

ECUACIONES BASICAS DE FLUJO Y TRANSPORTE EN AGUAS SUBTERRANEAS

CI71D Modelación Numérica en Ingeniería Hidráulica y Ambiental

Profs. C. Espinoza y Y. Niño
Semestre Primavera 2001

Este apunte incluye la derivación de las ecuaciones básicas que describen el escurrimiento de agua a través de un medio poroso, así como también una revisión de algunos métodos utilizados para la resolución de dichas ecuaciones.

1. CONSERVACION DE MASA PARA FLUJO EN UN MEDIO SATURADO

Consideremos un volumen de control rectangular como el que se muestra en la Figura 1. Este volumen de control tiene dimensiones Δx , Δy y Δz , mientras que su centro de masa P se encuentra ubicado en las coordenadas (x,y,z) .

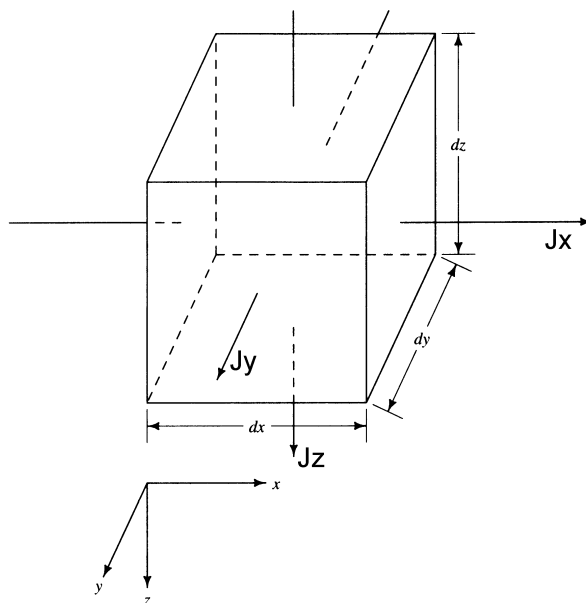


Figura 1 Volumen de Control

Si no existen fuentes o sumideros dentro del área de control, la conservación de la masa establece:

$$\begin{array}{l} \text{El flujo neto de fluido en el área de} \\ \text{control,} \\ G_T \end{array} = \begin{array}{l} \text{tasa de cambio de la masa de fluido} \\ \text{dentro del volumen de control,} \\ \frac{\partial M}{\partial t} \end{array}$$

Supongamos que el vector \underline{J} representa el flujo de masa (masa por unidad de área y tiempo) de agua con densidad ρ en el punto $P(x,y,z)$. Entonces:

$$\underline{J} = \rho \cdot \underline{v} \quad (1)$$

donde \underline{v} es el vector de descarga específica.

Si nos referimos a la Figura 1, el flujo neto de masa en la dirección x, G_x , se puede escribir como:

$$G_x = \left(J_x \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y, z} - J_x \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y, z} \right) \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (2)$$

En forma similar, en las direcciones y y z podemos escribir:

$$G_y = \left(J_y \Big|_{x, y-\frac{\Delta y}{2}, z} - J_y \Big|_{x, y+\frac{\Delta y}{2}, z} \right) \cdot \Delta x \cdot \Delta z \quad (3)$$

$$G_z = \left(J_z \Big|_{x, y, z-\frac{\Delta z}{2}} - J_z \Big|_{x, y, z+\frac{\Delta z}{2}} \right) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4)$$

El flujo neto de masa dentro del área de control, G_T , está dado por la suma de las cantidades mostradas en las ecuaciones (2), (3) y (4); esto es:

$$G_T = \left(J_x \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y, z} - J_x \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y, z} \right) \cdot \Delta y \cdot \Delta z + \left(J_y \Big|_{x, y-\frac{\Delta y}{2}, z} - J_y \Big|_{x, y+\frac{\Delta y}{2}, z} \right) \cdot \Delta x \cdot \Delta z + \left(J_z \Big|_{x, y, z-\frac{\Delta z}{2}} - J_z \Big|_{x, y, z+\frac{\Delta z}{2}} \right) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (5)$$

La masa de fluido almacenada dentro del volumen de control está dada por la densidad del fluido, la porosidad del medio y las características geométricas de éste, i.e:

$$M = \rho \cdot n \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (6)$$

Dado que las dimensiones del volumen de control se mantienen fijas en el tiempo, la tasa temporal de cambio de la masa almacenada dentro de éste es:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot n) \quad (7)$$

Una forma alternativa de expresar la tasa de variación temporal de la masa almacenada dentro del volumen de control puede ser derivada a partir de la definición del almacenamiento específico, S_s . Recordemos la definición de S_s :

$$S_s = \frac{\Delta V_w}{V_T \cdot \Delta h} \quad (8)$$

donde ΔV_w es el cambio en el volumen de agua liberado por un volumen de acuífero V_T cuando

la carga hidráulica cambia en un Δh . De esta forma, la tasa de variación temporal de la masa almacenada dentro del volumen de control $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$, suponiendo que el fluido no experimenta variación de densidad, es igual a:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \rho \cdot S_s \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (9)$$

Considerando la conservación de masa podemos igualar las expresiones (5) y (9). Al dividir ambas expresiones por $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ obtenemos:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Delta x} \cdot \left(J_x \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y, z} - J_x \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y, z} \right) - \frac{1}{\Delta y} \cdot \left(J_y \Big|_{x, y+\frac{\Delta y}{2}, z} - J_y \Big|_{x, y-\frac{\Delta y}{2}, z} \right) - \\ - \frac{1}{\Delta z} \cdot \left(J_z \Big|_{x, y, z+\frac{\Delta z}{2}} - J_z \Big|_{x, y, z-\frac{\Delta z}{2}} \right) = \rho \cdot S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \end{aligned} \quad (10)$$

A continuación podemos tomar el límite de la ecuación anterior cuando el tamaño del volumen de control se reduce, es decir, $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$, y $\Delta z \rightarrow 0$. En este caso conviene recordar la definición de una derivada parcial:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{J_x \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y, z} - J_x \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y, z}}{\Delta x} = \frac{\partial}{\partial x} J_x \quad (11)$$

De esta manera, al reemplazar la definición de una derivada parcial en la ecuación (10) obtenemos:

$$-\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \right) = \rho \cdot S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (12)$$

lo que puede ser escrito en forma reducida como:

$$-\nabla \bullet \underline{J} = \rho \cdot S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (13)$$

Si en la derivación de la ecuación (12) se hubiera utilizado la ecuación (7) el resultado anterior se habría modificado como sigue:

$$-\nabla \bullet \underline{J} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot n) \quad (14)$$

A continuación tratemos de expresar la ecuación (12) en términos de cantidades o variables de importancia en aguas subterráneas. El lado izquierdo de la ecuación (12) puede ser expandido utilizando la definición del flujo másico, \underline{J} , dado por la ecuación (1):

$$-\nabla \bullet \underline{J} = -\nabla \bullet (\rho \cdot \underline{v}) = -\rho \nabla \bullet \underline{v} - \underline{v} \bullet \nabla \rho \quad (15)$$

En la mayoría de los problemas prácticos, el segundo término en la ecuación (15) es despreciable con respecto a los otros términos en la ecuación básica de continuidad. Por ejemplo, en una situación que involucra un fluido incompresible como el agua, la variación de densidad del fluido es prácticamente nula. De esta manera, podemos escribir para la ecuación (12):

$$-\nabla \cdot \underline{v} = S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (16)$$

en la cual se ha eliminado el segundo término en la expansión de la ecuación (14) y se ha dividido por la densidad del fluido.

Utilizando la ley de Darcy podemos desarrollar aún más la ecuación (16) para obtener una expresión más completa de la ecuación básica de continuidad. En este caso, si suponemos que el medio poroso es heterogéneo y anisotrópico, y que además el sistema de coordenadas x, y, z está alineado con las direcciones principales de anisotropía, podemos escribir a partir de la ley de Darcy:

$$v_x = -K_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \quad (17a)$$

$$v_y = -K_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \quad (17b)$$

$$v_z = -K_z \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \quad (17c)$$

Substituyendo la expresión de la ley de Darcy en la ecuación básica de continuidad se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (18)$$

La ecuación (18) es un resultado fundamental para el flujo a través de un medio poroso saturado, bajo condiciones transientes. Si consideramos que el medio es homogéneo pero anisotrópico, la ecuación (18) se puede escribir como sigue:

$$K_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (19)$$

Si consideramos un escurrimiento en régimen permanente o estacionario, y que además el medio acuífero es homogéneo e isotrópico ($K_x = K_y = K_z = \text{constante}$), podemos escribir la ecuación (19) de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (20)$$

la que comúnmente se conoce como la ecuación de Laplace. En forma reducida esta ecuación se puede escribir como:

$$\nabla^2 h = 0 \quad (21)$$

donde ∇^2 es el operador Laplaciano.

2. ECUACION DE FLUJO EN SITUACIONES ESPECIFICAS

2.1 Flujo a Través de un Medio Poroso No Saturado

El resultado básico en la ecuación (14) sigue siendo válido, pero dado que el medio se encuentra sólo parcialmente saturado la humedad θ debe reemplazar a la porosidad n en el término del lado derecho. De esta manera,

$$-\nabla \cdot \underline{J} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \theta) \quad (22)$$

De acuerdo a algunos autores (Freeze y Cherry, 1979), al expandir el término del lado derecho se puede despreciar la variación temporal de la densidad del fluido comparada con la variación temporal del contenido de humedad. De esta manera, al expandir la ecuación (22) se obtiene:

$$-\nabla \cdot \underline{J} = \rho \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} + \theta \cdot \frac{\partial \rho}{\partial t} \approx \rho \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (23)$$

reemplazando la expresión del flujo másico, \underline{J} , dada en la ecuación (1) y simplificando se obtiene:

$$-\nabla \cdot \underline{v} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (24)$$

Substituyendo la expresión de la ley de Darcy para flujo no saturado podemos escribir:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(\psi) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K(\psi) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\psi) \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (25)$$

Finalmente, considerando que la cota piezométrica h puede ser escrita como $h=\psi+z$, podemos reescribir la ecuación (25) de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\psi) \cdot \left[\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right] \right) = C(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (26)$$

donde $C(\psi) = \frac{d\theta}{d\psi}$ es la capacidad específica de un suelo.

2.2 Flujo en un Acuífero Confinado

En este caso supongamos que el flujo es horizontal y bidimensional, es decir $v_z \ll v_x, v_y$. Si repetimos los argumentos dados en un principio para desarrollar un balance de masas usando un volumen de control de dimensiones $b \cdot \Delta x \cdot \Delta y$, podemos escribir para el flujo de agua hacia el volumen de control lo siguiente (ver Figura 2):

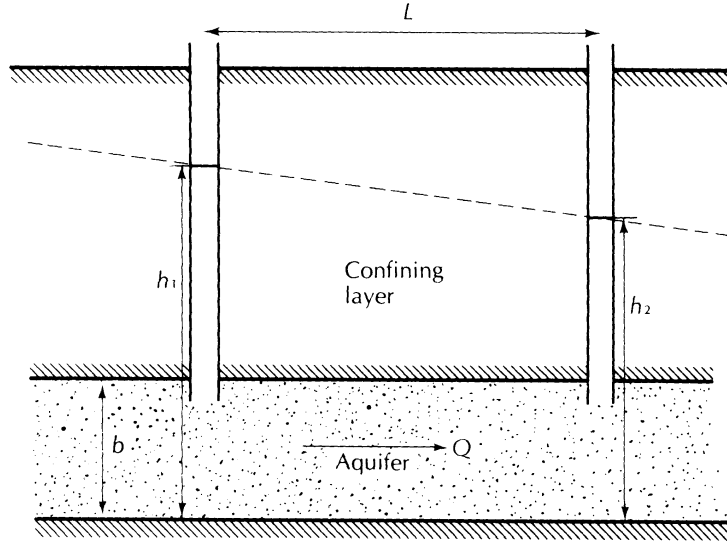


Figura 2 Flujo en un Acuífero Confinado

$$\underline{q}^* = \rho \cdot b \cdot \underline{v} = -\rho \cdot b \cdot \underline{K} \cdot \nabla h = -\rho \cdot \underline{T} \cdot \nabla h \quad (27)$$

donde \underline{K} y \underline{T} son el tensor conductividad hidráulica y el tensor transmisibilidad, respectivamente. El flujo neto de agua que pasa a través del área de control, G_T , es:

$$G_T = \left(q_x^* \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y} - q_x^* \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y} \right) \cdot \Delta y + \left(q_y^* \Big|_{x, y-\frac{\Delta y}{2}} - q_y^* \Big|_{x, y+\frac{\Delta y}{2}} \right) \cdot \Delta x \quad (28)$$

La tasa de cambio del fluido contenido dentro del volumen de control mostrado en la Figura 2 se deriva desde la definición de S :

$$S = \frac{\Delta V_w}{A \cdot \Delta h} = \frac{\Delta V_w}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta h} \quad (29)$$

A partir de lo anterior, la tasa de variación de la masa de fluido contenida en el volumen de control puede ser escrita como:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \rho \cdot S \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (30)$$

Al considerar las condiciones de continuidad y tomando el límite cuando el volumen de control se hace infinitesimalmente pequeño se obtiene:

$$-\left(\frac{\partial q_x^*}{\partial x} + \frac{\partial q_y^*}{\partial y}\right) = \rho \cdot S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (31)$$

Finalmente, al reemplazar la expresión del flujo másico a través del volumen de control se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (32)$$

donde $S = S_s \cdot b$, es el coeficiente de almacenamiento, y suponiendo que x e y son las direcciones principales de anisotropía para la transmisibilidad.

2.3 Flujo en un Acuífero no Confinado

En este caso supongamos que el flujo es horizontal y bidimensional, para lo cual recurriremos a la hipótesis de Dupuit-Forcheimer; es decir la pendiente del nivel freático o plano de carga es muy pequeña con lo cual la velocidad vertical es prácticamente despreciable y por lo tanto el flujo es horizontal. La aproximación de Dupuit nos permite escribir:

$$\underline{q}^* = \rho \cdot h \cdot \underline{v} = -\rho \cdot h \cdot \underline{\underline{K}} \cdot \nabla h \quad (33)$$

donde $\underline{\underline{K}}$ es el tensor conductividad, h es el espesor saturado, ρ es la densidad del fluido y \underline{q}^* es el flujo de masa por unidad de ancho.

Considerando conservación de masa sobre el volumen de control indicado en la Figura 3 nos permite escribir, al igual que para un acuífero confinado:

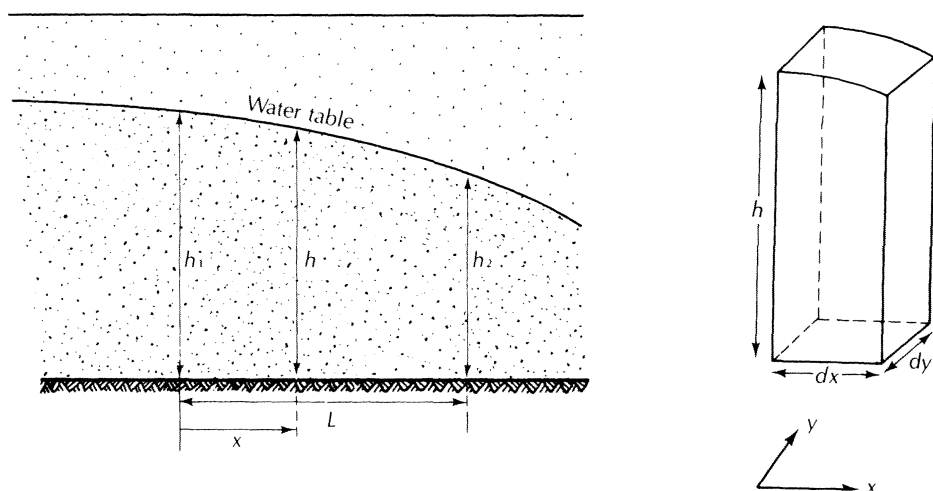


Figura 3 Flujo en un Acuífero No Confinado o Libre

$$\left(q_x^* \Big|_{x-\frac{\Delta x}{2}, y} - q_x^* \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}, y} \right) \cdot \Delta y + \left(q_y^* \Big|_{x, y-\frac{\Delta y}{2}} - q_y^* \Big|_{x, y+\frac{\Delta y}{2}} \right) \cdot \Delta x = \rho \cdot S \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (34)$$

donde S es el coeficiente de almacenamiento, el cual para un acuífero confinado coincide con la capacidad específica, S_y , la que mide el volumen de agua que se libera de almacenamiento por unidad de área y de cambio unitario en la carga hidráulica h . Si dividimos por $\Delta x \cdot \Delta y$ y luego tomamos el límite cuando el volumen de control se hace infinitesimalmente pequeño obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \cdot h \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \cdot h \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S_y \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (35)$$

donde x e y son las direcciones principales de anisotropía para la conductividad hidráulica.

2.4 Flujo en un Acuífero Confinado Rodeado por Dos Estratos Permeables

Consideremos el caso de un acuífero confinado como en la Figura 2, el cual está acotado superior e inferiormente por estratos permeables (ver Figura 4). En este caso W_1 y W_2 son los flujos verticales que atraviesan a través de cada estrato entrando y saliendo del volumen de control. En este caso se supone que el flujo en el acuífero confinado es básicamente horizontal, mientras que en los estratos confinantes (acuitardos) el flujo es vertical.

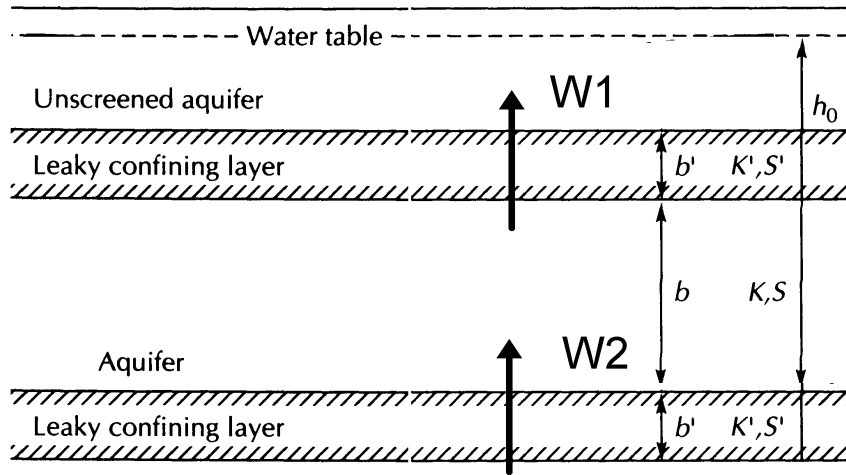


Figura 4 Acuífero Confinado Rodeado por Estratos Semipermeables

Luego de aplicar conservación de masa al volumen de control se obtiene:

$$-\left(\frac{\partial q_x^*}{\partial x} + \frac{\partial q_y^*}{\partial y} \right) + W_2^* - W_1^* = \rho \cdot S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (36)$$

Si dividimos por la densidad del fluido y reemplazamos la definición de los flujos en las direcciones x e y obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + W_2 - W_1 = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad (37)$$

donde $W^* = \rho \cdot W$.

3. ECUACION DE LAPLACE

Si consideramos un escurrimiento en régimen permanente o estacionario, y que el medio acuífero es homogéneo e isotrópico ($K_x = K_y = K_z = \text{constante}$), podemos escribir la ecuación (18) de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (38)$$

la que comúnmente se conoce como la ecuación de Laplace. En forma reducida esta ecuación se puede escribir como:

$$\nabla^2 h = 0 \quad (39)$$

Considerando un elemento diferencial de forma cilíndrica se puede escribir la ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas, las que utilizan el sistema de coordenadas (r, θ, z) en vez del sistema cartesiano (x, y, z) . Utilizando este nuevo sistema de coordenadas la ecuación de Laplace se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial h}{\partial r} + \frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (40)$$

Utilizando coordenadas esféricas, en las cuales el sistema cartesiano (x, y, z) se reemplaza por un sistema de coordenadas (r, θ, φ) , se obtiene para la ecuación de Laplace la siguiente expresión:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial h}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial \varphi^2} = 0 \quad (41)$$

4. TRANSPORTE DE MASAS EN UN MEDIO SATURADO

4.1 Introducción

En esta sección consideraremos el transporte de solutos disueltos en el agua subterránea. Esto se conoce como **transporte de solutos o masas**. Los métodos que se presentan en este capítulo se basan en las ecuaciones diferenciales parciales para dispersión que han sido desarrolladas para medios homogéneos.

4.2 Transporte debido a Gradientes de Concentración

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

concentración. Este proceso se conoce como **difusión molecular**, o simplemente como **difusión**. El proceso de difusión ocurre siempre que existe un gradiente de concentración, incluso si el fluido no está en movimiento. La masa de fluido que se difunde es proporcional al gradiente de concentración, lo cual se expresa mediante la **primera ley de Fick**. En una dimensión, esta ley se escribe como:

$$J_x = -D_d \cdot \frac{dC}{dx} \quad (42)$$

donde

J_x es el flujo de masa de soluto por unidad de área y tiempo (M/T)

D_d es el coeficiente de difusión (L^2/T)

C es la concentración de soluto (M/L^3)

dC/dx es el gradiente de concentración ($M/L^3/L$)

El signo negativo indica que el movimiento de contaminante es desde áreas de mayor concentración a aquellas de menor concentración. Valores de D_d son bien conocidos y se encuentran en el rango 1×10^{-9} a 2×10^{-9} m^2/s a $25^\circ C$. Estos valores no varían mucho con la concentración, pero dependen de la temperatura.

En un medio poroso la difusión no puede ocurrir 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, un coeficiente de difusión efectivo, D^* , debe ser usado:

$$D^* = \omega \cdot D_d \quad (43)$$

donde ω es un coeficiente que está relacionado con la tortuosidad de un medio poroso. La **tortuosidad** es una medida del efecto de la dirección del flujo seguida por una molécula de agua en el medio poroso. El valor de ω es siempre menor que 1.

4.3 Transporte por Advección

Sólidos disueltos son llevados junto con el flujo de agua subterránea. Este proceso se denomina **transporte advectivo** o **convectivo**. 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. Para un flujo unidimensional perpendicular a una sección transversal del medio poroso, la cantidad de agua que fluye es igual a la *velocidad promedio lineal* multiplicada por la *porosidad efectiva*. La **velocidad promedio lineal**, v_x , es la velocidad a la cual el agua subterránea se mueve a través de tubos de flujo individuales.

$$v_x = \frac{K}{n} \cdot \frac{dh}{dl} \quad (44)$$

donde K es la conductividad hidráulica (L/T), n es la porosidad, y dh/dl es el gradiente hidráulico (L/L).

El flujo de masa unidimensional, J_x , debido a advección es igual a la cantidad de agua que fluye multiplicada por la concentración de sólidos disueltos:

$$J_x = v_x \cdot n \cdot C \quad (45)$$

En el caso de un problema en el que sólo existe transporte de tipo advectivo se produce el denominado frente abrupto de concentración. En un lado del frente abrupto la concentración es igual a aquella del agua subterránea que avanza, mientras que en el otro lado no existe cambio con respecto a la concentración de base. Este proceso se conoce como **flujo pistón**, en el cual el fluido presente en los poros es reemplazado por el fluido conducido por la solución invasora.

Debido a la heterogeneidad de los materiales geológicos, el transporte advectivo en diferentes estratos puede resultar en frentes de solutos que se dispersan a distintas tasas en cada estrato. Si uno obtiene una muestra de agua con el propósito de monitorear la dispersión de un contaminante disuelto, utilizando datos obtenidos desde un pozo que penetra varios estratos, la muestra de agua será una mezcla de agua desde cada estrato.

4.4 Dispersión Mecánica

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

- (1) 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.
- (2) Algunas partículas de fluido se moverán a través de tubos de flujo que son más largos que otros.
- (3) Algunos poros son mayores que otros, lo que permite que el fluido se mueva más rápido a través de los poros.

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 la solución invasora (aquella agua que contiene el soluto) 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**.

Un frente de soluto que avanza tiende a dispersarse en direcciones perpendiculares del flujo debido a que en la escala de poros las líneas de flujo pueden divergir. El resultado de esta mezcla se denomina **dispersión transversal**.

La dispersión mecánica es generada como consecuencia de procesos o situaciones que ocurren en diferentes escalas. La variabilidad en la distribución de velocidad se produce por efecto de la aceleración de agua en poros más pequeños o debido a la tortuosidad del medio poroso. En otros casos dispersión mecánica se crea por la presencia de estratos horizontales de diferente conductividad hidráulica. Finalmente, existe un efecto de heterogeneidad de tipo macroscópica en la cual zonas de diferentes conductividad hidráulica dan origen a una desigual distribución de velocidades.

Si suponemos que la dispersión mecánica puede ser descrita por la Ley de Fick de difusión (ecuación (42)), y que la cantidad de dispersión mecánica es una función de la velocidad promedio lineal, entonces podemos introducir un coeficiente de dispersión mecánica. Este coeficiente es igual a una propiedad del medio denominada **dispersividad**, α , multiplicada por la velocidad promedio lineal. Si i es la dirección longitudinal o principal de flujo, el coeficiente de dispersión mecánica en la dirección longitudinal se define como:

$$D_{mL} = \alpha_i \cdot v_i \quad (46a)$$

donde v_i es la velocidad promedio lineal en la dirección i (L/T), y α_i es la dispersividad en la dirección i (L). El coeficiente de dispersión mecánica en la dirección transversal se define como:

$$D_{mT} = \alpha_j \cdot v_i \quad (46b)$$

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

4.5 Dispersión Hidrodinámica

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:

$$D_L = \alpha_L \cdot v_i + D^* \quad (47)$$

$$D_T = \alpha_T \cdot v_i + D^* \quad (48)$$

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, α_L es la dispersividad longitudinal, y α_T es la dispersividad transversal.

Uno de los efectos más importantes de la dispersión hidrodinámica es el transporte de masa o soluto hacia regiones que no ocuparía si sólo un proceso de advección se llevara a cabo y el transporte del frente de contaminante a una velocidad superior a la del agua subterránea.

5. DERIVACION DE LA ECUACION DE ADVECCION-DISPERSION PARA TRANSPORTE DE SOLUTOS.

La derivación de la ecuación de Advección-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.

La derivación se basa en una conservación de masa de soluto que entra y sale de un volumen de control infinitesimal de medio poroso. Un esquema del volumen de control infinitesimal se muestra en la Figura 1.

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:

$$J_{ADV} = v_i \cdot n \cdot C \, dA \quad (49)$$

$$J_{DISP} = -n \cdot D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial i} \, dA \quad (50)$$

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

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:

$$J_i = v_i \cdot n \cdot C - n \cdot D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial i} \quad (51)$$

El signo negativo indica que el transporte dispersivo ocurre desde áreas de mayor a menor concentración. La masa total de soluto que entra al volumen elemental, J_E , está dada por la siguiente expresión:

$$J_E = J_x \, dz \, dy + J_y \, dz \, dx + J_z \, dx \, dy \quad (52)$$

La masa total de soluto que sale del volumen elemental, J_S , está dada por la siguiente expresión:

$$J_S = \left(J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} \, dx \right) dz \, dy + \left(J_y + \frac{\partial J_y}{\partial y} \, dy \right) dz \, dx + \left(J_z + \frac{\partial J_z}{\partial z} \, dz \right) dx \, dy \quad (53)$$

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

$$\Delta J = - \left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \right) dx \, dy \, dz \quad (54)$$

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

$$n \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \, dx \, dy \, dz \quad (55)$$

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:

$$-\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right) = n \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (56)$$

La expresión anterior puede ser escrita en términos vectoriales como:

$$-\nabla \cdot \underline{J} = n \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (57)$$

La ecuación (51) puede ser usada para obtener una ecuación diferencial que describe el transporte de un soluto conservativo, esto es uno que no interactúa con el medio poroso:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (v_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y C) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z C) \right] = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (58)$$

En un medio homogéneo, D_x , D_y , y D_z no varían en el espacio. Sin embargo, debido a que el coeficiente de dispersión hidrodinámica es una función de la dirección del flujo, por lo que incluso en un medio isotrópico y homogéneo se tiene que $D_x \neq D_y \neq D_z$. Si consideramos un sistema de flujo unidimensional podemos escribir:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (59)$$

En un medio homogéneo con un campo de velocidad uniforme, cuya dirección es paralela al eje x , la ecuación de transporte de un soluto se puede escribir como:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (60)$$

Si consideramos un escurrimiento radial hacia un pozo de bombeo, la ecuación de transporte de soluto puede ser escrito como:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(D \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{D}{r} \frac{\partial C}{\partial r} - u \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (61)$$

donde r es la distancia radial desde el pozo de bombeo, u es la velocidad de poros, la que se puede escribir como:

$$u = \frac{Q}{2 \cdot \pi \cdot n \cdot b \cdot r} \quad (62)$$

donde Q es la tasa de bombeo, n es la porosidad y b es el espesor saturado de la napa.

6. TRANSPORTE DE MASA CON REACCIONES

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 incluyen la existencia de fuentes o sumideros dependiendo si la masa de soluto es producida o es consumida. El esquema de balance de masas que describe esta nueva condición es:

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

El signo más o menos indica si la reacción es descrita por una fuente o un sumidero de soluto.

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:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \pm \frac{r}{n} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (63)$$

donde r representa la masa producida o consumida por unidad de volumen y unidad de tiempo, y n es la porosidad. La ecuación (63) se conoce comúnmente como ecuación de Advección-Dispersión-Reacción. Esta ecuación se aplica a un constituyente o contaminante único. En el caso de estudiar muchos contaminantes o solutos en forma simultánea es necesario escribir una ecuación (63) por cada compuesto.

6.1 Reacciones Cinéticas de Primer Orden

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

$$r = \frac{d(n \cdot C)}{dt} = -\lambda \cdot n \cdot C \quad (64)$$

donde λ 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:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (65)$$

Si consideramos el transporte de un soluto que decae a través del tiempo es posible encontrar una solución analítica basados en la ecuación (65). Para el caso del problema planteado por Ogata y Banks (1961) se puede plantear la siguiente descripción matemática para este contaminante no conservativo:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (66a)$$

$$C(x,0) = 0 \quad x \geq 0 \quad (66b)$$

$$C(0,t) = C_0 \quad t \geq 0 \quad (66c)$$

$$C(\infty,t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (66d)$$

6.2 Reacciones de Adsorción 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:

$$r = \frac{\partial C^*}{\partial t} \quad (67)$$

donde C^* es la concentración de soluto en la fase sólida. Al sustituir la ecuación (67) en la ecuación de transporte se obtiene la siguiente expresión:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{n} \frac{\partial C^*}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (68)$$

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

$$C^* = f(C) \quad (69)$$

Si definimos 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:

$$C^* = S \cdot \rho_s \cdot (1 - n) \quad (70)$$

donde ρ_s es la densidad de los minerales que forman la roca o suelo, normalmente 2.65 g/cm^3 para muchos suelos arenosos. La cantidad $\rho_s \cdot (1 - n)$ representa la masa total de sólidos por unidad de volumen de un medio poroso.

Existen una serie de modelos que permiten representar isotermas de equilibrio, pero las más utilizadas son las siguientes:

$$\text{Isoterma Lineal} \quad S = K_d \cdot C \quad (71)$$

donde K_d se conoce como el coeficiente de distribución.

$$\text{Isoterma de Freundlich} \quad S = k \cdot C^n \quad (72)$$

con k y n dos constantes, e,

Isoterma de Langmuir
$$S = \frac{k_F \cdot C \cdot S_{MAX}}{k_R + k_F \cdot C} \quad (73)$$

con k_F , k_R y S_{MAX} constantes.

Si se utiliza la isoterma lineal para representar el proceso de adsorción, ecuación (71), se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = K_d \cdot \rho_s \cdot (1-n) \frac{\partial C}{\partial t} \quad (74)$$

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

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - K_d \cdot \rho_s \cdot \frac{1-n}{n} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (75)$$

la que al ser reordenada nos permite escribir:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \left(1 + K_d \cdot \rho_s \cdot \frac{1-n}{n} \right) \frac{\partial C}{\partial t} \quad (76)$$

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

$$R_f = 1 + K_d \cdot \rho_s \cdot \frac{1-n}{n} \quad (77)$$

con lo cual la ecuación (76) se puede escribir como:

$$\frac{D_x}{R_f} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{v_x}{R_f} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (78)$$

De esta forma, el factor de retardación R_f sólo produce una disminución en la magnitud de los parámetros de transporte dispersión hidrodinámica y velocidad.