CI61Q

CI61Q/CI71M
PRINCIPIOS DE REMEDIACION Y RESTAURACION

TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN AGUAS SUBTERRANEAS

UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA CIVIL

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS
- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION
- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION
- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE

Existen diversos procesos que permiten describir el movimiento de uno o más contaminantes en un medio poroso saturado. Para un compuesto conservativo en un medio homogéneo se tienen los siguientes procesos:

- Advección
- Difusión
- Dispersión Mecánica

  Difusión y Dispersión Mecánica: Dispersión Hidrodinámica

Si consideramos un medio heterogéneo se agrega el siguiente proceso:

- Macrodispersión

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

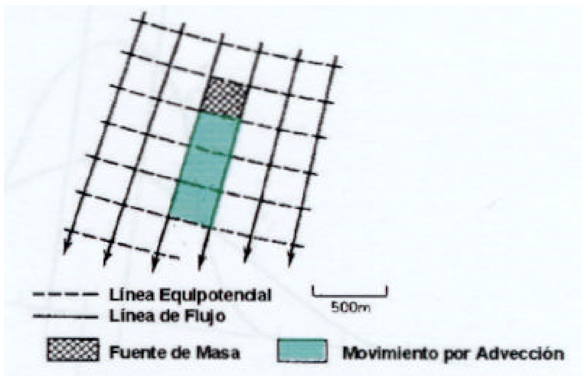
- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION

Sólidos disueltos son llevados junto con el flujo de agua subterránea. Este proceso se denomina **transporte advectivo** o **convectivo**.



CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION

La cantidad de soluto que está siendo transportado es una función de su concentración en el agua subterránea y de la cantidad de agua subterránea que fluye.

$$\boxed{v_x = \frac{K}{n} \cdot \frac{dh}{dl}}$$

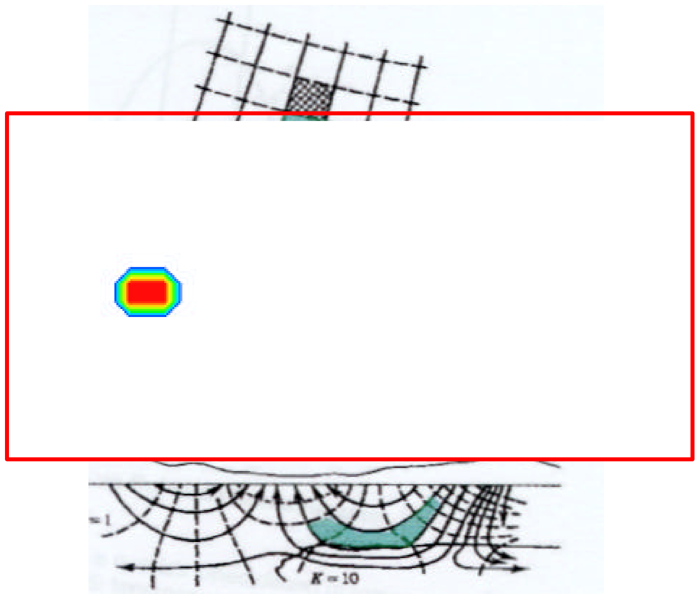
La **velocidad promedio lineal**, v_x, es la velocidad a la cual el agua subterránea se mueve a través de tubos de flujo individuales.

El flujo másico por unidad de área y tiempo (J) queda dado por:

$$\boxed{J_x = v_x \cdot n \cdot C}$$

CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

TRANSPORTE POR DIFUSION

Un soluto en el agua se mueve desde áreas de mayor concentración hacia un área de menor concentración.

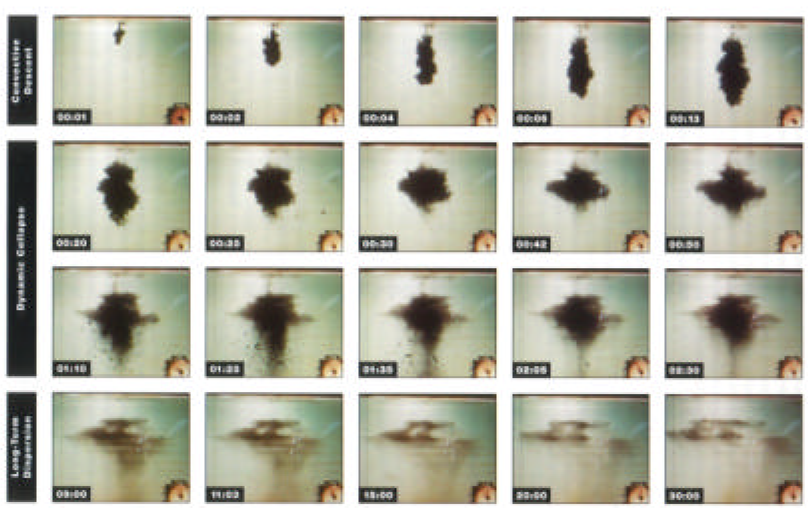
Este proceso se conoce como **difusión molecular**, o simplemente como **difusión**. La masa de fluido que se difunde es proporcional al gradiente de concentración, lo cual se expresa mediante la **primera ley de Fick**.

$$\boxed{J_x = -D_d \cdot \frac{dC}{dx}}$$

Valores de *Dd* son bien conocidos y se encuentran en el rango 1×10^{-9} a 2×10^{-9} m^2/s a 25°C. Estos valores no varían mucho con la concentración, pero dependen de la temperatura.

CI61Q

TRANSPORTE POR DIFUSION



CI61Q

TRANSPORTE POR DIFUSION

En un medio poroso la difusión no ocurre tan rápido como en el agua debido a que los iones deben seguir caminos más largos a través de los granos de suelo. Para tomar en cuenta este hecho, se debe usar un coeficiente de difusión efectivo, D^*:

$$\boxed{D^* = w \cdot D_d}$$

$$\boxed{J_x = -D^* \cdot \frac{dC}{dx}}$$

CI61Q

TRANSPORTE POR DIFUSION

Un soluto en el agua se mueve desde áreas de mayor concentración hacia un área de menor concentración. Este proceso se conoce como **difusión molecular**, o simplemente como **difusión**. La masa de fluido que se difunde es proporcional al gradiente de concentración, lo cual se expresa mediante la **primera ley de Fick**.

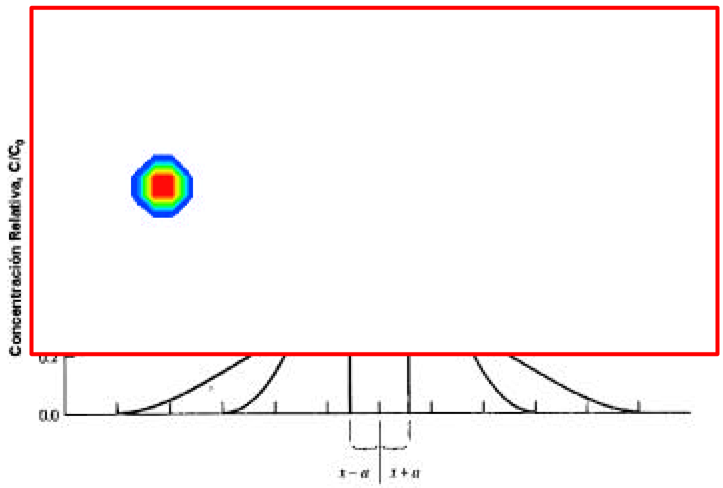
$$\boxed{J_x = -D_d \cdot \frac{dC}{dx}}$$

En un medio poroso la difusión no ocurre tan rápido como en el agua debido a que los iones deben seguir caminos más largos a través de los granos de suelo. Para tomar en cuenta este hecho, se debe usar un coeficiente de difusión efectivo, D^*:

$$\boxed{D^* = w \cdot D_d}$$

CI61Q

TRANSPORTE POR DIFUSION



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

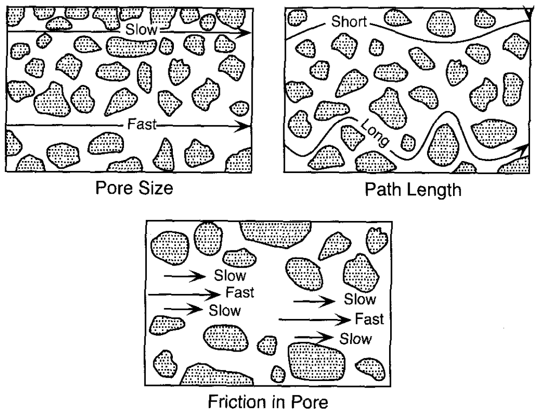
- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA

El agua subterránea se mueve a tasas que son mayores y también menores que la velocidad promedio lineal.



CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA

A un nivel macroscópico - esto es, sobre un dominio que incluya un volumen de agua suficiente para que los efectos de los poros individuales sean promediados - existen tres causas básicas para este fenómeno:

- Algunos poros son mayores que otros, lo que permite que el fluido se mueva más rápido a través de los poros.
- Algunas partículas de fluido se moverán a través de tubos de flujo que son más largos que otros.
- A medida que el fluido se mueve a través de los poros, el movimiento es mayor en el centro de ellos que en sus bordes.

CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA

Si toda el agua subterránea que contiene un soluto viajara a una velocidad exactamente igual se produciría el desplazamiento del agua que no contiene el soluto lo que daría origen a una interface abrupta entre los dos líquidos.

Sin embargo, debido a que el agua no viaja a una velocidad constante se produce un cierto grado de mezcla a través del tubo de flujo. Este proceso de mezcla se conoce como **dispersión mecánica**, y produce dilución del soluto a lo largo del frente de avance. La mezcla que ocurre a lo largo de la dirección del flujo se denomina **dispersión longitudinal**.

CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA

La dispersión mecánica puede ser descrita por una ley similar a la Ley de Fick de difusión:

$$\boxed{J_x = -D_m \cdot \frac{dC}{dx}}$$

La tasa de dispersión mecánica es una función de la velocidad promedio lineal, entonces podemos introducir el coeficiente de dispersión mecánica como:

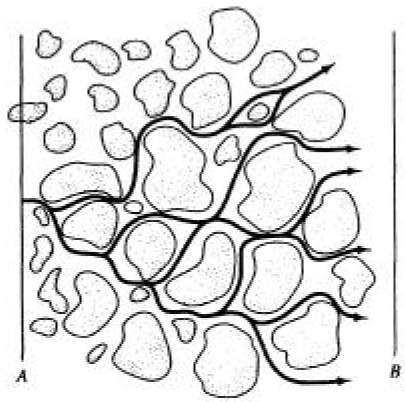
$$\boxed{D_{mL} = a_L \cdot v_i}$$

donde v_i es la velocidad promedio lineal en la dirección i (L/T), y a_L es la dispersividad en la dirección longitudinal (L).

CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA

Un frente de soluto que avanza tiende a dispersarse en direcciones perpendiculares del flujo. El resultado de esta mezcla se denomina **dispersión transversal**.



$$\boxed{D_{mT} = a_T \cdot v_i}$$

$$\boxed{J_y = -D_{mT} \cdot \frac{dC}{dy}}$$

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

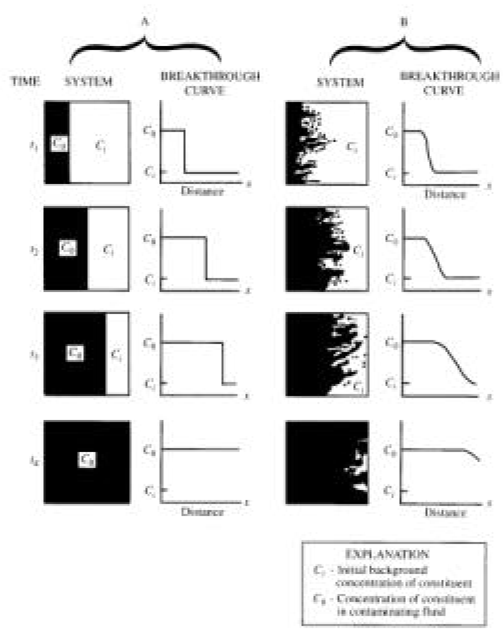
Los procesos de difusión molecular y dispersión mecánica no pueden ser separados en un flujo de agua subterránea. Los dos mecanismos se combinan para definir un parámetro llamado el **coeficiente de dispersión hidrodinámica**, *D*. Este puede ser representado por las siguientes expresiones:

$$\boxed{D_L = a_L \cdot v_i + D^*} \qquad \boxed{D_T = a_T \cdot v_i + D^*}$$

donde D_L es el coeficiente de dispersión hidrodinámica paralelo a la dirección principal de flujo o longitudinal, D_T es el coeficiente de dispersión hidrodinámica perpendicular a la dirección principal de flujo o transversal, a_L es la dispersividad longitudinal, y a_T es la dispersividad transversal.

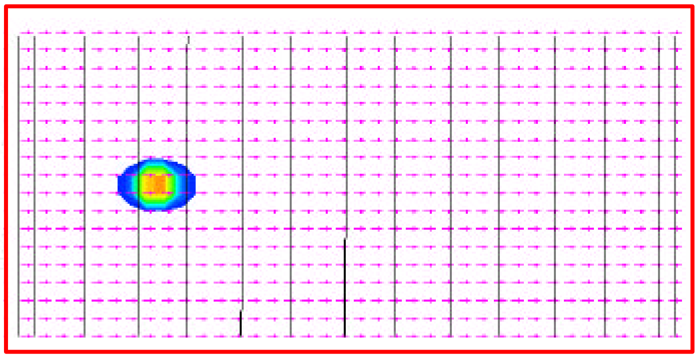
CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION/DISPERSION



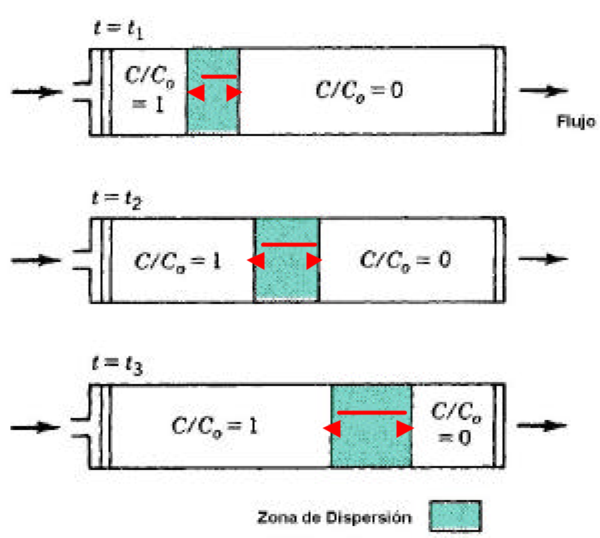
CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION/DISPERSION



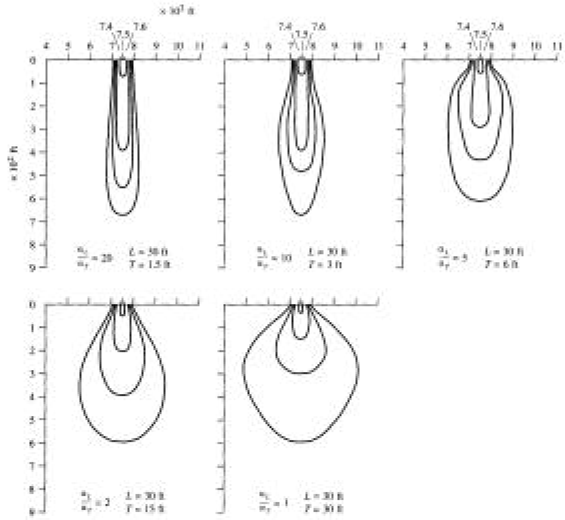
CI61Q

TRANSPORTE POR ADVECCION/DISPERSION



CI61Q

EFECTO DE LA DISPERSION LATERAL



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

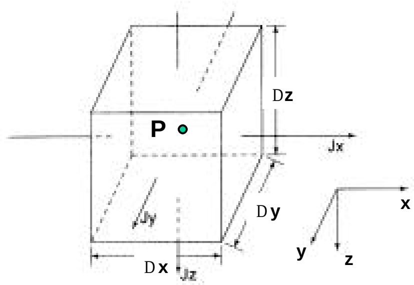
EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

Consideremos un volumen de control rectangular con dimensiones Dx, Dy y Dz, mientras que su centro de masa P se encuentra ubicado en las coordenadas (x,y,z).



$$\boxed{J_i = v_i \cdot n \cdot C - n \cdot D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial i}}$$

CI61Q

La derivación de la ecuación de Adveccion-Dispersión está basada en el trabajo de Freeze and Cherry (1979), Bear (1972) y Ogata (1970). Los supuestos o hipótesis básicas utilizadas en esta derivación son que el acuífero es homogéneo, isotrópico, y saturado. Asimismo, las condiciones de flujo son tales que la ley de Darcy es válida.

El soluto es transportado por advección y dispersión hidrodinámica. En la dirección *i* el transporte de soluto debido al proceso de advección, J_{ADV}, y al de dispersión hidrodinámica, J_{DISP}, queda dado por:

$$\boxed{J_{ADV} = v_i \cdot n \cdot C \, dA} \qquad \boxed{J_{DISP} = -n \cdot D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial i} dA}$$

donde dA es el área transversal del elemento infinitesimal y la dirección *i* es perpendicular a dicha sección.

CI61Q

La masa total de soluto, por unidad de área, que es transportada en la dirección i por unidad de tiempo, J_i, es la suma del flujo advectivo y dispersivo:

$$J_i = v_i \cdot n \cdot C - n \cdot D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial i}$$

La diferencia entre la masa que entra y sale del volumen de control, DJ, queda dada por la siguiente expresión:

$$\Delta J = -\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right) dx\, dy\, dz$$

La tasa a la cual la masa de soluto cambia dentro del volumen de control se puede escribir como:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = n \cdot \frac{\partial C}{\partial t} dx\, dy\, dz$$

CI61Q

La ley de conservación de la masa indica que la tasa a la cual la masa de soluto cambia en el tiempo debe ser igual a la diferencia de masa que entra y sale del volumen de control:

$$-\nabla \cdot \underline{J} = n \cdot \frac{\partial C}{\partial t}$$

Al substituir la expresión del flujo de contaminante se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - v_x \cdot C\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y \cdot \frac{\partial C}{\partial y} - v_y \cdot C\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D_z \cdot \frac{\partial C}{\partial z} - v_z \cdot C\right) = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Si consideramos un sistema de flujo unidimensional, con propiedades homogéneas, podemos escribir:

$$D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

CI61Q

Resolución de un problema de transporte de contaminantes requiere de:

Una ecuación de estado.

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

Condiciones de Borde.

$$\boxed{C(0,t) = C_0 \qquad t > 0}$$

$$\boxed{C(\infty,t) = 0 \qquad t > 0}$$

Condiciones Iniciales.

$$\boxed{C(x,0) = 0 \qquad x > 0}$$

$$\boxed{C(x,t)}$$

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- **TRANSPORTE POR ADVECCION**
- **TRANSPORTE POR DIFUSION**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA**

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

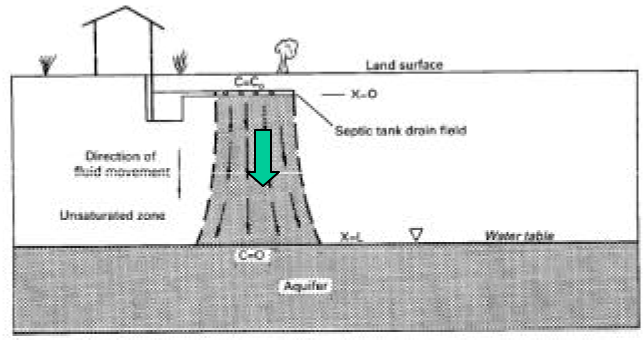
- **SOLUCIONES ANALITICAS 1D**
- **SOLUCIONES ANALITICAS 2D**

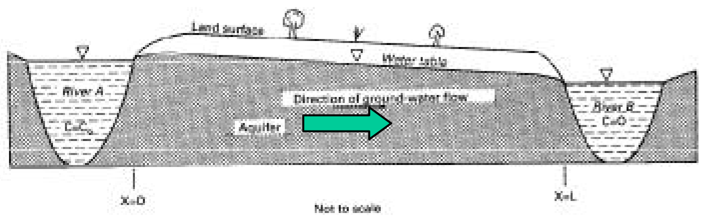
EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- **REACCION DE PRIMER ORDEN**
- **ADSORCION**

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q





CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Primer Tipo)

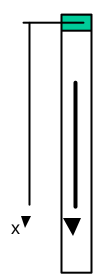
Una solución que contiene un trazador (de color o salino) es incorporada en forma instantánea a una columna de arena en lugar de agua pura, y se mantiene a través del tiempo. El siguiente conjunto de ecuaciones representa la inyección continua de contaminante:

$$\boxed{D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

$$\boxed{C(x,0) = 0 \qquad x > 0}$$

$$\boxed{C(0,t) = C_0 \qquad t > 0}$$

$$\boxed{C(\infty,t) = 0 \qquad t > 0}$$



Columna Unidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Primer Tipo)

La solución al problema anterior queda representada por:

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\cdot\left[erfc\left(\frac{x-v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{D_x\cdot t}}\right)+\exp\left(\frac{v_x\cdot x}{D_x}\right)\cdot erfc\left(\frac{x+v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{D_x\cdot t}}\right)\right]$$

donde:

$$erfc(x)=1-erf(x)=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot\int_0^x e^{-u^2}du$$

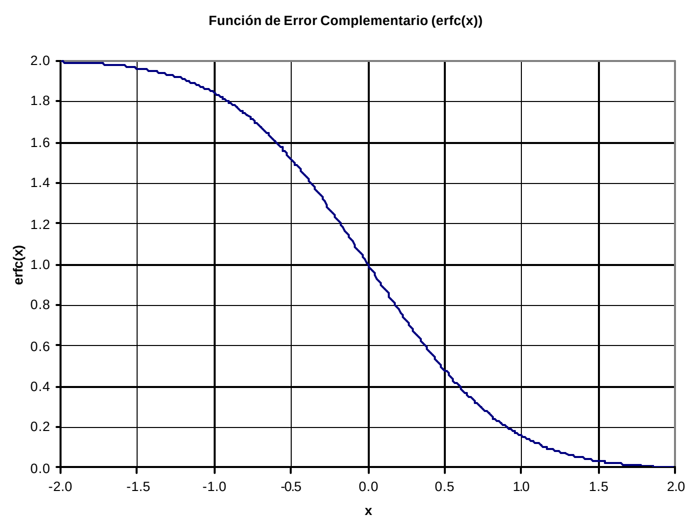
Para muchos problemas prácticos la solución anterior queda:

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\cdot erfc\left(\frac{x-v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{D_x\cdot t}}\right)$$

Ogata y Banks (1961)

Función de Error: ferc(x) o erfc(x)

$$erfc(x)=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot\int_0^x e^{-t^2}\,dt$$



CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante (Pulso de Contaminante)

Si se realiza una inyección instantánea de contaminante se producirá un avance gradual de éste, el cual será afectado por un proceso de dispersión hidrodinámica. La ecuación diferencial que describe este problema, junto a las condiciones de borde e iniciales, es la siguiente:

$$\boxed{D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

$$\boxed{C(x,0) = C_0 \cdot d(x)}$$

$$\boxed{C(-\infty,t) = 0 \qquad t > 0}$$

$$\boxed{C(\infty,t) = 0 \qquad t > 0}$$

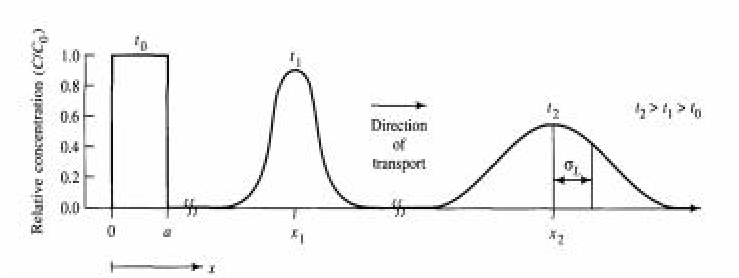
CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante (Pulso de Contaminante)

La solución al problema anterior queda representada por:

$$\boxed{C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{2 \cdot p \cdot D_x \cdot t}} \cdot \exp\left(- \frac{(x + v_x \cdot t)^2}{4 \cdot D_x \cdot t} \right)}$$

donde *M* es la masa inyectada por unidad de área



PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

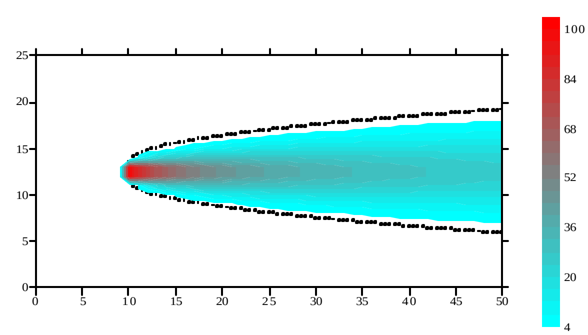
EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

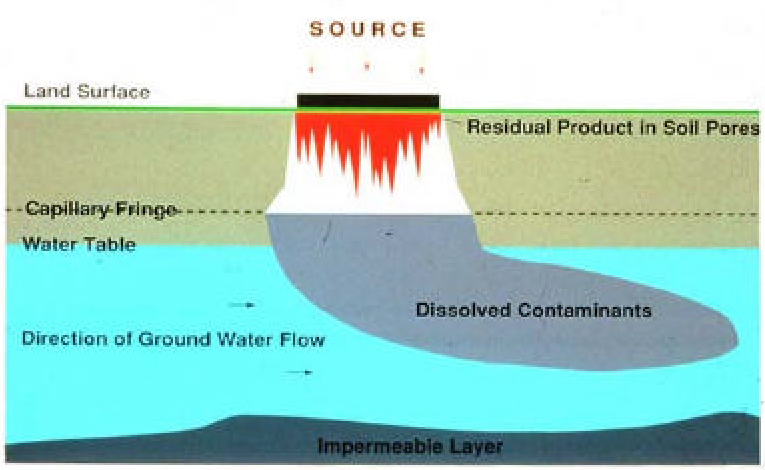
Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)

Si el trazador o contaminante se inyecta en forma continua en un flujo uniforme se formará una pluma de contaminante, la que a medida que se mueve a través del medio poroso se dispersa en las direcciones longitudinal y transversal.



CI61Q

Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)



CI61Q

Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)

Para este análisis se supone que la fuente de contaminante se encuentra en un punto ubicado en el origen (x = 0, y = 0), y el acuífero se caracteriza por un flujo uniforme, v_x, orientado en la dirección x. Existe una inyección continua de contaminante con una concentración C_0 y a una tasa Q.

$$\boxed{D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

Condiciones iniciales:

$$\boxed{C(x,y,0) = 0 \qquad -\infty < x < \infty \qquad -\infty < y < \infty}$$

CI61Q

Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)

Para este análisis se supone que la fuente de contaminante se encuentra en un punto ubicado en el origen (x = 0, y = 0), y el acuífero se caracteriza por un flujo uniforme, v_x, orientado en la dirección x. Existe una inyección continua de contaminante con una concentración C_0 y a una tasa Q.

$$\boxed{D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-v_x\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial t}}$$

Condiciones de borde:

$$\boxed{\left(-D_L\cdot\frac{\partial C}{\partial x}+v_x\cdot C\right)\bigg|_{x=0,y=0}=C_0\cdot Q \qquad t>0}$$

$$\boxed{C(-\infty,y,t)=C(\infty,y,t)=C(x,\infty,t)=C(x,-\infty,t)=0 \qquad t>0}$$

CI61Q

Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)

Este problema fue resuelto por Bear (1972) para una condición estacionaria, en la cual el crecimiento de la pluma se ha estabilizado. Esta solución tiene la siguiente expresión:

$$\boxed{C(x,y)=\frac{C_0\cdot Q}{2\cdot p\cdot\sqrt{D_L\cdot D_T}}\cdot\exp\left(\frac{v_x\cdot x}{2\cdot D_L\cdot D_T}\right)\cdot K_0(B)}$$

donde $K_0(x)$ es la función de Bessel modificada de segundo tipo y orden cero. El argumento B está dado por:

$$\boxed{B=\sqrt{\frac{v_x^2}{4\cdot D_L}}\cdot\sqrt{\frac{x^2}{D_L}+\frac{y^2}{D_T}}}$$

Bear (1972)

Sistema Bidimensional, Inyección Continua de Contaminante (Condición de Borde de Tercer Tipo)

Una solución para este mismo problema pero en régimen transiente fue obtenida por Y. Ensellem (1975).

Esta solución tiene la siguiente expresión:

$$C(x,y,t)=\frac{C_0\cdot Q}{2\cdot p\cdot\sqrt{D_L\cdot D_T}}\cdot\exp\left(\frac{v_x\cdot x}{2\cdot D_L\cdot D_T}\right)\cdot\left(W(0,B)-W(t,B)\right)$$

donde *W(t,B)* es la función de pozo derivada por Hantush.

Y. Ensellem (1975)

Sistema Bidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante (Pulso de Contaminante)

Si se produce la inyección instantánea de contaminante en un sistema acuífero homogéneo, con un campo de velocidad uniforme el cual se orienta en la dirección x, el problema se puede representar mediante la siguiente ecuación:

$$D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-v_x\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial t}$$

$$C(x,y,0)=0 \qquad -\infty<x<\infty \qquad -\infty<y<\infty$$

$$C(x,y,0)=C_0\cdot d(x-x_0,y-y_0)$$

$$C(-\infty,y,t)=C(\infty,y,t)=C(x,\infty,t)=C(x,-\infty,t)=0 \qquad t>0$$

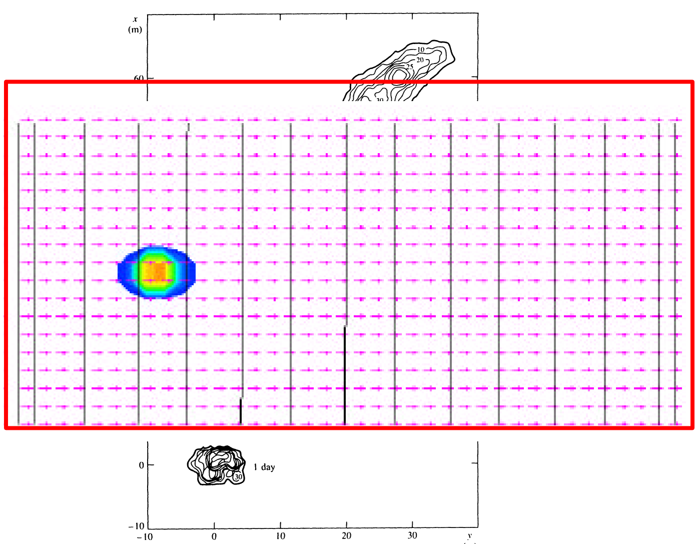
Sistema Bidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante (Pulso de Contaminante)

La solución de este problema fue obtenida por De Josselin De Jong (1958), considerando que la inyección se produce en el punto de coordenadas *x=x0* e *y=y0*.

$$C(x,y,t)=\frac{C_0\cdot A}{2\cdot p\cdot t\cdot\sqrt{D_L\cdot D_T}}\cdot\exp\left(-\frac{(x+v_x\cdot t-x_0)^2}{4\cdot D_L\cdot t}-\frac{(y-y_0)^2}{4\cdot D_T\cdot t}\right)$$

De Josselin De Jong (1958)

DESCARGA INSTANTANEA



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- **TRANSPORTE POR ADVECCION**
- **TRANSPORTE POR DIFUSION**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA**

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- **SOLUCIONES ANALITICAS 1D**
- **SOLUCIONES ANALITICAS 2D**

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- **REACCION DE PRIMER ORDEN**
- **ADSORCION**

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

Las ecuaciones presentadas hasta este punto describen los procesos de advección, dispersión mecánica y difusión.

Si existen reacciones químicas o biológicas, la ecuación básica debe ser modificada agregando términos que incluyan la existencia de fuentes o sumideros.

El esquema de balance de masas que describe esta nueva condición es:

$$\begin{array}{c} \textit{Cambio en el} \\ \textit{almacenamiento} \\ \textit{de masa} \end{array} = \begin{array}{c} \textit{masa} \\ \textit{que} \\ \textit{entra} \end{array} - \begin{array}{c} \textit{masa} \\ \textit{que} \\ \textit{sale} \end{array} \pm \begin{array}{c} \textit{masa} \\ \textit{producida o} \\ \textit{consumida} \end{array}$$

CI61Q

En el caso del problema de transporte de una sustancia contaminante no conservativa, es decir que es afectada por reacciones químicas, se puede escribir como una modificación de la ecuación de Advección-Dispersión:

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \pm \frac{r}{n} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

donde *r* representa la masa producida o consumida por unidad de volumen y unidad de tiempo, y *n* es la porosidad. La ecuación anterior se conoce comúnmente como ecuación de Advección-Dispersión-Reacción.

CI61Q

CI61Q

REACCIONES CINETICAS DE PRIMER ORDEN

Ejemplos de una reacción cinética de primer orden son el decaimiento radioactivo y la biodegradación. Esta reacción se puede escribir como:

$$r = \frac{d(n \cdot C)}{dt} = -l \cdot n \cdot C$$

donde l es la constante de decaimiento de primer orden, la que tiene unidades de tiempo^{-1}. Con esta reacción la ecuación de transporte reactivo (Advección-Dispersión-Reacción) se puede escribir como:

$$D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - l \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t}$$

CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante con Decaimiento Lineal (Pulso de Contaminante)

Si se realiza una inyección instantánea de contaminante se producirá un avance gradual de éste, el cual será afectado por un proceso de decaimiento. La ecuación diferencial que describe este problema, junto a las condiciones de borde e iniciales, es la siguiente:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - l \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t}$$

$$C(x,0) = C_0 \cdot d(x)$$

$$C(-\infty,t) = 0 \qquad t > 0$$

$$C(\infty,t) = 0 \qquad t > 0$$

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea de Contaminante con Decaimiento Lineal (Pulso de Contaminante)

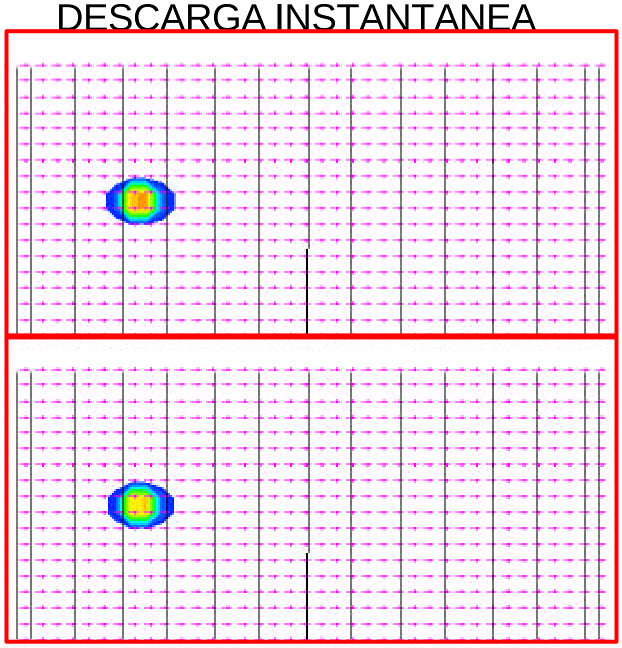
La solución al problema anterior queda representada por:

$$C(x,t)=\frac{M}{\sqrt{2\cdot p\cdot D_x\cdot t}}\cdot\exp\left(-\frac{(x+v_x\cdot t)^2}{4\cdot D_x\cdot t}\right)\cdot\exp(-l\cdot t)$$

donde *M* es la masa inyectada por unidad de área

CI61Q

DESCARGA INSTANTANEA



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

REACCIONES DE ADSORCION EN EQUILIBRIO

Otro ejemplo de reacciones químicas que ocurren durante el movimiento o transporte de un soluto a través de un medio poroso permeable es la incorporación de parte de esta masa en los granos de suelo. Este proceso se conoce como **adsorción** y puede ser modelado en la siguiente forma:

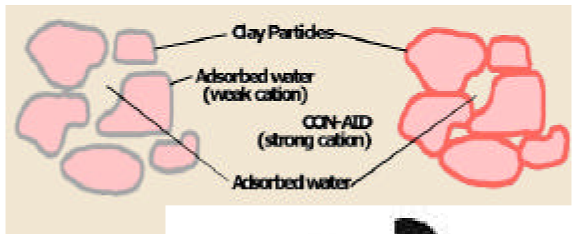
$$\boxed{r = \frac{\partial C^*}{\partial t}}$$

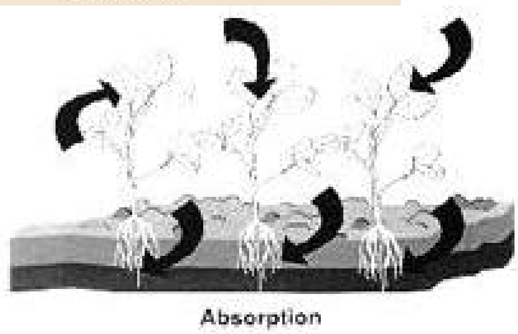
donde C^* es la concentración de soluto en la fase sólida. Al sustituir la ecuación anterior en la ecuación de transporte se obtiene la siguiente expresión:

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{n} \cdot \frac{\partial C^*}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

CI61Q

REACCIONES DE ADSORCION EN EQUILIBRIO





CI61Q

REACCIONES DE ADSORCION EN EQUILIBRIO

En condiciones de equilibrio el proceso de adsorción queda representado por las **isotermas de equilibrio**, las que relacionan la concentración de soluto en la fase líquida con la concentración de soluto en la fase sólida del medio poroso:

$$\boxed{C^* = f(C)}$$

Si se define la concentración *S* como la masa de soluto adsorbida en la superficie de los granos de suelo, se puede relacionar con la cantidad C^* por medio de la siguiente expresión:

$$\boxed{C^* = S \cdot r_b = S \cdot r_S \cdot (1-n)}$$

donde r_S es la densidad de los minerales que forman la roca o suelo, normalmente 2.65 g/cm^3 para muchos suelos arenosos.

CI61Q

Existen una serie de modelos que permiten representar isotermas de equilibrio:

Isoterma Lineal $\boxed{S = K_d \cdot C}$

donde K_d se conoce como el coeficiente de distribución.

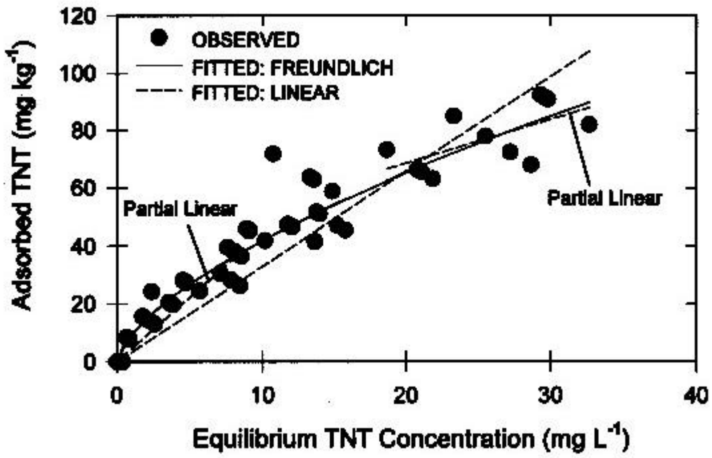
Isoterma de Freundlich $\boxed{S = k \cdot C^n}$

con k y n dos constantes, e,

Isoterma de Langmuir $\boxed{S = \frac{k_F \cdot C \cdot S_{MAX}}{k_R + k_F \cdot C}}$

con k_F, k_R y S_{MAX} constantes.

CI61Q



CI61Q

Si se utiliza la isoterma lineal para representar el proceso de adsorción, se obtiene la siguiente expresión:

$$\boxed{\frac{\partial C^*}{\partial t} = K_d \cdot r_S \cdot (1-n) \cdot \frac{\partial C}{\partial t}}$$

Al reemplazar esta expresión en la ecuación de transporte y reordenar se obtiene:

$$\boxed{D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \left(1 + K_d \cdot r_S \cdot \frac{1-n}{n}\right) \cdot \frac{\partial C}{\partial t}}$$

La cantidad entre paréntesis se conoce como el coeficiente de retardación, *R*, el cual se escribe de la siguiente forma:

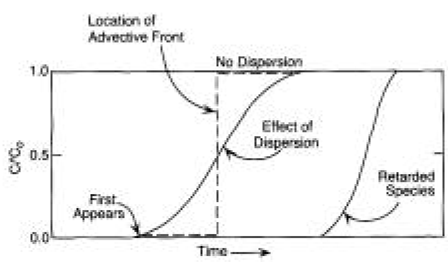
$$\boxed{R = 1 + K_d \cdot r_S \cdot \frac{1-n}{n}}$$

CI61Q

Al substituir la expresión del coeficiente de retardación, *R*, en la ecuación diferencial se obtiene:

$$\boxed{\frac{D_x}{R} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{v_x}{R} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}}$$

Tal como se observa en la ecuación, el efecto principal de la adsorción es producir un retardo o demora del contaminante con respecto a uno conservativo.



CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea y Continua de Contaminante que se Adsorbe siguiendo una Isoterma Lineal (Condición de Borde de Primer Tipo)

El siguiente conjunto de ecuaciones representa la inyección continua de este trazador que es adsorbido por el medio poroso siguiendo una isoterma lineal:

$$\boxed{\frac{D_x}{R}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-\frac{v_x}{R}\cdot\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial t}}$$

$$\boxed{C(x,0)=0 \qquad x>0}$$

$$\boxed{C(0,t)=C_0 \qquad t>0}$$

$$\boxed{C(\infty,t)=0 \qquad t>0}$$

CI61Q

Columna Unidimensional, Inyección Instantánea y Continua de Contaminante que se Adsorbe siguiendo una Isoterma Lineal (Condición de Borde de Primer Tipo)

La solución al problema anterior queda representada por:

$$\boxed{C(x,t)=\frac{C_0}{2}\cdot\left[erfc\left(\frac{R\cdot x-v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{R\cdot D_x\cdot t}}\right)+\exp\left(\frac{v_x\cdot x}{D_x}\right)\cdot erfc\left(\frac{R\cdot x+v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{R\cdot D_x\cdot t}}\right)\right]}$$

donde:

$$\boxed{erfc(x)=1-erf(x)=1-\frac{2}{\sqrt{p}}\cdot\int_0^x e^{-u^2}\,du}$$

Para muchos problemas prácticos la solución anterior queda:

$$\boxed{C(x,t)=\frac{C_0}{2}\cdot erfc\left(\frac{R\cdot x-v_x\cdot t}{2\cdot\sqrt{R\cdot D_x\cdot t}}\right)}$$

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- **TRANSPORTE POR ADVECCION**
- **TRANSPORTE POR DIFUSION**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA**

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- **SOLUCIONES ANALITICAS 1D**
- **SOLUCIONES ANALITICAS 2D**

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- **REACCION DE PRIMER ORDEN**
- **ADSORCION**

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

Para aplicar las diferentes soluciones para los problemas de transporte de contaminantes, ya sean estos en 1D, 2D o 3D, se requiere el conocimiento de dos parámetros básicos: la velocidad de escurrimiento y el coeficiente de dispersión.

La velocidad de escurrimiento se obtiene a partir de datos de conductividad hidráulica, gradientes hidráulicos y porosidad de la formación acuífera.

El coeficiente de dispersión requiere el desarrollo de experiencias específicas a partir de las cuales se pueda estimar.

Generalmente en las experiencias de laboratorio se estima el coeficiente de dispersión, D, o el coeficiente de dispersividad, α.

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- **TRANSPORTE POR ADVECCION**
- **TRANSPORTE POR DIFUSION**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA**

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- **SOLUCIONES ANALITICAS 1D**
- **SOLUCIONES ANALITICAS 2D**

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- **REACCION DE PRIMER ORDEN**
- **ADSORCION**

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

Las técnicas para estimar dispersividad pueden ser englobadas en tres grandes grupos:

–**LABORATORIO:** trazadores (color, salinos, radioactivos) son incorporados en columnas de suelo para evaluar el coeficiente de dispersión mediante la comparación de soluciones analíticas para casos simples.

–**TERRENO:** uso de un pozo único (de inyección y bombeo) para inducir un escurrimiento controlado e incorporar un trazador. Uso de soluciones analíticas adecuadas permite estimar valor de este coeficiente.

–**BIBLIOGRÁFICAS (EFECTO ESCALA):** uso de información bibliográfica para estimar coeficiente de dispersión a partir de bases de datos. Util en el caso de no disponer de otros datos.

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

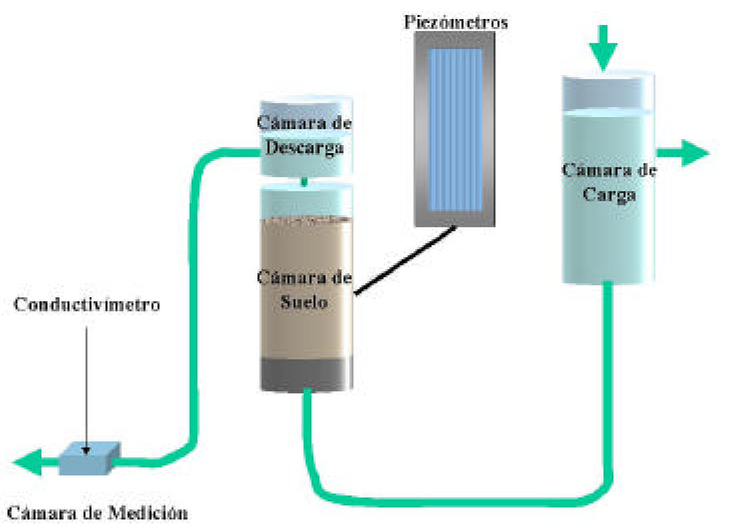
- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

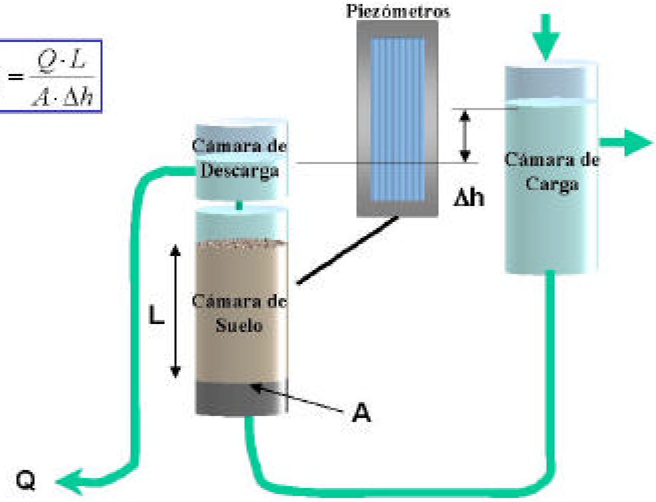
CI61Q



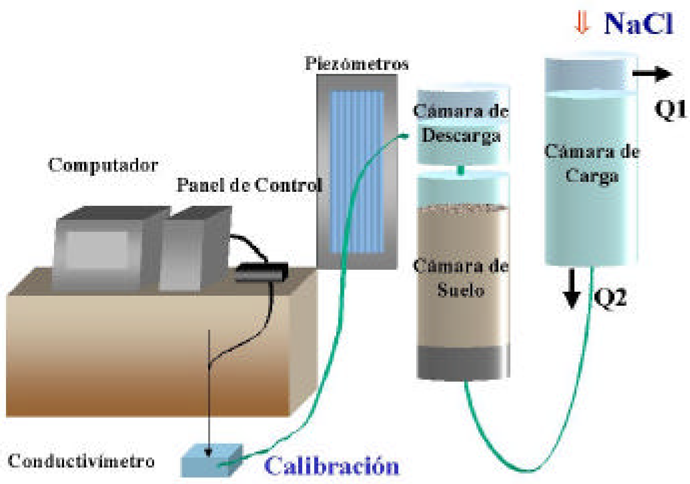
TECNICAS DE LABORATORIO

CI61Q

$$K = \frac{Q \cdot L}{A \cdot \Delta h}$$



CI61Q



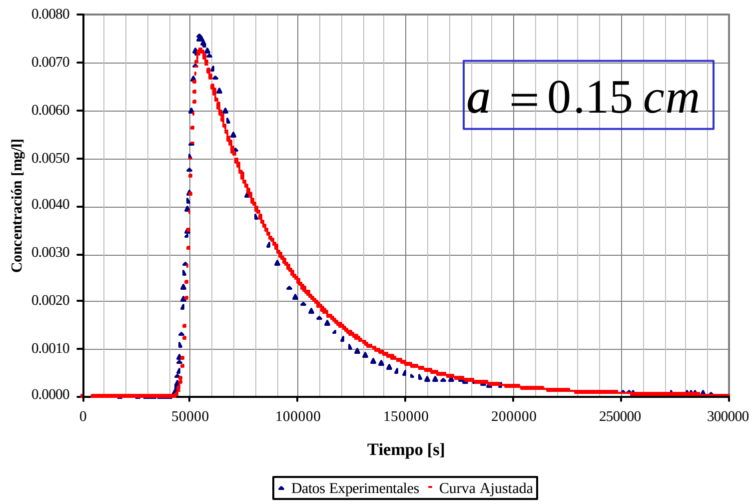
CI61Q

TECNICAS DE LABORATORIO

CI61Q

TECNICAS DE LABORATORIO

CI61Q



TECNICAS DE LABORATORIO

CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- **TRANSPORTE POR ADVECCION**
- **TRANSPORTE POR DIFUSION**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA**
- **TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA**

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

- **SOLUCIONES ANALITICAS 1D**
- **SOLUCIONES ANALITICAS 2D**

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- **REACCION DE PRIMER ORDEN**
- **ADSORCION**

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q

Se utiliza un pozo en el cual se inyecta agua que contiene un contaminante conservativo.

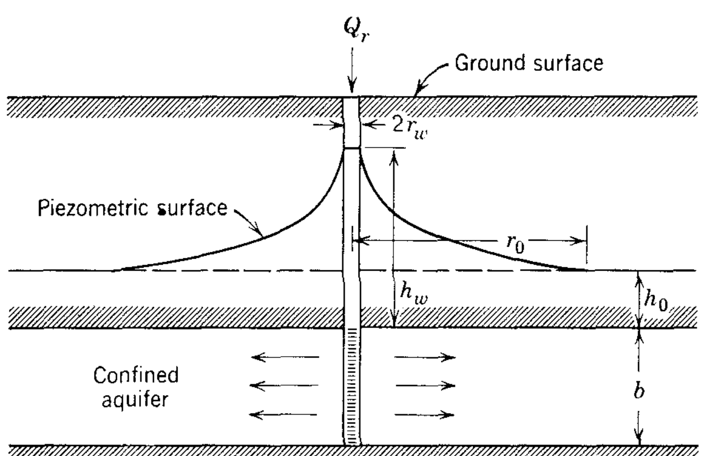
Durante un tiempo definido, T_{INY}, se inyecta un trazador conservativo al interior del acuífero. Pasado ese tiempo se comienza a extraer agua a una tasa constante.

Para este análisis se define R_F como la posición del frente de avance del agua inyectada, al final del período de inyección:

$$\boxed{R_F = \left(\frac{Q \cdot T_{INY}}{p \cdot b \cdot n}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

donde Q es la tasa de inyección, T_{INY} es el tiempo total de inyección, b es el espesor del acuífero, y n es la porosidad.

CI61Q



(a)

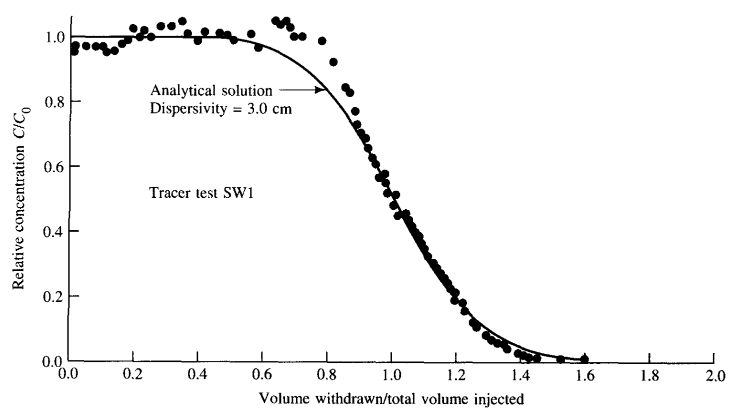
La ecuación diferencial que describe este problema fue derivada y resuelta por Hoopes y Harleman (1967):

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t}+u\cdot\frac{\partial C}{\partial r}=a_L\cdot u\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}+\frac{D^*}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\cdot\frac{\partial C}{\partial r}\right)}$$

La solución de este problema se obtuvo al despreciar el efecto de la difusión molecular, al ser ésta mucho más pequeña que la dispersión mecánica.

$$\boxed{\frac{C}{C_0}=\frac{1}{2}\cdot erfc\left(\frac{(U_p-U_i)-1}{\left\{\frac{16}{3}\cdot\frac{a_L}{R_F}\cdot\left(2-\left[1-\frac{U_p}{U_i}\right]\right)^{1/2}\cdot\left(1-\frac{U_p}{U_i}\right)\right\}^{1/2}}\right)}$$

donde U_p es el volumen de agua extraido durante un tiempo definido, U_i es el volumen de agua inyectada durante la experiencia



CI61Q

PROCESOS DE TRANSPORTE DE MASAS

- TRANSPORTE POR ADVECCION
- TRANSPORTE POR DIFUSION
- TRANSPORTE POR DISPERSION MECANICA
- TRANSPORTE POR DISPERSION HIDRODINAMICA

DERIVACION ECUACION DE TRANSPORTE

EC. ADVECCION-DISPERSION

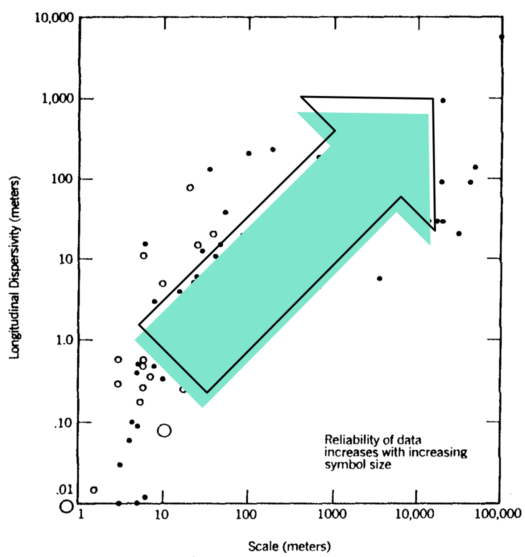
- SOLUCIONES ANALITICAS 1D
- SOLUCIONES ANALITICAS 2D

EC. ADVECCION-DISPERSION-REACCION

- REACCION DE PRIMER ORDEN
- ADSORCION

DETERMINACION DE DISPERSIVIDAD

CI61Q



INFORMACION BIBLIOGRAFICA