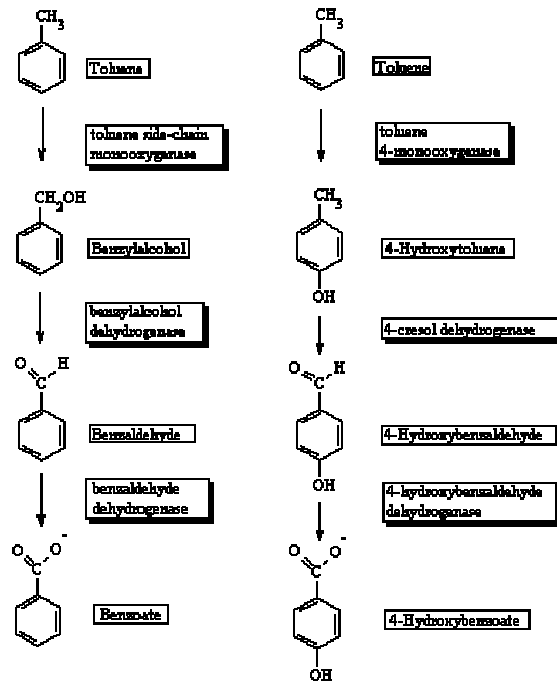
FACTOR ESTEQUIOMÉTRICO PARA BENCENO

Aerobio	$C_6 H_6 + 7.5O_2$	\rightarrow	$6CO_2 + 3H_2 O$	
	1 mol de benceno reacciona con 7,5 moles de oxígeno o (6x12 + 6) gramos de benceno reaccionan con (7.5x32) gramos de oxígeno. 78 gramos de benceno reaccionan con 240 gramos de oxígeno.			
	Factor estequiométrico	=	240/78 =	3.08
Nitratos	$C_6 H_6 + 6H^+ + 6NO_3^-$	\rightarrow	$6CO_2 + 3N_2 + 6H_2 O$	
	1 mol de benceno reacciona con 6 moles de nitrato			
	Factor estequiométrico	=	372.06/78=	4.77
Manganeso	$C_6 H_6 + 15Mn^{4+} + 12H_2O$	\rightarrow	$6CO_2 + 30H^+ + 15Mn^{2+}$	
	1 mol de benceno reacciona con 15 moles de manganeso			
	Factor estequiométrico	=	824.1/78=	10.57
Hierro	$C_6 H_6 + 30Fe^{3+} + 12H_2O$	\rightarrow	$6CO_2 + 30H^+ + 30Fe^{2+}$	
	1 mol de benceno reacciona con 30 moles de ión férrico			
	Factor estequiométrico	=	1675.5/78=	1.48
Sulfatos	$C_6H_6 + 3.75SO_4^{2-} + 7.5H^+$	\rightarrow	$6CO_2 + 3.75H_2 S + 3H_2 O$	
	1 mol de benceno reacciona con 3.75 moles de sulfato			
	Factor estequiométrico	=	360.26/78=	4.62
Dióxido de carbono	$C_6 H_6 + 4.5H_2O$	\rightarrow	$2.25CO_2 + 3.75CH_4$	
	1 mol de benceno reacciona con 3.75 moles de CO2			
	Factor estequiométrico	=	165/78=	2.12

FACTOR ESTEQUIOMÉTRICO CALCULADO PARA TOLUENO

Aerobio	$C_7 H_8 + 9O_2$	\rightarrow	$7CO_2 + 4H_2 O$	
	1 mol de tolueno reacciona con 9 moles de oxígeno o (7x12 + 8) gramos de tolueno reaccionan con (9x32) gramos de oxígeno. 92 gramos de tolueno reaccionan con 288 gramos de oxígeno			
	Factor estequiométrico	=	288/92=	3.13
Nitratos	$C_7 H_8 + 7.2H^+ + 7.2NO_3^-$	\rightarrow	$7CO_2 + 3.6N_2 + 7.6H_2 O$	
	1 mol de tolueno reacciona con 7.2 moles de nitratos			
	Factor estequiométrico	=	446.5/92 =	4.85
Manganeso	$C_7 H_8 + 18Mn^{4+} + 14H_2 O$	\rightarrow	$7CO_2 + 36H^+ + 18Mn^{2+}$	
	1 mol de tolueno reacciona con 18 moles de manganeso			
	Factor estequiométrico	=	988.9/92 =	10.75
Hierro	$C_7 H_8 + 36Fe^{3+} + 14H_2 O$	\rightarrow	$7CO_2 + 36H^+ + 36Fe^{2+}$	
	1 mol de tolueno reacciona con 36 moles de ión férrico			
	Factor estequiométrico	=	2011/92=	21.85
Sulfato	$C_7 H_8 + 4.5SO_4^{2-} + 9H^+$	\rightarrow	$7CO_2 + 4.5H_2S + 4H_2O$	
	1 mol de tolueno reacciona con 4.5 moles de sulfato			
	Factor estequiométrico	=	432.3/92=	4.70
Dióxido de carbono	$C_7 H_8 + 5H_2 O$	\rightarrow	$2.5CO_2 + 4.5CH_4$	
	1 mol de tolueno reacciona con 4.5 moles CO2			
	Factor estequiométrico	=	198/92=	2.15

Modelización Hidrogeológica



Alfred Spormann and Eva Young

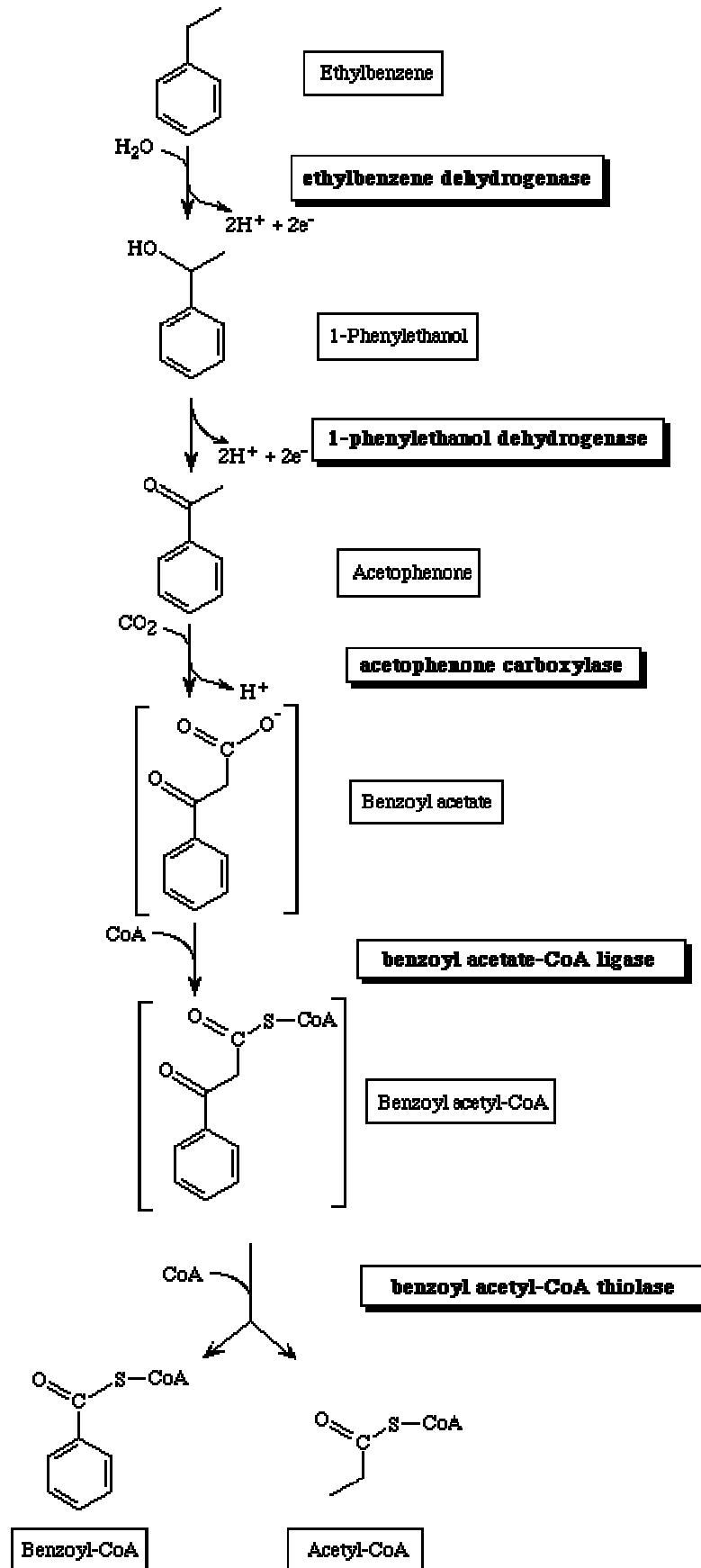
**FACTOR ESTEQUIOMÉTRICO CALCULADO PARA
ETILBENCENO Y XILENO**

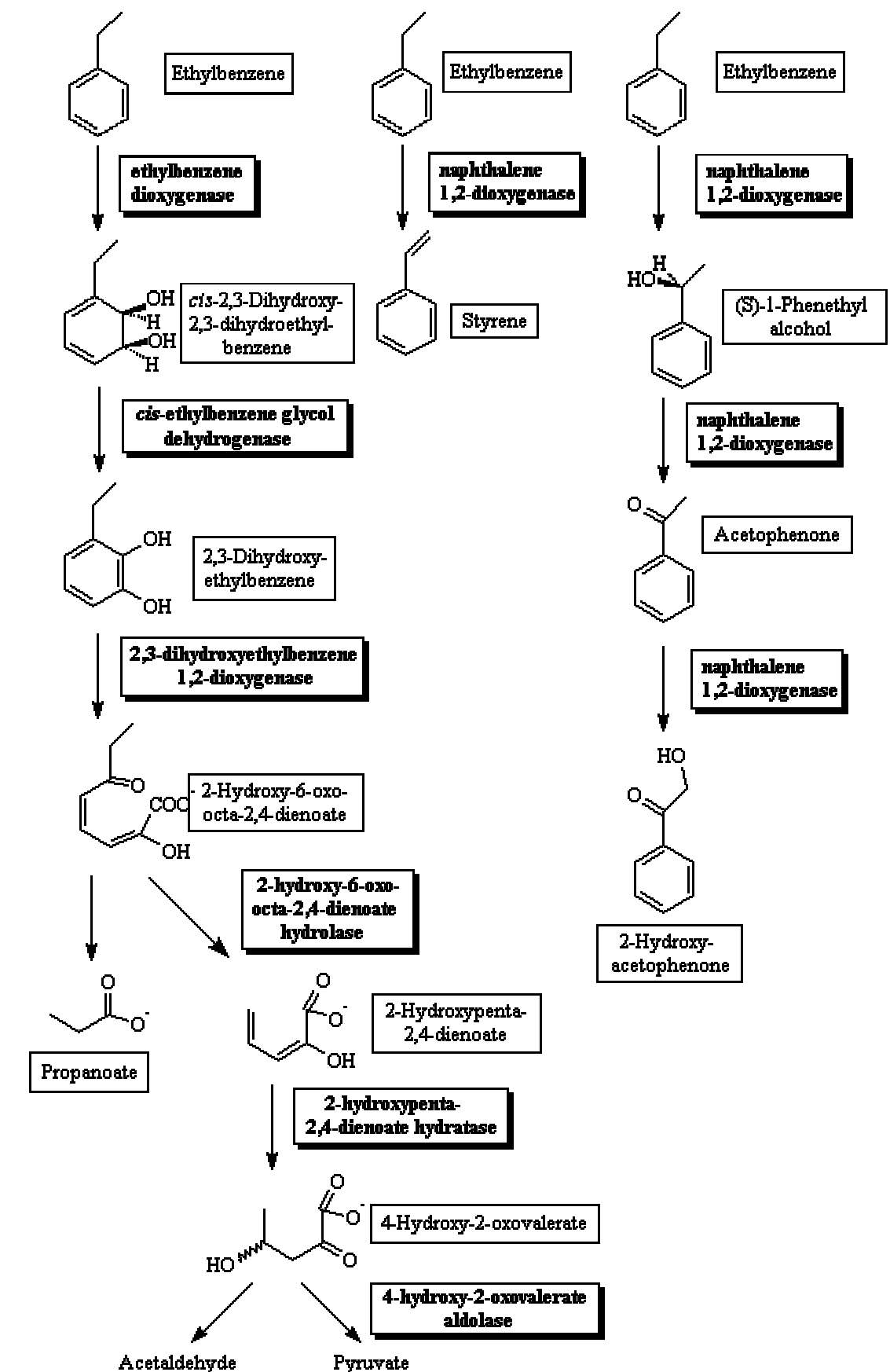
Aerobio	$C_8 H_{10} + 10.5O_2$	\rightarrow	$8CO_2 + 5H_2 O$
	1 mol de etilbenceno y xileno reaccionan con 10.5 moles de oxígeno o $(8 \times 12 + 10)$ gramos de etilbenceno y xileno reaccionan con (10.5×32) gramos de oxígeno 106 gramos de etilbenceno y xileno reaccionan con 336 gramos de oxígeno Factor estequiométrico = $336/106=$ 3.17		
Nitrato	$C_8 H_{10} + 8.4H^+ + 8.4NO_3$	\rightarrow	$8CO_2 + 4.2N_2 + 9.2H_2 O$
	1 mol de etilbenceno y xileno reacciona con 8.4 moles de nitrato Factor estequiométrico = $520.9/106=$ 4.91		
Manganeso	$C_8 H_{10} + 21Mn^{4+} + 16H_2 O$	\rightarrow	$8CO_2 + 42H^+ + 21Mn^{2+}$
	1 mol de etilbenceno y xileno reaccionan con 21 moles de Manganeso Factor estequiométrico = $1154/106=$ 10.89		
Hierro	$C_8 H_{10} + 42Fe^{3+} + 16H_2 O$	\rightarrow	$8CO_2 + 42H^+ + 42Fe^{2+}$
	1 mol de etilbenceno y xileno reaccionan con 42 moles de ión férrico Factor estequiométrico = $2346/106=$ 22.13		
Sulfato	$C_8 H_{10} + 5.25SO_4^{2-} + 10.5H^+$	\rightarrow	$8CO_2 + 5.25H_2 S + 5H_2 O$
	1 mol de etilbenceno y xileno reaccionan con 5.25 moles de sulfato Factor estequiométrico = $504.4/106=$ 4.76		
Dióxido de carbono	$C_8 H_{10} + 5.5H_2 O$	\rightarrow	$2.75CO_2 + 5.25CH_4$
	1 mol de etilbenceno y xileno reaccionan con 5.25 moles de CO2 Factor estequiométrico = $231/106=$ 2.18		

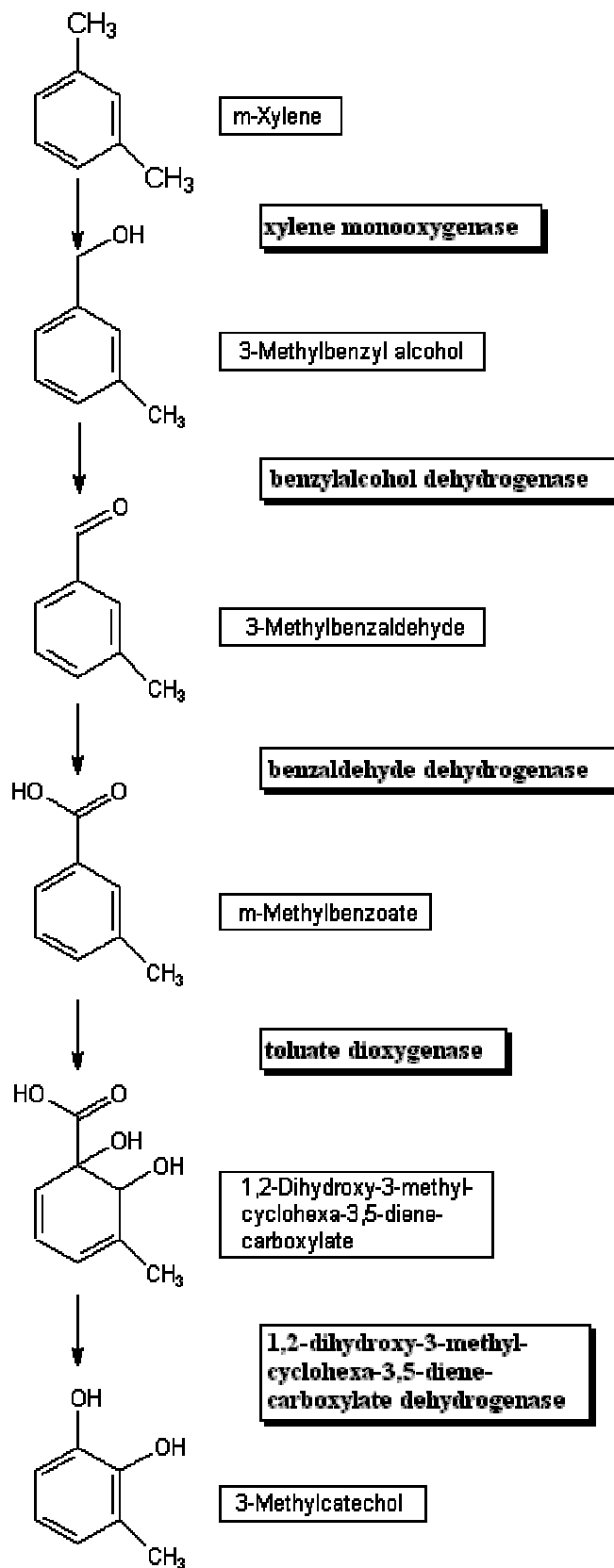
FACTORES ESTEQUIOMÉTRICOS PARA BTEX

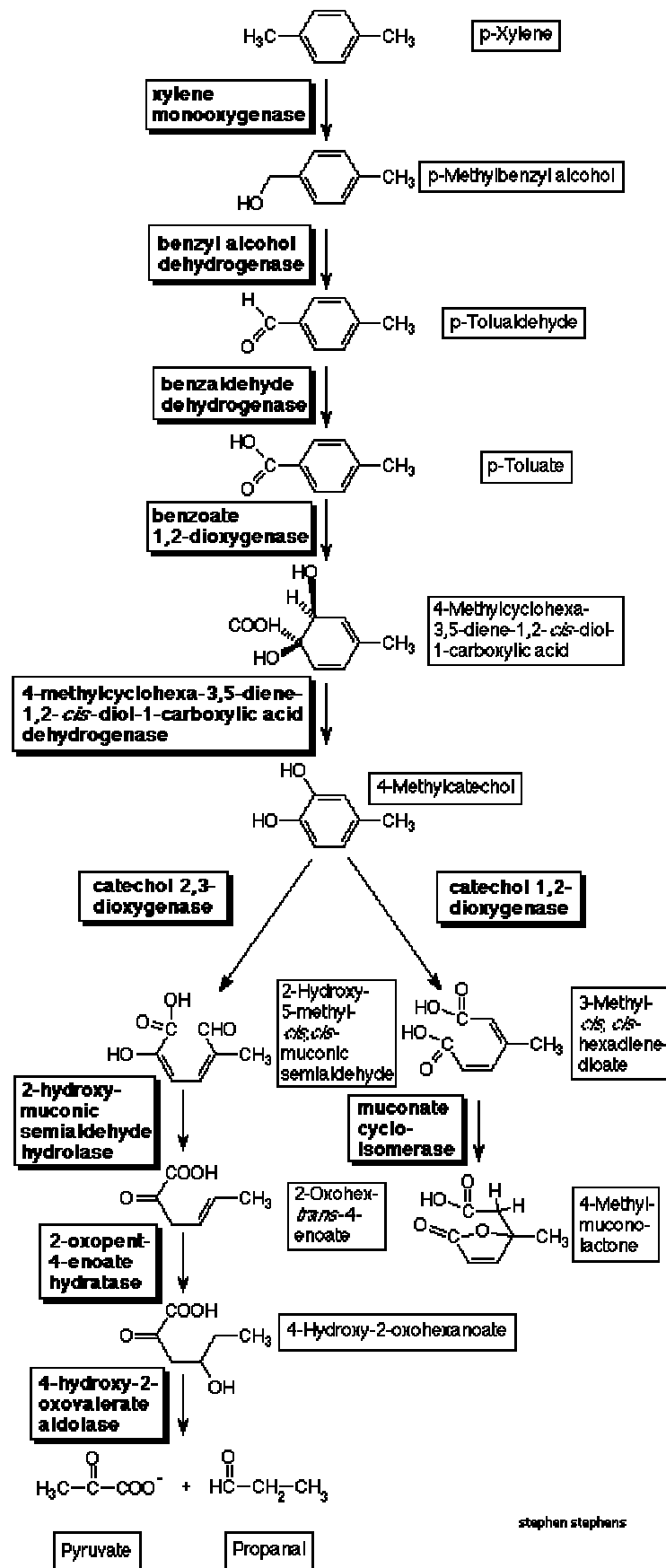
	B	T	E	X	Media 1	Media 2
Aerobio	3.08	3.13	3.17	3.17	3.14	3.15
Nitrato	4.77	4.85	4.91	4.91	4.86	4.88
Manganeso	10.57	10.75	10.89	10.89	10.78	10.82
Hierro	21.48	21.85	22.13	22.13	21.90	22.00
Sulfato	4.62	4.70	4.76	4.76	4.71	4.73
Dióxido de carbono	2.12	2.15	2.18	2.18	2.17	2.17

Notas: Media 1= Media aritmética
Media 2= Media con peso









stephen stephens

3.-MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN GENERAL DEL TRANSPORTE

Existen varios métodos numéricos para dar solución a la ecuación general del transporte de solutos.

Entre ellos:

- Método de las características (MOC).
- Método de las características modificado (MMOC).
- Método híbrido (HMOC).
- Método del algoritmo ULTIMATE(TVD).
- Método de las diferencias finitas (UPSTREAM Y CENTRAL).

3.1.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS (MOC)

Sitúa un número determinado de partículas móviles en cada celda de la malla, con sus coordenadas X, Y. La concentración de cada partícula se define como la concentración del nudo (centro geométrico de una celdilla unidad) de la celda en la que se encuentra.

Para cada paso de tiempo, cada partícula se mueve una distancia proporcional a la velocidad del flujo y a la magnitud del paso de tiempo.

La concentración en cada uno de los nudos, al final de cada paso de tiempo, es igual a la media de las concentraciones de las partículas que hayan hasta la celda.

Ventajas

- Virtualmente libre de dispersión numérica.

Inconvenientes

- Lentitud de cálculo y memoria necesaria.

3.2.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS MODIFICADO (MMOC)

Presenta las siguientes particularidades de concepto:

- Una única partícula por cada celda.
- Se coloca la distribución espacial de concentraciones en el paso de tiempo “t”.
- En el paso de tiempo (t+1) se coloca una partícula en el nudo de cada una de las celdas.
- Se hace retroceder cada partícula, en función del campo de velocidades, hasta el paso de tiempo (t), y asigna la concentración correspondiente a esa posición.
- La concentración en cada celda en el paso (t+1), será igual a la media de las concentraciones de las partículas que lleguen a ella procedentes del paso (t).

Ventajas:

- Método especialmente indicado cuando la distribución de concentraciones es gradual, sin cambios bruscos.

3.3.-MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS HÍBRIDO (HMOC)

Es un método que aplica MOC o MMOC en función del campo de concentraciones, según:

- MOC: cuando hay cambios bruscos de concentraciones (medio heterogéneo)
- MMOC: cuando los cambios de concentración son suavemente graduales (medio homogéneo).

3.4.-MÉTODO DE ALGORITMO ULTIMATE (TVD)

Método basado en el principio de conservación de la masa, que resuelve el término de transporte advectivo de la ecuación general del transporte, mediante el algoritmo “ULTIMATE” (Leonard, 1988).

Suele dar buenos resultados en medios heterogéneos.

3.5.-MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS

Existen dos métodos de cálculo por diferencias finitas:

- Método UPSTREAM
- Método CENTRAL

3.5.1.-Método UPSTREAM

Rápido y útil para resolver problemas en los que no predomina claramente la advección (N° de Peclet <4). Suele dar problemas de convergencia cuando hay cambios bruscos de concentración.

3.5.2.-Método CENTRAL

Basado en el principio de conservación de la masa como el anterior, por lo que puede dar pequeños errores de balances.

No suele dar problemas de dispersión numérica, pero si de convergencia cuando predomina la advección.

4.-MÓDULOS DE PROGRAMAS EXISTENTES EN MODFLOW

El código del programa MODFLOW y su entorno gráfico VISUAL MODFLOW, cuenta con un paquete de subprogramas encaminados a modelizar matemáticamente el transporte de masa.

Estos subprogramas son:

- Módulo MT3D
- Módulo MT3DMS
- Módulo RT3D

4.1.-MÓDULO MT3D

Realiza la simulación de transporte para una sola especie química.

Resuelve la ecuación general de transporte de masa por advección (MOC, MMOC, HMOC, y UPSTREAM), dispersión y reacciones (explícito diferencias finitas) y reacciones (sorción lineal, Freundlich, Langmuir, biodegradación).

4.2.-MÓDULO MT3DMS

Realiza la simulación de transporte para varias especies químicas a la vez.

Resuelve la ecuación general de transporte de masa por advección (MOC, MMOC, HMOC, TVD, UPSTREAM, CENTRAL), dispersión y reacciones (explicito diferencias finitas) y reacciones (equilibrio: sorción lineal, Freundlich y Langmuir, cinéticas: primer orden y doble dominio y degradación: biodegradación).

4.3.-MÓDULO RT3D

Realiza la simulación de transporte para varias especies químicas a la vez y utiliza varios modelos de reacciones químicas de compuestos orgánicos (hidrocarburos).

Resuelve la ecuación general de transporte de masa por advección (MOC, MMOC, HMOC y UPSTREAM), dispersión y reacciones (explicito diferencias finitas), reacciones (sorción lineal, Freundlich y Langmuir de equilibrio y cinéticas: biodegradación aerobia de BTEX, degradación instantánea y limitada de BTEX, sorción de tasa limitada, modelo doble de Monod).