

1
2ej.

03079

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE GEOFÍSICA

**MODELACIÓN DE UN ACUÍFERO CONTAMINADO CON
TRICLOROETILENO (TCE) Y ALTERNATIVAS DE EXPLOTACIÓN**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN MODELACIÓN
MATEMÁTICA DE SISTEMAS GEOFÍSICOS**

P R E S E N T A

NORBERTO VERA GUZMÁN

DIRECTOR DE TESIS: DR. JAIME MAX GARFIAS SOLÍS

257143

DICIEMBRE DE 1998

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

AGRADECIMIENTOS

Mi reconocimiento y gratitud a las siguientes personas:

Al Dr. Jaime Max Garfias Solís, por el apoyo que me brindó para poder llevar a término este trabajo. Siempre le estaré agradecido por todo el tiempo que me dedicó para analizar, complementar y mejorar el contenido de este trabajo.

Al Dr. Ramiro Rodríguez y al Dr. Jean Pierre Hennart, por el apoyo y asesoría que me brindaron para estructurar y desarrollar este trabajo.

Al Dr. Adrian Ortega, a la Dra. Susuna Saval y al Dr. Tomás González, por su tiempo y observaciones para mejorar este trabajo.

Al Dr. Ismael Herrera Revilla, por el tiempo que me dedicó y las sugerencias que me hizo, tanto a nivel académico como a nivel personal.

Al M. en C. Guillermo Hernández García y al Ing. Rodrigo Medina Bañuelos, por su amistad y compañerismo.

A mi hermano Eric, por las visitas a "cuba" y las posteriores discusiones que sobre el tema siempre se generaron y que creo, se continuarán generando.

A todos ellos.

GRACIAS

CONTENIDO

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN	1
1.1 Generalidades.....	1
1.2 Objetivo	2
1.3 Metodología.....	3

CAPÍTULO II

BASES MATEMÁTICAS DE LA MODELACIÓN.....	5
2.1 Introducción.....	5
2.2 Descripción macroscópica del movimiento	5
2.3 Identidades útiles de Cálculo Diferencial e Integral	7
2.4 Propiedades extensivas e intensivas	10
2.5 Ley general de balance	12
2.6 Deducción de la ecuación de flujo en un medio poroso	13
2.7 Deducción de la ecuación de transporte en un medio poroso.....	17
2.8 Condiciones de frontera y condiciones iniciales.....	21

CAPÍTULO III

PROCESOS FÍSICOS Y QUÍMICOS.....	24
3.1 Introducción.....	24
3.2 El flujo de agua subterránea.....	24
3.3 Flujo multifásico.....	25
3.4 Transporte de contaminantes disueltos en el agua	26
3.5 Advección.....	26
3.6 Dispersión.....	27
3.7 Coeficiente de dispersión.....	28
3.8 Fuentes y sumideros	30
3.9 Reacciones químicas.....	30
3.10 Sorción	30
3.11 Decaimiento radiactivo y biodegradación.....	35
3.12 Precipitación y disolución.....	36
3.13 Reacciones ácido-base.....	37
3.14 Complejación	38
3.15 Sustitución hidrólisis	39
3.16 Reacciones REDOX.....	40

CAPÍTULO IV

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE	41
4.1 Introducción.....	41
4.2 Evolución de los modelos de transporte.....	41
4.3 <i>Tratamiento numérico de la ecuación de transporte</i>	42
4.4 Formulación Euler-Lagrange de la ecuación de transporte	44
4.5 Método de características (MOC).....	46
4.6 Discretización espacial	50
4.7 Discretización temporal y evaluación del término advectivo.....	51
4.8 Seguimiento de partículas.....	53
4.9 Colocación dinámica de partículas.....	55
4.10 Método modificado de características (MMOC)	58
4.11 Procedimiento (MMOC)	59
4.12 Método híbrido de características (HMOC).....	60

CAPÍTULO V

TÉCNICAS PROBADAS DE REMEDIACIÓN DE ACUÍFEROS	61
5.1 Introducción.....	61
5.2 Contaminación de acuíferos con DNAPLs.....	64
5.3 <i>Técnicas más comunes de remediación</i>	69
5.4 Método de barreras de aislamiento	69
5.5 Método de bombeo y tratamiento	74
5.6 Estudios previos documentados del método de bombeo y tratamiento	85

CAPÍTULO VI

MODELACIÓN DE UN PROBLEMA DE CONTAMINACIÓN	90
6.1 Introducción.....	90
6.2 Objetivo de la modelación del problema de contaminación.....	91
6.3 <i>Planteamiento del problema</i>	91
6.4 Procedimiento	96
6.5. Simulaciones realizadas	98
6.6 Resultados.	109

CONCLUSIONES	134
---------------------------	-----

BIBLIOGRAFIA	138
---------------------------	-----

APENDICE I	149
-------------------------	-----

APENDICE II	152
--------------------------	-----

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1	Esquema de interpolación de la velocidad usado para el seguimiento de partículas	48
Figura 5.1	Contaminación del agua subterránea como consecuencia de una lenta circulación del agua en un estrato geológico.	62
Figura 5.2	Contaminación del agua subterránea debido al depósito de residuos sólidos en lugares no propicios para ello y vertido de aguas residuales industriales y residenciales en fosas ubicadas en suelos con buena permeabilidad	63
Figura 5.3	Contaminación del agua subterránea por derrames accidentales de productos tóxicos y fugas de tanques subterráneos de almacenamiento.	63
Figura 5.4	Desviación lateral del flujo a través de la zona fuente dependiendo de la permeabilidad de las barreras de aislamiento. a) barreras con alta permeabilidad. b) barreras con una permeabilidad media. c) barreras con una permeabilidad muy baja	70
Figura 5.5	Vista en planta del método de barreras de aislamiento utilizadas para contener una zona fuente DNAPLs.	71
Figura 5.6	Sección transversal del método de barreras de aislamiento utilizando barreras verticales para contener una fuente contaminante.	72
Figura 6.1	Diagrama del área de modelación.	94
Figura 6.2	Discretización del sistema en celdas.	97
Figura 6.3	Piezometría inicial (estado estacionario) para la capa 1.....	100
Figura 6.4	Piezometría inicial (estado estacionario) para la capa 2.....	101
Figura 6.5	Piezometría inicial (estado estacionario) capa la capa 3.	102
Figura 6.6	Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) en la capa 1.	103
Figura 6.7	Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) en la capa 2.	104

Figura 6.8	Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) en la capa 3.	105
Figura 6.9	Ubicación de los pozos de control utilizados para contener la pluma (Caso 3).....	106
Figura 6.10	Ubicación de las dos baterías de pozos de inyección que fueron utilizadas en la simulación del caso 4.....	108
Figura 6.11	Resultados (Caso 1). Evolución natural con clausura y sin clausura.....	109
Figura 6.12	Resultados (Caso 3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente.....	110
Figura 6.13	Resultados (Caso 3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente.....	111
Figura 6.14	Resultados (Caso 3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente.....	112
Figura 6.15	Resultados (Caso 3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente.....	113
Figura 6.16	Resultados (Caso 4), Contención de la pluma por bombeo y tratamiento.....	114
Figura 6.17	Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento.....	115
Figura 6.18	Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento.....	116
Figura 6.19	Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento.....	117
Figura 6.20	Resultados (Caso 5). Eliminación de descargas residuales hacia el río.....	118
Figura 6.21	Resultados (Caso 5). Eliminación de descargas residuales hacia el río.....	119
Figura 6.22	Resultados (Caso 6). Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo exclusivamente.....	126

Figura 6.23	Resultados (Caso 7). Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo y tratamiento.....	127
Figura 6.24	Resultados (Caso 8). Entubamiento del río y evolución en condiciones naturales.....	128
Figura 6.25	Resultados (Caso 8). Entubamiento del río y evolución en condiciones naturales.....	129
Figura 6.26	Resultados (Caso 9). Entubamiento del río y bombeo exclusivamente.....	130
Figura 6.27	Resultados (Caso 9). Entubamiento del río y bombeo exclusivamente.....	131
Figura 6.28	Resultados (Caso 10). Entubamiento del río con bombeo y tratamiento.....	132
Figura 6.29	Resultados (Caso 10). Entubamiento del río con bombeo y tratamiento.....	133

LISTA DE TABLAS

Tabla 5.1	Concentración máxima permisible de diferentes compuestos, recomendada en el agua para consumo humano. Nótese la diferencia entre valores para orgánicos y para inorgánicos.....	67
Tabla 6.1	Parámetros hidráulicos utilizados en el modelo de flujo del problema a simular	92
Tabla 6.2	Propiedades físicas y químicas del tricloroetileno (TCE).....	93
Tabla 6.3	Parámetros utilizados en las simulaciones de transporte.....	98
Tabla 6.4	Costo y tiempo máximo de aprovechamiento del sistema para cada una de las alternativas simuladas.....	124

LISTA ABREVIADA DE SIMBOLOS UTILIZADOS

t	Tiempo,
\underline{x}	Vector de posición.
θ	Porosidad de un medio.
ρ	Densidad de un fluido.
k	Permeabilidad de un medio poroso.
μ	Viscosidad intrínseca de un fluido.
P	Presión de poro de un fluido.
g	Aceleración de la gravedad.
α	Compresibilidad de un medio poroso.
β	Compresibilidad de un fluido.
S_s	Almacenamiento específico de un medio poroso.
h	Carga hidráulica.
C	Concentración de un soluto.
Σ	Una superficie de discontinuidad.
\underline{v}	Vector velocidad.
v_Σ	Velocidad de desplazamiento de una superficie de discontinuidad.
C_s	Concentración en fuentes o sumideros.
ρ_b	Densidad volumétrica de un medio poroso.
\bar{C}	Concentración de un soluto adsorbido en un medio.
λ	Constante de degradación de un soluto.
Pe	Número de Peclet.
L	Una longitud característica en un modelo discreto.
D	Coefficiente de dispersión.
K_d	Coefficiente de distribución de un soluto.
S_w	Coefficiente de saturación de un medio.
C^+	Símbolo para identificar un catión.
A^-	Símbolo para identificar un anión.
γ_c	Número de Courant.
R	Factor de retardación.
ℓ	Símbolo para litro.

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

1.1 Generalidades

Dada la importancia que tiene el agua en el consumo humano, en la industria y en la agricultura y considerando que la disponibilidad de ésta es limitada, resulta lógico pensar en la forma más conveniente de aprovecharla. Cuando se habla de disponibilidad del agua se tiene que considerar que no solo es importante el volumen disponible de ésta, sino también su calidad, pues de poco sirve contar con una gran cantidad si no puede utilizarse para satisfacer las necesidades de una comunidad, o los requerimientos de una industria debido a que sus propiedades químicas pudieran no hacerla apta para estos usos. Al hablar de disponibilidad del agua, por lo general se hace referencia a aquel volumen que tiene las propiedades químicas necesarias para su uso en el consumo humano, que sirve para llevar a cabo determinados procesos industriales o que puede utilizarse en la agricultura. Las fuentes de agua con estas características son las que resultan de interés para ser estudiadas, pues dada su calidad son las que más directamente se pueden utilizar.

Para poder aprovechar en forma óptima estas fuentes así como para determinar su disponibilidad, es necesario contar con herramientas que permitan conocer en forma cuantitativa el volumen de estas fuentes y la calidad de las mismas. Si por diversos motivos, alguna o algunas de estas fuentes llegaran a contaminarse con sustancias no deseadas, sería útil que las mismas herramientas permitieran determinar la mejor forma de eliminarlas.

Basándose en esta idea se han desarrollado los métodos de remediación, como una manera de tener a disposición técnicas de limpieza capaces de ser utilizadas para disminuir las concentraciones de sustancias tóxicas o en general para eliminar sustancias no deseadas que

se encuentran presentes en las fuentes de agua contaminadas. Sin embargo, el éxito de la aplicación de dichas técnicas se encuentra en función de la información disponible del sitio contaminado, ya que para el diseño de una estrategia de limpieza se requiere conocer un mínimo de información como:

- Extensión del área contaminada, tanto horizontal como vertical.
- Identificación del tipo o tipos de contaminantes.
- Localización de las fuentes contaminantes, tanto superficiales como subterráneas.
- Características hidrogeológicas del lugar para determinar las posibles trayectorias de migración del contaminante.

Estas técnicas por lo general pueden operar *in-situ* u *off-site*, y utilizar como agentes de tratamiento sustancias de origen químico-biológico o en ocasiones métodos eléctricos. De hecho, la combinación de herramientas de simulación y técnicas de remediación son básicas para poder tratar problemas de contaminación, ya que su aplicación conjunta permite estimar el tiempo que se llevaría el restaurar dichas fuentes, hacer una evaluación del costo económico que esto implicaría, ensayar distintos métodos de remediación y determinar cual es el más adecuado dependiendo de las variables tiempo, costo y tipo de contaminante. Esta forma de manejar las fuentes de agua permite tomar decisiones respecto al abastecimiento y planeación a corto y mediano plazo de las actividades a desarrollar.

La herramienta a que hacemos referencia y que constituye la parte fundamental de este trabajo, se conoce en el ámbito científico como Modelación Matemática. Por medio de los modelos matemáticos se puede describir la evolución piezométrica de una fuente particular de agua, la concentración de sólidos disueltos en dicha fuente en un tiempo dado, determinar los volúmenes de extracción "sanos" para conservar esta fuente, conocer el impacto de la apertura de nuevos centros de bombeo, evaluar operaciones costo-beneficio en un programa de remediación, y en general, permite administrarla de manera racional si se cuenta con la información suficiente para ello.

1.2 Objetivo

Este trabajo tiene el propósito de evaluar un problema de contaminación con tricloroetileno (TCE) en un acuífero libre, y simular diferentes alternativas de explotación de éste dentro del contexto de la Modelación Matemática, para poder establecer una estrategia de aprovechamiento del sistema que permita continuar con su explotación.

Con base en este marco general de la Modelación Matemática, se describen algunos métodos de remediación con que se cuenta en la actualidad, y se presentan las relaciones matemáticas que describen los procesos físicos y químicos relacionados con el transporte de contaminantes, especificando el grado de confiabilidad actual con el que se pueden modelar dichos procesos. Se dan también lineamientos para seleccionar una técnica de remediación particular dependiendo del problema que se esté considerando.

Tomando en cuenta que la contaminación con solventes orgánicos clorados es uno de los principales problemas que en la actualidad enfrentan las sociedades industrializadas, se hace uso de los modelos matemáticos para simular el funcionamiento de un sistema que presenta un problema de contaminación por tricloroetileno (TCE). El problema de contaminación que se aborda, es una situación teórica relacionada con la protección y conservación de fuentes de suministro de agua potable, ligadas directamente a una fuente contaminante como lo es un río en donde se descargan aguas residuales con altas concentraciones de solventes orgánicos, y en donde al mismo tiempo, este último funciona como una de las fuentes de recarga del sistema. Los objetivos que se persiguen incluyen: el encontrar algún esquema de funcionamiento que nos permita en principio detener el avance de la pluma contaminante hacia una batería de pozos de suministro; evaluar la efectividad de técnicas como bombeo y tratamiento y barreras de aislamiento, para tratar este tipo de problemas; alcanzar un "estado de remediación" del sistema que nos permita continuar con su explotación y explorar la posibilidad de restauración del mismo.

1.3 Metodología

Para generar los modelos matemáticos de flujo y transporte, se obtienen las ecuaciones diferenciales que describen estos dos fenómenos haciendo uso de las propiedades extensivas e intensivas de los cuerpos y aplicando la ley general de balance global. Específicamente, basándose en esto se deducirán las ecuaciones diferenciales que describen el flujo de un fluido y el transporte de contaminantes en un medio poroso. Se describirá en detalle lo que representa cada término de cada una de las ecuaciones obtenidas, y se explicará que procesos físicos y químicos se contemplan en los modelos de flujo y transporte. También se exponen los métodos de remediación más comúnmente empleados en problemas de contaminación indicando las ventajas y desventajas que presenta cada uno.

Para realizar las simulaciones de flujo y transporte en el sistema que se pretende modelar, se hace uso de programa MODFLOW de McDonald y Harbaugh en su versión 1988, y MT3D de S.S. Papadopoulos&Associates, Inc. en su versión 1992. Dichos programas fueron elegidos considerando que tienen las opciones necesarias para simular flujo y transporte en el sistema que se está considerando. Sus características son las siguientes:

El modelo de flujo MODFLOW, utiliza un esquema tridimensional de diferencias finitas para discretizar la ecuación de flujo y un método iterativo para resolver el sistema de ecuaciones resultante. Se pueden simular fronteras de carga especificada, fronteras de flujo especificado, y permite trabajar con parámetros hidráulicos variables por capa, simular procesos como recarga, evapotranspiración, aporte de ríos, emplazamiento de pozos de extracción e inyección y drenes.

El modelo de transporte MT3D, utiliza un método mixto Euler-Lagrange para resolver numéricamente la ecuación de transporte. La parte Lagrangiana del método se utiliza para resolver el término advectivo de la ecuación por medio del Método de Características y la parte Euleriana se usa para resolver el término dispersivo de la ecuación por medio de Diferencias Finitas. Se pueden simular procesos como advección, dispersión, sorción y degradación.

El esquema de simulación del problema de contaminación que se pretende modelar, contempla tres capas constituidas por una mezcla de gravas y arenas principalmente y en menor proporción sedimentos arcillosos. La recarga desde el río hacia el acuífero en explotación, se da a través de la primera capa, y también por ella ingresa el contaminante que llega a todo el acuífero. La elección del tricloroetileno (TCE) como contaminante para este sistema, se hizo considerando que las normas de potabilidad del agua para este contaminante son bastante estrictas debido a su alta toxicidad; $0.005 \text{ mg} / \ell$ de acuerdo con [US EPA, 1992].

CAPÍTULO II

BASES MATEMÁTICAS DE LA MODELACIÓN

2.1 Introducción

La descripción de un sistema se puede realizar de acuerdo a un punto de vista microscópico o también conforme a un punto de vista macroscópico. Cuando la descripción se lleva a cabo desde un punto de vista microscópico, se consideran explícitamente cada uno de los átomos o moléculas que constituyen al sistema, así como la interacción que existe entre ellos. Si la descripción se realiza desde un punto de vista macroscópico, se idealiza al sistema y no se toma en cuenta de manera explícita su estructura molecular o atómica y se considera al sistema como constituido por una masa continua y homogénea, sin huecos ni separaciones en su interior. A esta idealización la llamamos un medio continuo. Para poder describir a un sistema de este tipo, lo dividimos en elementos de volumen infinitesimales, esto es, muy pequeños comparados con las dimensiones del sistema mismo pero, todavía grandes comparados con las distancias que separan a las moléculas o átomos que lo constituyen. De esta manera, cuando nos referimos al desplazamiento de una partícula de un sistema macroscópico o al movimiento de un punto del mismo, no queremos decir el desplazamiento de una molécula individual, sino de un elemento de volumen que contiene muchas moléculas aunque visto como un punto.

2.2 Descripción macroscópica del movimiento

La descripción matemática del estado de movimiento de un sistema macroscópico, se realiza por medio de funciones que dan la posición relativa de los elementos que constituyen al sistema con respecto a un marco de referencia, esto es, tales funciones permiten conocer el

campo de velocidades asociado a este sistema, y también describir los campos de presión y densidad que lo distinguen de otros cuerpos.

Las propiedades que caracterizan a un sistema macroscópico se pueden dividir de manera general en extensivas e intensivas. Las propiedades extensivas son aquellas cuyos valores dependen de la cantidad de sustancia presente, como podría ser su masa, peso y cantidad de calor entre otras. Por el contrario, las propiedades intensivas son aquellas cuyo valor no depende de la cantidad de sustancia presente, por ejemplo la presión, temperatura y velocidad del sonido en el medio. Toda propiedad intensiva está definida para cada elemento de volumen del sistema y para cada tiempo, esto es, para cada partícula del medio continuo. La descripción de las propiedades intensivas, se puede hacer en términos Lagrangianos y también en términos Eulerianos. Si Π es una propiedad intensiva y $\Phi(\underline{X}, t)$ su valor en una partícula \underline{X} al tiempo t , entonces $\Phi(\underline{X}, t)$ es la descripción Lagrangiana de la propiedad Π . De manera similar, sea $\Psi(\underline{x}, t)$ el valor de la propiedad Π en el punto \underline{x} del espacio en el tiempo t . Entonces $\Psi(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de la propiedad Π . Si consideramos una partícula \underline{X} colocada en la posición \underline{x} al tiempo t , entonces la descripción Lagrangiana y la Euleriana deben ser equivalentes, y podemos expresar esto como:

$$\Phi(\underline{X}, t) = \Psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \quad (2.1)$$

donde $\underline{p}(\underline{X}, t)$ = posición de la partícula \underline{X} al tiempo t .

La descripción Lagrangiana de la velocidad está dada por:

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \underline{p}_t(\underline{X}, t) \quad (2.2)$$

Si la descripción Euleriana de la velocidad está dada por: $\underline{v}(\underline{x}, t)$ y la partícula \underline{X} tiene la posición \underline{x} en el tiempo t , entonces

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \underline{v}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \quad (2.3)$$

La derivada Lagrangiana de una propiedad o derivada material, se obtiene manteniendo a la partícula fija. Si $\Phi(\underline{X}, t)$ es la descripción Lagrangiana de una propiedad, $\Phi_t(\underline{X}, t)$ es su derivada Lagrangiana o material. La derivada Euleriana de una propiedad se obtiene manteniendo el punto del espacio físico fijo, esto es, si $\Psi(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de una propiedad del sistema, entonces $\Psi_t(\underline{x}, t)$ es la derivada Euleriana. Con base en la equivalencia de descripciones $\Phi(\underline{X}, t) = \Psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t)$ y haciendo uso de la regla de la cadena, se puede derivar $\Psi(\underline{x}, t)$ para obtener

$$\Phi_t(\underline{X}, t) = \Psi_t(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \underline{p}_t(\underline{X}, t) \cdot \nabla \Psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \quad (2.4)$$

Denotando por $\frac{D\Psi}{Dt}$ la descripción Euleriana de la derivada material se tiene

$$\frac{D\Psi}{Dt} = \Psi_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \Psi \quad (2.5)$$

2.3 Identidades útiles de Cálculo Diferencial e Integral

Las identidades que a continuación se muestran, se usan de manera frecuente en este trabajo para calcular la variación de una propiedad extensiva de un sistema macroscópico.

La divergencia de una función vectorial $\underline{U}(x_1, \dots, x_N)$ se define por:

$$\nabla \cdot \underline{U} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \quad (2.6)$$

El Teorema de la Divergencia establece que

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (2.7)$$

El Teorema Generalizado de la Divergencia

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\underline{U}] \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (2.8)$$

donde $[\underline{U}] =$ salto de la función \underline{U}

$\Sigma =$ superficie de discontinuidad en el interior de Ω

Otro resultado importante se refiere al cálculo de derivadas de integrales cuando la región de integración $\Omega(t)$ depende de un parámetro t . Considérese la integral:

$$I(t) = \int_{\Omega(t)} f(\underline{x}, t) \, d\underline{x} \quad (2.9)$$

Sea $\Gamma(t) = \partial\Omega(t)$ la frontera de $\Omega(t)$ y \underline{v}_{Γ} la velocidad con la que se desplazan los puntos de $\Gamma(t)$. Entonces la derivada con respecto al tiempo de la ecuación (2.9) está dada por [Allen et al., 1987]:

$$\frac{dI(t)}{dt} = \int_{\Omega(t)} f_t(\underline{x}, t) \, d\underline{x} + \int_{\partial\Omega(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_{\Gamma} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (2.10)$$

donde f_t es la derivada parcial de f con respecto al tiempo y, \underline{v}_{Γ} es la velocidad con que se desplazan los puntos de la superficie $\partial\Omega(t)$.

Esta relación es válida solamente cuando $f(\underline{x}, t)$ y su derivada son continuas. En el caso de que $f(\underline{x}, t)$ y su derivada sean discontinuas, la relación (2.10) se tiene que modificar de la siguiente manera. Considere una región $\Omega(t)$, dividida en las subregiones $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$ por una superficie $\Sigma(t)$. Suponga que $f(\underline{x}, t)$ y su derivada son continuas separadamente en $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$, pero no a través de $\Sigma(t)$. Entonces, aplicando (2.10) a las regiones $\Omega_+(t)$ y a $\Omega_-(t)$ separadamente se tiene

$$I'_+(t) = \int_{\Omega_+(t)} f_t(\underline{x}, t) \, d\underline{x} + \int_{\partial\Omega_+(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_{\Gamma} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} f_+(\underline{x}, t) \underline{v}_{\Sigma} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (2.11)$$

$$I'_-(t) = \int_{\Omega_-(t)} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial\Omega_-(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\Sigma} f_-(\underline{x}, t) \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.12)$$

donde la frontera $\partial\Omega(t)$, se ha dividido en dos partes $\partial\Omega_+(t)$ y $\partial\Omega_-(t)$ que junto con la superficie Σ forman dos superficies cerradas. El vector normal \underline{n} se toma apuntando hacia afuera de $\Omega_-(t)$, lo que se manifiesta por el signo menos que aparece en la ecuación (2.11). Sumando las ecuaciones (2.11) y (2.12) se obtiene la siguiente expresión (ver apéndice 1)

$$I'(t) = \int_{\Omega(t)} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial\Omega(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} [f] \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.13)$$

donde

$$[f] = f_+ - f_- \quad (2.14)$$

y

$$f_+ = \text{límite de } f \text{ en } \Omega_+(t)$$

$$f_- = \text{límite de } f \text{ en } \Omega_-(t)$$

Un último resultado de gran importancia es el que establece que si $f(\underline{x})$ es una función continua en la región Ω y se cumple que

$$\int_R f(\underline{x}) d\underline{x} = 0 \quad (2.15)$$

en toda subregión R de Ω , entonces

$$f(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (2.16)$$

Este resultado es conocido en Mecánica del Medio Continuo como el Lema de Dubois-Reymond. Una extensión del Lema de Dubois-Reymond para el caso en que $f(\underline{x})$ fuese continua en Ω , excepto en una superficie Σ a través de la cual f pudiera tener discontinuidades de salto, y además cumpliera con

$$\int_R f(\underline{x}) d\underline{x} + \int_{\Sigma(R)} [f] d\Sigma = 0 \quad (2.17)$$

para toda subregión R de Ω .

donde $\Sigma(R)$ es la parte de Σ contenida en R , entonces

$$f(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (2.18)$$

y

$$[f] = 0 \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (2.19)$$

2.4 Propiedades extensivas e intensivas

La presentación de este tema, así como la derivación de las ecuaciones de balance, están basados en [Herrera y Allen, 1986].

Una propiedad extensiva es aquella que se puede expresar como la integral de una propiedad intensiva, es decir, existe una función ψ tal que

$$E(t) = \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (2.20)$$

donde $B(t)$ es la región del espacio físico ocupada por el cuerpo B en el tiempo t .

En este caso el integrando $\psi(\underline{x}, t)$ es la propiedad intensiva asociada a la propiedad extensiva $E(t)$. Esta manera no estándar de definir las propiedades intensivas está basada en una forma de proceder que ha venido siguiendo [Herrera y Allen, 1986]. La definición convencional incorpora la densidad de la fase. La ventaja de la definición aquí utilizada es que no presupone la existencia de una densidad y resultan más directas las aplicaciones. Esto también hace las ecuaciones de balance más sencillas.

Como ejemplo de esto se tiene que la propiedad intensiva *densidad* se asocia con la propiedad extensiva *masa*, por medio de la relación

$$M(t) = \int_{B(t)} \rho(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (2.21)$$

En este caso $\rho(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de la densidad, esto es, la propiedad intensiva y M corresponde a la masa del cuerpo $B(t)$ o propiedad extensiva.

La rapidez con que cambia una propiedad extensiva se puede derivar en forma inmediata usando la ecuación (2.10). De las ecuaciones (2.20) y (2.10) se sigue que

$$\frac{d E(t)}{d t} = \int_{B(t)} \psi_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.22)$$

y aplicando el teorema de la divergencia al segundo término del miembro de la derecha de (2.22) se llega a

$$\frac{d E(t)}{d t} = \int_{B(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \} d\underline{x} \quad (2.23)$$

La ecuación (2.23) tiene una importante limitación: supone que la propiedad intensiva ψ y su derivada son continuas. En el caso de que éstas no lo sean, la expresión equivalente a (2.23) se obtiene como sigue:

Considérese un cuerpo B que ocupa la región $B(t)$ en el tiempo t . Supóngase que $\psi(\underline{x}, t)$, (la propiedad intensiva) pudiera tener discontinuidades a través de una superficie $\Sigma(t)$, en el interior de $B(t)$. Aplicando (2.13) en (2.20), se obtiene

$$\frac{d E(t)}{d t} = \int_{B(t)} \psi_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\psi] \underline{v}_{\Sigma} \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.24)$$

Dividiendo $B(t)$ en dos subregiones $B_+(t)$ y $B_-(t)$, de tal manera que las fronteras ∂B_+ , ∂B_- y la superficie Σ formen dos superficies cerradas. Entonces, usando el Teorema Generalizado de la Divergencia (ecuación 2.8), se obtiene la siguiente expresión (ver apéndice 2)

$$\int_{B(t)} \nabla \cdot (\psi \underline{v}) d\underline{x} = \int_{\partial B} \psi \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\psi \underline{v}] \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.25)$$

como se puede ver en esta expresión, la velocidad de las partículas a través de Σ puede ser discontinua. Si sustituimos (2.25) en (2.24)

$$\frac{d E(t)}{d t} = \int_{B(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \} d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi (\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.26)$$

2.5 Ley general de balance

Las leyes que gobiernan los sistemas macroscópicos se expresan por medio de balances globales. Su forma general, para una propiedad intensiva Π con representación Euleriana $\psi(\underline{x}, t)$, está dada por [Herrera y Allen, 1986]

$$\frac{d E(t)}{d t} = \frac{d}{d t} \int_{B(t)} \psi d\underline{x} = \int_{\partial B} \underline{t} \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{B(t)} \eta d\underline{x} \quad (2.27)$$

donde $E(t)$ es la propiedad extensiva asociada a ψ . Cuando ψ es una función escalar, \underline{t} , ψ y η son funciones vectorial, escalar y escalar respectivamente.

Con mayor generalidad, cuando ψ es un tensor m es otro tensor del mismo rango, mientras que el rango de \underline{t} excede al de ψ en uno. Si ψ es un vector, \underline{t} es una matriz mientras que η es un vector.

La ecuación (2.27) es una ley de balance que se cumple en todo cuerpo B . A la función \underline{t} se le llama el "flujo de ψ " a través de la superficie del cuerpo ψ a la función η se le denomina el "suministro desde el exterior de ψ ". Sustituyendo (2.26) en (2.27) se obtiene

$$\int_{B(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \} d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi (\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\partial B} \underline{t} \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{B(t)} \eta d\underline{x} = 0 \quad (2.28)$$

Aplicando la versión generalizada del Teorema de la Divergencia se obtiene

$$\int_{B(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - \eta \} d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma}) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} d\underline{x} = 0 \quad (2.29)$$

Por el Lema de Dubois-Reymond, la ecuación (2.29) es equivalente a

$$\psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - \eta = 0 \quad \text{en } B(t) \quad (2.30)$$

$$[\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma}) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma \quad (2.31)$$

Las ecuaciones (2.30) y (2.31), corresponden a la forma diferencial o local de la "Ley General de Balance" y la "Condición General de Salto", respectivamente.

2.6 Deducción de la ecuación de flujo en un medio poroso

Con base en la ley general de balance, se deducirá a continuación la ecuación de flujo en un medio poroso. La masa de un fluido en un medio poroso saturado, cuya porosidad denotaremos por θ está dada por

$$M(t) = \int_{B(t)} (\theta \rho) d\underline{x} \quad (2.32)$$

donde θ = porosidad del medio
 ρ = densidad del fluido
 $B(t)$ = volumen del cuerpo o medio poroso

El cambio de masa del fluido en el medio poroso está dada por:

$$\frac{d M(t)}{d t} = \int_{B(t)} \eta(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau} \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.33)$$

donde $\underline{\tau} \cdot \underline{n}$ = flujo de masa a través de la frontera y
 $\eta(\underline{x}, t)$ = generación de masa por unidad de volumen

Comparando la ecuación (2.32) con la ecuación (2.20), resulta evidente que:

$$\psi(\underline{x}, t) = \theta(\underline{x}, t)\rho(\underline{x}, t) \quad (2.34)$$

De este modo, el balance local de masa para un fluido en un medio poroso se puede expresar de la siguiente manera.

$$(\theta t)_t + \nabla \cdot (\theta \rho \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - \eta = 0 \quad (2.35)$$

Si se considera que $\underline{\tau} = \underline{0}$ y $\eta = 0$, la ecuación (2.35) se reduce a:

$$(\theta t)_t + \nabla \cdot (\theta \rho \underline{v}) = 0 \quad (2.36)$$

Para deducir la ecuación de flujo, se harán las siguientes consideraciones:

- i).- La porosidad θ y la densidad del fluido ρ , son funciones de la presión exclusivamente.
- ii).- La velocidad V_i en un medio poroso anisotrópico está dada por la Ley de Darcy

$$V_i = -\frac{k_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \quad (2.37)$$

donde k_{ij} = permeabilidad del medio poroso
 μ = viscosidad intrínseca del fluido
 ρ = densidad del fluido
 P = presión del fluido
 g = aceleración de la gravedad
 z = altura desde un nivel de referencia

Bajo estas hipótesis se tiene que el primer término de (2.36) está dado por

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} = \left(\rho \frac{\partial\theta}{\partial t} + \theta \frac{\partial\rho}{\partial t} \right) = \left(\rho \frac{\partial\theta}{\partial P} + \theta \frac{\partial\rho}{\partial P} \right) \frac{\partial P}{\partial t} = \rho(\alpha + \theta\beta) \frac{\partial P}{\partial t} \quad (2.38)$$

donde $\alpha = \frac{d\theta}{dP}$ representa la compresibilidad de la matriz porosa

$\beta = \rho^{-1} \frac{d\rho}{dP}$ es la compresibilidad del fluido

Debido a que la densidad ρ del fluido y la porosidad θ de la matriz pueden variar de acuerdo a la variación en la carga hidráulica h , se establecerá una definición de carga hidráulica posteriormente. Sustituyendo (2.38) en (2.36) se obtiene:

$$S_s \frac{\partial P}{\partial t} + g \nabla \cdot (\theta \rho \underline{v}) = 0 \quad (2.39)$$

donde $S_s = \rho g (\alpha + \theta \beta)$ se le denomina "almacenamiento específico" del medio

Definiendo $\underline{V} = \theta \underline{v}$ la ecuación (2.39) se puede expresar como:

$$S_s \frac{\partial P}{\partial t} + g \nabla \cdot (\rho \underline{V}) = 0 \quad (2.40)$$

Desarrollando la ecuación (2.40) se obtiene

$$S_s \frac{\partial P}{\partial t} + g \rho \frac{\partial \underline{V}}{\partial x_i} + g \underline{V} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = 0 \quad (2.41)$$

Para el caso de fluidos homogéneos ($\rho = \text{cte}$), la carga hidráulica h se define como

$$h = \frac{1}{g} \int_{P_0}^P \frac{d\xi}{\rho(\xi)} + z = \frac{P - P_0}{\rho g} + z \quad (2.42)$$

Derivando la expresión anterior con respecto a x_j , se obtiene:

$$\rho g \frac{\partial h}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \quad (2.43)$$

que al sustituirla en la ecuación (2.37) se obtiene

$$V_i = -\frac{\rho g k_{ij}}{\mu} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2.44)$$

y también derivando (2.42) con respecto a t se tiene

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \rho g \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.45)$$

De este modo, sustituyendo (2.44) y (2.45) en (2.41) se obtiene

$$S_s \rho g \frac{\partial h}{\partial t} = \rho g \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho g k_{ij}}{\mu} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + g \left(\frac{\rho g k_{ij}}{\mu} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (2.46)$$

Definiendo la conductividad hidráulica del medio por:

$$K_{ij} = \rho g \frac{k_{ij}}{\mu} \quad (2.47)$$

Se llega a

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \frac{\partial \log(\rho)}{\partial x_i} = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.48)$$

En el caso de fluidos incompresibles, el segundo término del lado izquierdo de (2.48) se anula, con lo que se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.49)$$

Si la función $\eta(\underline{x}, t)$ en la ecuación (2.30) es diferente de cero, la ecuación (2.49) se expresaría como:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - \eta = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.50)$$

El término $\eta(\underline{x}, t)$ representa en esta ecuación a las fuentes o sumideros en el sistema.

Si la función \underline{t} fuese diferente de cero en (2.30), el término $-\nabla \cdot \underline{t}$ quedaría incluido en la ecuación (2.50) a través de las condiciones de frontera.

2.7 Deducción de la ecuación de transporte en un medio poroso

De manera análoga a como se dedujo la ecuación de flujo en un medio poroso, se deduce la ecuación de transporte de un soluto en un medio poroso. La masa para un soluto particular en un medio poroso con porosidad q está dada por la siguiente relación:

$$M_s(t) = \int_{B(t)} (q C) d\underline{x} \quad (2.51)$$

donde C = concentración del soluto definida como la masa de soluto por unidad de volumen del fluido

qC = cantidad de soluto por unidad de volumen del medio poroso

El cambio en la masa del soluto está dado por la ecuación

$$\frac{d M_s(t)}{d t} = \int_{B(t)} \eta(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{t} \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (2.52)$$

donde $\underline{t} \cdot \underline{n} =$ flujo de masa de soluto a través de la frontera
 $\eta(\underline{x}, t) =$ generación de masa de soluto por unidad de volumen

De igual manera a como se identificaron los términos en el caso de flujo, si se compara la ecuación (2.51) con la ecuación (2.20) se tiene que

$$\psi(\underline{x}, t) = q(\underline{x}, t)C(\underline{x}, t) \quad (2.53)$$

Por consiguiente, el balance local de masa para un soluto en un medio poroso está dado por la ecuación

$$(qC)_t + \nabla \cdot (q C \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{t} - \eta = 0 \quad (2.54)$$

En donde como ψ se mencionó anteriormente, \underline{t} representa el flujo de masa a través de la frontera ∂B y η es la generación de masa por unidad de volumen.

El flujo \underline{t} de soluto a través de una superficie, se define como la cantidad de soluto que atraviesa dicha superficie por unidad de tiempo ψ por unidad de área. El flujo dispersivo de soluto se formula de acuerdo con una generalización de la Ley de Fick, que establece que dicho flujo es directamente proporcional al gradiente de la concentración [Bear y Verruijt, 1987].

$$\underline{t} = -\underline{D} \cdot \nabla(qC) \quad (2.55)$$

Sustituyendo la ecuación (2.55) en la ecuación (2.54) se obtiene

$$(qC)_t + \nabla \cdot (q C \underline{v}) - \nabla \cdot (\underline{D} \cdot \nabla(qC)) - \eta = 0 \quad (2.56)$$

Separando los términos advectivo, difusivo y de fuentes, la ecuación (2.56) se puede expresar como

$$(qC)_t = \nabla \cdot (\underline{D} \cdot \nabla(qC)) - \nabla \cdot (q C \underline{v}) + \eta \quad (2.57)$$

El término $\eta(\underline{x}, t)$, que contempla reacciones químicas así como fuentes o sumideros de soluto (considerando reacciones irreversibles de primer orden ψ procesos de sorción ψ a sean lineales o no lineales), se puede expresar de acuerdo con [Grove ψ Stollenwerk, 1984] como:

$$\eta = q_s C_s - r_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - l (qC + r_b \bar{C}) \quad (2.58)$$

donde q_s = flujo de agua por unidad de volumen del medio poroso representando a fuentes cuando es (+) ψ sumideros cuando es (-)
 C_s = concentración de las fuentes o sumideros
 r_b = densidad volumétrica del medio poroso
 \bar{C} = concentración del soluto adsorbido en el medio poroso
 l = constante de degradación para reacciones de primer orden

Sustituyendo la ecuación (2.58) en la ecuación (2.57) se obtiene.

$$(qC)_i = \nabla \cdot (\underline{D} \cdot \nabla (qC)) - \nabla \cdot (qC \underline{v}) + q_s C_s - r_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - l (qC + r_b \bar{C}) \quad (2.59)$$

Como se puede ver de la ecuación (2.59), el tercer término del lado derecho de la ecuación (2.59) representa fuentes o sumideros de soluto cuando éstos se pueden expresar vía un gasto determinado como el de un pozo de extracción o de inyección. En el cuarto término del lado derecho en esta misma ecuación se contemplan procesos de sorción ψ en el quinto término quedan incluidas las reacciones químicas.

Si se considera que el medio poroso se encuentra saturado de manera permanente, se puede tomar a la porosidad como una constante ψ escribir la ecuación (2.59) como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{q} C_s - \frac{r_b}{q} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - l \left(C + \frac{r_b}{q} \bar{C} \right) \quad (2.60)$$

Esta es la ecuación de transporte de un soluto en un medio poroso saturado que considera los procesos: advección, dispersión, fuentes y/o sumideros, sorción y reacciones químicas. Reescribiendo el cuarto término del lado derecho de la ecuación (2.60), se tiene:

$$\frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.61)$$

Sustituyendo la ecuación (2.61) en la ecuación (2.60) se obtiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{\theta} C_s - \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right) \quad (2.62)$$

Pasando el cuarto término de la ecuación (2.62) al miembro izquierdo de esta misma ecuación se obtiene

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{\theta} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right) \quad (2.63)$$

donde $R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C}$ es un término conocido como factor de retardación.

La ecuación de transporte queda ligada a la ecuación de flujo a través de la relación

$$v_i = - \frac{K_{ij}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2.64)$$

donde K_{ij} = conductividad hidráulica del medio
 h = carga hidráulica

La carga hidráulica incluida en la ecuación (2.64) se obtiene al resolver la ecuación de flujo para un medio poroso, ecuación (2.50).

2.8 Condiciones de frontera y condiciones iniciales

En modelación matemática como en otras ramas de la ciencia, cuando se quiere simular el comportamiento de un sistema particular como por ejemplo, el flujo de agua en un medio poroso o el transporte de un soluto en el mismo medio, generalmente "se aísla" al sistema del medio que lo rodea, y se formulan una o varias ecuaciones diferenciales parciales para describir el comportamiento espacial y temporal de la variable o magnitud de interés. Este aislamiento no se da en el sentido físico, si no más bien en el sentido de especificar las dimensiones espaciales y temporales en las que se quiere conocer su funcionamiento, ya que de cualquier manera el medio ambiente seguirá interactuando con el sistema bajo observación. La forma de especificar esta interacción entre el medio circundante y el sistema de interés, se da matemáticamente por medio de condiciones a la frontera y condiciones iniciales. De manera general, las condiciones a la frontera que se pueden especificar para un sistema dado son las siguientes:

a) *Condiciones a la frontera tipo Dirichlet*

En este tipo de condición se especifica de manera permanente el valor de la variable que contiene la ecuación diferencial en toda la frontera del sistema, y con ello se establece la forma de interactuar del medio ambiente con el propio sistema. Por ejemplo, en el caso de flujo de agua en un medio poroso, se especifica la carga hidráulica en toda la frontera del dominio considerado para cualquier tiempo

$$h(x, y, z, t) = h_0(x, y, z, t) \quad (2.65)$$

para todo punto (x, y, z) sobre la frontera del sistema y para todo tiempo.

Si se considera el transporte de un soluto en un medio poroso, se tendría que especificar la concentración de este soluto en toda la frontera del sistema

$$C(x, y, z, t) = C_0(x, y, z, t) \quad (2.66)$$

para todo punto (x, y, z) sobre la frontera del sistema y para todo tiempo.

b) *Condiciones a la Frontera tipo Neumann*

En este tipo de condición se especifica el flujo de la variable que contiene la ecuación diferencial, esto es, se da como conocido el gradiente de dicha variable a través de la frontera del sistema. Tomando el ejemplo anterior de flujo de agua en un medio poroso, se tendría que especificar el valor

$$q_i = -K_y \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2.67)$$

siendo q_i una función conocida sobre todos los puntos (x,y,z) de la frontera de nuestro sistema para todo tiempo. Si se considera la ecuación de transporte para un soluto en un medio poroso, la condición de frontera tipo Neumann, quedaría expresada por

$$r(x, y, z, t) = D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (2.68)$$

Siendo $r(x,y,z,t)$ una función conocida que representa el flujo dispersivo normal a la frontera del sistema. Un caso especial de este tipo de frontera sería el de una frontera impermeable, en donde $r(x,y,z,t)=0$

c) *Condiciones a la frontera tipo Cauchy*

El tercer tipo de condición de frontera también conocida como condición de Cauchy, se forma de acuerdo a una combinación de las dos condiciones de frontera anteriores. Para el caso de transporte de un soluto en un medio poroso, dicha condición contempla tanto la concentración como el gradiente de la concentración, y se puede expresar de la siguiente manera

$$D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_i C = s(x, y, z, t) \quad (2.69)$$

siendo $s(x,y,z,t)$ una función conocida que representa el flujo total (dispersivo y advectivo) normal a la frontera del sistema. Para fronteras impermeables, tanto el flujo dispersivo como el advectivo son cero, de manera que $s(x,y,z,t)=0$.

Además de las condiciones de frontera que se deben imponer a un sistema para determinar como interactúa éste con el medio ambiente, también es necesario determinar el estado inicial a partir del cual queremos conocer su evolución. La forma de hacer esto es a través de lo que se conoce como condiciones iniciales. Para el caso de flujo en un medio poroso, la condición inicial se da especificando los valores de la carga hidráulica en todos los puntos del sistema en un tiempo dado t_0 por ejemplo $t_0 = 0$, de la siguiente manera

$$h(x, y, z, t) = h_0(x, y, z, 0) \quad (2.70)$$

donde $h_0(x, y, z, 0)$ es un valor conocido de la carga hidráulica en todos los puntos del sistema en el tiempo $t_0 = 0$.

Si se considera el transporte de un soluto en un medio poroso, la condición inicial para ese sistema estaría dada como

$$C(x, y, z, t) = C_0(x, y, z, 0) \quad (2.71)$$

donde $C_0(x, y, z, 0)$ es un valor conocido de la concentración en todos los puntos del sistema en un tiempo dado t_0 por ejemplo, $t_0 = 0$

CAPÍTULO III

PROCESOS FÍSICOS Y QUÍMICOS

3.1 Introducción

La utilidad de los modelos en agua subterránea para predecir el comportamiento de un sistema, depende en gran medida del conocimiento que se tenga de los procesos que controlan el flujo de agua subterránea y el transporte de contaminantes. Dichos procesos están relacionados principalmente con tres diferentes problemas de la modelación. El primero de ellos es el flujo de agua subterránea en medios porosos o fracturados. El segundo lo constituye el flujo multifásico agua-NAPLs, siendo "NAPLs" las siglas de "Non-Aqueous Phase Liquids", término con el que se designa a los fluidos "inmiscibles" que pueden moverse junto con el agua conservando sus propiedades. Los NAPLs se han clasificado a su vez en LNAPLs "Light Non-Aqueous Phase Liquids", líquidos menos densos que el agua, y en DNAPLs "Dense Non-Aqueous Phase Liquids", líquidos más densos que el agua. Como ejemplo de un flujo multifásico agua-LNAPLs, se puede mencionar el agua-gasolina, y para el caso agua-DNAPLs, se tienen agua-cloroformo o agua-tricloroetileno. El tercer proceso está relacionado con el flujo de contaminantes disueltos en el agua.

3.2 El flujo de agua subterránea

El flujo de agua subterránea es el más simple de caracterizar, principalmente porque es el que más se ha estudiado y en consecuencia el que mejor comprendido se tiene. En diversos problemas de flujo, los modelos solo necesitan considerar el flujo en respuesta a un gradiente hidráulico, y las pérdidas o ganancias de agua determinadas por las fuentes o sumideros como la recarga y los pozos de bombeo. El gradiente hidráulico representa la diferencia en los niveles del agua que son generados principalmente por la precipitación de

agua, que al infiltrarse en el subsuelo viaja por trayectorias que unen áreas de alto potencial con áreas de bajo potencial. El agregar o remover agua de un sistema también tiene efectos significativos en el patrón de flujo. La distribución de la carga hidráulica que se observe en una área determinada depende principalmente de cuanta agua se agregue o se remueva en el sistema, de donde se lleve a cabo este proceso así como de la conductividad hidráulica que presente el medio. Las fuentes y sumideros más importantes en los sistemas de flujo de agua subterránea están representados por los pozos de extracción e inyección. Dichos flujos son considerados como interiores al sistema. Otras fuentes y sumideros que pueden ser considerados son la recarga y la evapotranspiración que en la mayoría de los casos se incluyen en los modelos a través de las condiciones de frontera.

3.3 Flujo multifásico

El flujo multifásico ocurre cuando otros fluidos además del agua, están en movimiento en el subsuelo. Estos fluidos a los que se hace referencia pueden incluir: gases y compuestos orgánicos e inorgánicos que no se disuelven completamente en el agua, es decir, son líquidos inmiscibles. Como ejemplos de estos se puede citar a algunos solventes, el petróleo crudo y la gasolina. Los procesos responsables del flujo de todos estos fluidos, son nuevamente los gradientes de potencial. Sin embargo, la presencia de más de un fluido en movimiento hace que la situación sea más complicada, pues el potencial causante de que cada fluido se mueva no necesariamente es el mismo que para el agua. De esta manera, cada fluido se puede mover en una dirección diferente y con diferente velocidad.

Otra complicación adicional se deriva del hecho de que los parámetros hidráulicos que caracterizan al suelo no se mantienen constantes cuando varios fluidos están presentes y compiten por el mismo espacio poroso. Por ejemplo, la permeabilidad relativa de una unidad geológica para un fluido particular como el agua, será pequeña si la proporción de agua presente en un volumen de medio poroso es pequeña, y tenderá a aumentar a medida que se incremente el contenido de agua en el mismo volumen.

Un efecto similar se tiene en la conductividad hidráulica que varía como función de la cantidad de agua en los poros, esto es, menor cantidad de agua se moverá a través de un suelo seco que a través de un suelo húmedo. Al igual que para flujo en una sola fase, el potencial del fluido en flujo multifásico también depende de las fuentes y sumideros que agreguen o remuevan fluido del sistema, solo que ahora el número de procesos se ve incrementado ya que los efectos del bombeo, la inyección y la evaporación afectan a cada

uno de los fluidos presentes, además de la transferencia de masa que puede ocurrir entre los propios fluidos. Los procesos de transporte de masa más comunes en agua subterránea son: la advección y la dispersión. Los procesos responsables de transferencia de masa más comunes, por lo general se asocian a reacciones químicas en las que intervienen procesos de sorción y reacciones irreversibles de primer orden.

3.4 Transporte de contaminantes disueltos en el agua

Una de las razones por las cuales los problemas que se relacionan con el transporte de contaminantes son difíciles de modelar es el número y la complejidad de los procesos que controlan este tipo de fenómenos. De manera general, los procesos a que se hace referencia son: en primer lugar aquellos responsables del flujo de materia y en segundo lugar, las fuentes y sumideros de material. Para el problema de movimiento de un contaminante, dichos procesos son el transporte de masa y los procesos de transferencia de masa respectivamente.

3.5 Advección

El segundo término del lado derecho en la ecuación de transporte (ecuación 2.63), se conoce como término de advección. La advección es el principal proceso responsable de la migración de un contaminante o soluto en el subsuelo. En este proceso, el transporte de un soluto se debe principalmente al movimiento mismo del agua subterránea en la cual está disuelto el contaminante. En muchos problemas de transporte, se puede suponer que el soluto se mueve en la misma dirección y a la misma velocidad que la del agua subterránea. Para que esto pueda suceder es necesario considerar que la densidad del agua y la del contaminante es aproximadamente la misma. En diversos problemas prácticos de transporte de contaminantes, el término de advección puede dominar sobre los demás términos que aparecen en la ecuación. Una manera de medir el grado en que la advección domina en un problema de transporte es usando el número de Peclet [Freeze y Cherry, 1979], un número adimensional que está definido como:

$$Pe = \frac{vL}{D} \quad (3.1)$$

donde v = módulo del vector velocidad promedio del agua

L = longitud característica que en el caso de modelos discretos es tomada como el ancho de una celda en la malla

D = coeficiente de dispersión

En problemas dominados por advección, también llamados problemas con frentes abruptos, el número de Peclet alcanza valores muy grandes. En problemas de advección pura, el número de Peclet llega a ser infinito. Cuando el proceso dominante es la advección, la solución numérica de la ecuación de transporte se ve afectada principalmente por dos tipos de problemas numéricos. El primer tipo es la dispersión numérica al momento de obtener la solución, causada principalmente por errores de truncamiento.

El segundo tipo de problemas numéricos corresponde a una oscilación artificial de la solución numérica. Este tipo de problemas se presenta debido al diseño de esquemas de alto orden que son utilizados para eliminar la dispersión numérica, y tiende a ser más severo cuando los frentes de concentración son abruptos [Lapidus y Pinder, 1982; Celia et al., 1990]

Una forma de eliminar estos dos tipos de problemas es utilizar un método combinado de Euler-Lagrange para discretizar la ecuación de transporte, que permite eliminar casi por completo la dispersión numérica y la oscilación artificial permitiendo que se pueda trabajar sin problemas el rango completo de números de Peclet desde 0 hasta ∞ [Neuman, 1981; 1984; Celia et al., 1990]

3.6 Dispersión

Como se describe en [Anderson, 1984; Bear y Verruijt, 1987], la dispersión mecánica se da como resultado de las variaciones en la velocidad a nivel de poro con respecto a la velocidad macroscópica promedio. La difusión molecular por otra parte, se genera como resultado de los gradientes en la concentración. Los efectos de esta última por lo general son secundarios y despreciables cuando se comparan con los efectos de la dispersión mecánica, y solamente llegan a ser importantes cuando la velocidad del agua subterránea es muy baja. La suma de los efectos combinados de dispersión mecánica y difusión molecular, se conoce como dispersión hidrodinámica.

El término de dispersión $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right)$ en la ecuación (2.63) representa una forma práctica de poder realizar los cálculos necesarios requeridos en el transporte sin tener que describir completamente el campo de velocidades, lo cual es casi imposible en la práctica.

3.7 Coeficiente de dispersión

El coeficiente de dispersión hidrodinámico \underline{D} para un medio poroso isotrópico está definido de acuerdo con [Bear y Verruijt, 1987; Istok, 1989] como:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{v} + \alpha_T \frac{v_y^2}{v} + \alpha_T \frac{v_z^2}{v} + D^* \quad (3.2a)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{v} + \alpha_T \frac{v_x^2}{v} + \alpha_T \frac{v_z^2}{v} + D^* \quad (3.2b)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{v} + \alpha_T \frac{v_x^2}{v} + \alpha_T \frac{v_y^2}{v} + D^* \quad (3.2c)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{v} \quad (3.2d)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{v} \quad (3.2e)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{v} \quad (3.2f)$$

donde

α_L = dispersividad longitudinal

α_T = dispersividad transversal

D^* = coeficiente de difusión molecular

v_x, v_y, v_z = componentes cartesianas del vector velocidad

$v = (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$ = módulo del vector velocidad

Las dos dispersividades independientes α_L y α_T utilizadas para definir el tensor de dispersión en un medio poroso isotrópico no son suficientes cuando se considera un medio poroso anisotrópico, el cual de acuerdo con [Bear y Verruijt, 1987], requiere de cinco dispersividades independientes. Como generalmente no es posible obtener las cinco dispersividades en el campo, para propósitos prácticos se supone que el coeficiente de dispersión hidrodinámico para medios porosos isotrópicos basado en estas dos dispersividades, es también aplicable a medios porosos anisotrópicos.

Como una forma de minimizar el efecto que esta suposición pudiera tener en los resultados de un modelo de transporte, se ha sugerido una forma alternativa para el tensor de dispersión debida a [Burnet y Frind, 1987] que considera dos dispersividades transversales, una dispersividad transversal horizontal α_{TH} , y una dispersividad transversal vertical α_{TV} , con lo que el tensor de dispersión queda expresado de la siguiente manera:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{v} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{v} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{v} + D^* \quad (3.3a)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{v} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{v} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{v} + D^* \quad (3.3b)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{v} + \alpha_{TV} \frac{v_x^2}{v} + \alpha_{TV} \frac{v_y^2}{v} + D^* \quad (3.3c)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_x v_y}{v} \quad (3.3d)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_x v_z}{v} \quad (3.3e)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{v} \quad (3.3f)$$

En el caso de que las dos dispersividades transversales sean iguales, el coeficiente de dispersión hidrodinámico representado por las ecuaciones (3.3a) a (3.3f) es igual al representado por las ecuaciones (3.2a) a (3.3f).

3.8 Fuentes y sumideros

El tercer término $\left(\frac{q_s}{\theta} C_s\right)$ del lado derecho de la ecuación (2.63) representa la masa de soluto disuelta en agua que entra en el sistema por medio de las fuentes, o la masa de soluto disuelta en agua que abandona el sistema a través de los sumideros.

Las fuentes o sumideros se pueden clasificar como distribuidos o puntuales. Entre las primeras se pueden considerar la recarga y la evapotranspiración, y entre las segundas se pueden incluir los pozos, los drenes y los ríos.

Cuando se incluyen fuentes de contaminantes en un modelo de transporte, se requiere especificar las concentraciones de cada una de ellas dentro del modelo. Por el contrario, cuando se contemplan sumideros no se requiere especificar la concentración de ninguna de éstas, ya que dicha concentración será igual a la que tiene el agua en el medio poroso. La única excepción que se tiene, en la cual la concentración de los sumideros puede ser diferente de la concentración del agua en el medio poroso es para la evapotranspiración, donde la concentración de ésta se puede considerar como cero.

3.9 Reacciones químicas

De entre todas las posibles reacciones químicas que se pueden incluir en un modelo de transporte, las más comunes por lo general son: las de sorción lineal o no lineal en equilibrio y las reacciones irreversibles de primer orden. Entre estas últimas se incluyen el decaimiento radiactivo y la biodegradación.

3.10 Sorción

El término sorción por lo general incluye: la adsorción, atracción del contaminante hacia la superficie del sólido, y la absorción, incorporación del contaminante en el interior del sólido. El intercambio iónico, adsorción con un remplazo de carga-carga de las especies iónicas sobre una superficie por otras especies iónicas en la solución. La sorción afectará de manera general a todas las especies disueltas en el agua subterránea en mayor o menor grado.

Para poder expresar matemáticamente el fenómeno de adsorción, se utilizan las isothermas de adsorción. En éstas, se contempla la relación funcional que existe entre la concentración

disuelta en el fluido y la adsorbida sobre la superficie del sólido. Por lo general los isothermas de adsorción se incorporan en el modelo de transporte a través del factor de retardación. De entre los isothermas de adsorción, se distinguen dos clases de éstos, Isothermas de Equilibrio e Isothermas de no-Equilibrio.

Los isothermas de equilibrio se basan en la suposición de que las cantidades de soluto en la superficie del sólido y en la solución adyacente están continuamente en equilibrio, y cualquier cambio en la concentración de uno de ellos produce un cambio instantáneo en la concentración del otro.

Los isothermas de no-equilibrio, consideran que la condición de equilibrio no se alcanza instantáneamente, sino que más bien se tiende a esta con cierta velocidad, la cual por lo general depende de ambas concentraciones. Los isothermas más comúnmente usados son los siguientes:

1. Isotherma de Freundlich. [Freundlich, 1926]

$$C = k_f C^a \quad (3.4)$$

donde $k_f =$ constante de Freundlich
 $a =$ exponente de Freundlich

Tanto k_f como a , son coeficientes que se obtienen de manera empírica.

Al incluir este isoterma en la ecuación de transporte (2.63) vía el factor de retardación R , dicho factor queda expresado de la siguiente manera.

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} a k_f C^{a-1} \quad (3.5)$$

2. Cuando $a=1$, el isoterma de Freundlich, ecuación. (3.4), se reduce al isoterma de equilibrio lineal, en donde la constante k_f es comúnmente reemplazada por K_d , con lo que se obtiene

$$C = k_d C \quad (3.6)$$

donde k_d = el coeficiente de distribución

El factor de retardación cuando se considera el isoterma lineal queda especificado como:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} k_d \quad (3.7)$$

En este isoterma se considera que la adsorción es instantánea, reversible y lineal. El coeficiente K_d es llamado coeficiente de distribución, y representa en cada instante, la masa de soluto sobre el sólido por unidad de masa de este último por unidad de concentración del soluto en la solución, $K_d = \frac{\bar{C}}{C}$. Algunas veces, para procesos de desorción, el valor de K_d puede diferir del considerado para procesos de adsorción. Esto significa que tales procesos no son completamente reversibles. También podría ocurrir que exista un límite para la capacidad de adsorción de las paredes del sólido, en cuyo caso el isoterma (3.6) tendría que ser modificado. Cuando se considera flujo no saturado, solo una parte del espacio vacío θ_w está ocupada por el agua, esto es, se tiene una saturación del medio dada por [Bear y Verruijt, 1987]

$$S_w = \frac{\theta_w}{\theta} \quad (3.8)$$

Cuando esto ocurre, solo una parte del área total del sólido participa en el proceso de adsorción o en el intercambio iónico. Como una de las muchas posibilidades que se tienen para definir la superficie del sólido en contacto con el fluido, supongamos que

$$\frac{\text{área de la interfase sólido - líquido}}{\text{área total del sólido}} = \frac{\text{masa participante del sólido}}{\text{masa total del sólido}}$$

y que a su vez esta razón es igual a

$$\frac{\text{parte del espacio vacío ocupada por el líquido}}{\text{volumen total del espacio vacío}}$$

que es igual a S_w , entonces, el isoterma lineal de equilibrio definido por (3.6) se puede expresar de acuerdo con [Bear y Verruijt, 1987] como:

$$\bar{C} = S_w K_d C \quad (3.9)$$

en donde K_d = coeficiente de distribución
 S_w = saturación del medio

3. La forma más general del isoterma de equilibrio lineal, está dado por la expresión

$$\bar{C} = k_1 C + k_2 \quad (3.10)$$

en donde k_1 y k_2 son coeficientes constantes.

La expresión para el factor de retardación sigue siendo la misma, ecuación (3.7).

4.- El isoterma no lineal de equilibrio de Langmuir está dado por la expresión [Langmuir, 1918]

$$C = \frac{k_3 C}{1 + k_4 C} \quad (3.11)$$

en donde k_3 y k_4 son coeficientes constantes

Para el isoterma no lineal de equilibrio de Langmuir, el factor de retardación se expresa como:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \left(\frac{k_3}{(1 + k_4 C)^2} \right) \quad (3.12)$$

5. El isoterma no lineal sugerido por Lindstrom-Van Genuchten tiene la expresión [Lindstrom et al., 1971; Van Genuchten, 1974]

$$C = k_5 C \exp(-2k_6 C) \quad (3.13)$$

en donde k_5 y k_6 son coeficientes constantes

6. El isoterma de no equilibrio para un sistema irreversible [Adamson, 1967] está dado por:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_7 C \quad (3.14)$$

donde k_7 = coeficiente de proporcionalidad constante.

7. Lapidus y Amundson, también propusieron un isoterma no lineal [Lapidus y Amundson, 1952] dado por:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_r (k_8 C + k_9 - C) \quad (3.15)$$

en donde k_8 y k_9 = coeficientes constantes
 k_r = coeficiente cinético

8. Langmuir por otra parte, propuso un isoterma de no equilibrio [Hendricks, 1972] cuya expresión está dada por:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_r \left(\frac{k_{10} C}{1 + k_{11} C} - C \right) \quad (3.16)$$

9. Van Genuchten y sus colaboradores, también mencionan un isoterma de no equilibrio [Van Genuchten, 1974] que está dado por:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_r (k_{12} C^{k_{13}} - \bar{C}) \quad (3.17)$$

Cuando en un modelo de transporte se está considerando la adsorción, solo uno de los isotermas anteriores se aplicará en cada caso particular. La selección del isoterma apropiado para un problema específico, y la determinación de los valores de los diferentes coeficientes que estos incluyen, se derivan de consideraciones termodinámicas y de experimentos con el suelo particular bajo consideración.

3.11 Decaimiento radiactivo y biodegradación

El término de reacciones irreversibles de primer orden $-\left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C}\right)$ en la ecuación (2.63), considera las pérdidas de masa de contaminante tanto la que se encuentra disuelta en el agua (C) como la que se encuentra adsorbida en el medio poroso $\left(\bar{C}\right)$ con la misma razón constante (λ). Dicha constante en general se da en términos de la vida media del contaminante o soluto.

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{t_{1/2}} \quad (3.18)$$

siendo $t_{1/2}$ la vida media del material radiactivo o biodegradable.

La constante $t_{1/2}$, nos da el tiempo requerido para que la concentración del contaminante decrezca a la mitad de su valor original. Puede suceder que para algunos tipos de biodegradación, la constante de degradación sea diferente para la concentración disuelta y adsorbida. Si este fuera el caso, el término de reacciones irreversibles de primer orden se deberá de expresar como:

$$-\lambda\left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C}\right) = -\lambda_1 C - \lambda_2 \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \quad (3.19)$$

donde se considera que la constante λ_1 es la constante de degradación para el contaminante o soluto disuelto en agua y λ_2 la constante de degradación para el contaminante adsorbido en el medio poroso.

Cuando componentes orgánicos y algunos inorgánicos están presentes como contaminantes, las transformaciones biológicas pueden ser procesos importantes, debido a que el contaminante original puede ser destruido biológicamente. Las transformaciones biológicas tienen dos ventajas principales (1) el contaminante puede ser completamente mineralizado para obtener un producto poco activo o más estable y (2) los procesos no son saturados como con sorción, intercambio o filtración. Los microorganismos pueden estar implicados

en reacciones redox, o con reacciones de sustitución-hidrólisis. Los microorganismos producen enzimas que permiten que las reacciones se lleven a cabo mucho más rápidamente. Es debido a esto que ciertas reacciones se pueden realizar mucho más rápido en presencia de microorganismos que en ausencia de ellos. Las capacidades metabólicas de los microorganismos que existen en los suelos y acuíferos son muy diversas y pueden permitir la biodegradación de una gran cantidad de contaminantes orgánicos.

Las reacciones químicas descritas hasta aquí, no son las únicas que ocurren en un proceso de transferencia de masa en agua subterránea. Existen otras que también vale la pena mencionar como son: Precipitación-Disolución, Reacciones Acido-Base, Complejación, Sustitución Hidrólisis y Reacciones Redox. De manera general, el esquema funcional de estas es el siguiente.

3.12 Precipitación y disolución

Los contaminantes disueltos en el agua pueden abandonar o ingresar a la solución por procesos de precipitación y disolución de la fase sólida. Ejemplos de procesos que actúan en la precipitación son: la hidrólisis y la oxidación o reducción [Runnells, 1976]. La hidrólisis puede conducir a la precipitación de hierro, manganeso, cromo y zinc. La oxidación o reducción favorece la precipitación de cromo, arsénico y selenio. La precipitación de contaminantes disueltos es de suma importancia debido a que atenúan el avance de los contaminantes. El mecanismo de reacción para este proceso es el siguiente:



donde C^+ = catión
 A^- = anión
 $(CA)_{(sólido)}$ = sólido precipitado

La relación termodinámica se establece por medio de

$$\{C^+\}\{A^-\} = K_{so} \quad (3.21)$$

donde K_{so} = solubilidad del producto

La relación establecida para este proceso no tiene una base de datos completa por lo que no está bien establecida.

3.13 Reacciones ácido-base

Las reacciones que implican la ganancia o pérdida del ion hidrógeno (H^+) son llamadas reacciones ácido-base. Los ácidos son especies químicas que donan un ion hidrógeno (H^+), mientras las bases son especies que aceptan un ion hidrógeno (H^+). Muchos contaminantes potenciales son susceptibles de cambiar su especie debido a un cambio en el pH. Por ejemplo, bajo condiciones de oxidación, el arsénico disuelto deberá estar presente en el agua subterránea normal con un pH de 7 a 8 en la forma de $HAsO_4^{-2}$. En cambio si el pH del agua es menor que 6, la forma dominante del arsénico oxidado es $H_2AsO_4^-$ y a muy bajo pH es $H_3AsO_4^-$. El comportamiento químico del arsénico en solución puede ser muy diferente dependiendo del número de protones asignados a éste. Por ejemplo, el comportamiento de sorción del $H_3AsO_4^-$ es muy diferente del comportamiento de sorción del $H_2AsO_4^-$. Este mecanismo se establece de la siguiente manera



en donde $HA =$ ácido
 $H^+ =$ ion hidrógeno
 $A^- =$ base conjugada o anión

La relación termodinámica para poder expresar esto es

$$\frac{\{H^+\}\{A^-\}}{\{HA\}} = K_a \quad (3.23)$$

donde $K_a =$ constante de disociación ácido/base

Esta relación está bien establecida y se usa de forma general.

3.14 Complejación

Los procesos de complejación son la combinación de cationes y aniones simples en especies acuosas más complejas. Los complejos pueden ser clasificados [Morel, 1983] como pares de iones de constituyentes mayores, complejos inorgánicos de metales raros y complejos orgánicos. Ejemplos de complejos son las siguientes reacciones.



donde Y^- es una especie orgánica.

En el transporte de masa, la complejación es importante debido principalmente al papel que ellos juegan en el incremento de la movilidad de los metales. La complejación también es importante en la sorción de metales sobre superficies cuyos cambios de carga es función del pH. En tales superficies, el comportamiento de sorción cambia dependiendo de cual especie metálica esté presente en la solución. Problemas más complejos pueden aparecer por el hecho de que cambiando la composición del agua, por ejemplo su pH, también cambia la concentración de especies metálicas en solución. Por consiguiente, en situaciones donde este tipo de sorción pueda ocurrir, la complejación de metales debe estar incluida para caracterizar completamente las reacciones de sorción. El mecanismo de reacción para este proceso es el siguiente



en donde

- C^+ = catión
- L^- = la liga
- CL = complejo resultante

Esta relación no está bien establecida debido a que la base de datos con que se cuenta está incompleta.

3.15 Sustitución hidrólisis

La hidrólisis y la sustitución son reacciones de transformación abiótica que afectan los contaminantes orgánicos en agua subterránea. El término hidrólisis se refiere específicamente a las reacciones de sustitución que involucren agua o algún componente del agua, por ejemplo:



donde R se refiere a la parte principal de la molécula orgánica y X es un halógeno, por ejemplo, Cl^- , Br^- . Sin embargo, no todas las reacciones de sustitución involucran agua. Por ejemplo HS^- puede reaccionar y ser sustituido por un halógeno en una reacción de la siguiente clase:



Las leyes de razón cinética para reacciones de sustitución-hidrólisis pueden ser complejas. La razón por la que las reacciones de transformación son importantes es que los productos son más susceptibles de biodegradar y más solubles. El mecanismo se puede indicar de la siguiente manera:



en donde R= el reductor
 N= el reducido u oxidante
 X= un grupo orgánico

La relación que expresa este proceso es:

$$\frac{\{RN\}\{X\}}{\{RX\}\{N\}} = K_{su} \quad (3.29)$$

donde K_{su} = constante de sustitución

La relación que describe este proceso no está bien establecida debido a que la base de datos utilizada para determinar dicha relación se encuentra incompleta.

3.16 Reacciones REDOX

Cualesquiera dos elementos que contengan valencias diferentes son potencialmente susceptibles de una transformación vía reacciones de oxidación y reducción, generalmente abreviada como reacciones "redox". Las especies para esto son abundantes, por ejemplo Nitrógeno, Carbono, Fósforo y especies traza menores como el Hierro, el Manganeso, el Uranio, el Selenio y el Arsénico. Las reacciones redox implican el movimiento de electrones de una especie a otra. Un ejemplo de una reacción redox es



Existen problemas fundamentales en la conceptualización de las reacciones redox. En muchas explicaciones se hace la suposición de que las reacciones entre especies acuosas son reversibles y en equilibrio. Sin embargo, hay evidencia abundante de que muchas reacciones redox son esencialmente irreversibles [Lindberg y Runnells, 1984], esto es, las reacciones pueden ir en una dirección fácilmente pero no pueden ser invertidas -sin intervención biológica- para que vayan en la dirección opuesta.

CAPÍTULO IV

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE

4.1 Introducción

Dada la importancia que representa la ecuación de transporte en la modelación de la contaminación de acuíferos y en otras ramas de la ciencia aplicada, dicha ecuación ha merecido la atención de muchos investigadores que la han tratado desde diversos puntos de vista. La solución de esta ecuación se ha abordado tanto desde un punto de vista analítico como desde un punto de vista numérico. Cuando se le ha tratado en forma analítica, su campo de aplicación se muestra muy reducido debido principalmente a todas las restricciones que se tienen que imponer a las propiedades del medio, a las condiciones de frontera y a las condiciones iniciales para poder obtener una solución. La principal importancia que ha tenido su solución analítica se debe por lo general a su exactitud, y también a que ha servido como base para validar las soluciones obtenidas para dicha ecuación por medio de algún método numérico. Las aplicaciones más útiles y diversas que se han realizado de esta ecuación emplean una solución numérica. Esta técnica ha permitido tratar problemas prácticos de mayor complejidad que consideran medios anisotrópicos y heterogéneos, con condiciones iniciales y de frontera también más complejas.

4.2 Evolución de los modelos de transporte

Durante la década de los 60's, se desarrollaron aplicaciones de la ecuación de transporte básicamente en forma analítica [Bear, 1961; Harleman y Rumer, 1962; Bachmat, 1967]. Diversos trabajos pusieron de manifiesto la importancia que tienen las heterogeneidades en el transporte de solutos [Skibitzke y Robinson, 1963; Mercado, 1967; Greenkorn y Kessler,

1969]. También en esta época aparecen las primeras soluciones numéricas para la ecuación de transporte [Shamir y Harleman, 1967].

Los 70's marcaron el inicio de un rápido desarrollo en las aplicaciones de la ecuación de transporte [Bredehoeft y Pinder, 1973], principalmente aquellas usadas en campo para modelar la contaminación de acuíferos como consecuencia del depósito de residuos tóxicos y el tratamiento de derrames. El acelerado desarrollo de la computación tanto en hardware como en software, permitió extender las aplicaciones para modelar sistemas más complejos.

Como es obvio, los avances en la simulación del transporte de contaminantes depende de la simulación de flujo. El manejo de modelos de flujo tridimensionales, y la aplicación de los métodos de elemento finito a la discretización de las ecuaciones diferenciales correspondientes, permitió el manejo de heterogeneidades macroscópicas en los modelos de transporte y condujo al reconocimiento general de éstas, como la causa primaria de la dispersión en problemas a escala real [Schwartz, 1977]. También se inició la aplicación del análisis estocástico para modelar flujo y transporte en agua subterránea [Freeze, 1975].

La incorporación de procesos químicos en los modelos de transporte, también evolucionó. Se comprendieron y clasificaron diversos tipos de reacciones químicas entre contaminantes y suelos, desarrollándose relaciones matemáticas para su inclusión en los modelos matemáticos de transporte. Surgió un interés creciente por el destino final de los compuestos orgánicos, que desencadenó una intensa investigación sobre los procesos y parámetros que controlan la sorción de compuestos orgánicos en el subsuelo [Gillham y Cherry, 1982; Cherry et al., 1984].

Diversos trabajos han generado el desarrollo de modelos computacionales de transporte prácticos, que actualmente son de uso común tanto en el ámbito científico como en el empresarial. Entre los más populares se encuentran: USGS MOC [Konikow y Bredehoeft, 1978], USGS SUTRA [Voss, 1984] y MT3D [Zheng, 1990, 1992].

4.3 Tratamiento numérico de la ecuación de transporte

Dos características principales distinguen a la ecuación de transporte: su componente advectiva y su componente dispersiva. En muchos problemas prácticos, el término advectivo es dominante en esta ecuación y en otros, el término dispersivo es el de mayor peso, generalmente esto ocurre cuando las velocidades en el sistema son muy pequeñas. Cuando la

dispersión es el proceso dominante en un problema dado, la solución numérica de la ecuación de transporte por lo general no presenta grandes problemas y se le puede resolver de manera satisfactoria utilizando cualquier método numérico tradicional como por ejemplo, el método de diferencias finitas o el método de elemento finito. Sin embargo, cuando la advección es el proceso dominante, la mayoría de los métodos numéricos -llámese diferencias finitas o elemento finito-, muestran un comportamiento de dispersión numérica, así como una oscilación artificial principalmente cuando se contemplan frentes abruptos. El primero de ellos es causado por errores de truncamiento y el segundo se genera por el diseño de esquemas de alto orden para eliminar el primero de los problemas.

Una forma de eliminar este tipo de problemas es considerar una discretización del dominio suficientemente fina y aplicar cualquiera de los métodos antes mencionados para obtener una solución aceptable de la ecuación de transporte. Sin embargo, esta forma de proceder no parece muy apropiada debido a los grandes requerimientos computacionales que se necesitan principalmente cuando el cálculo se realiza en una PC. Una forma de evitar algunas de estas dificultades es usando el método de características [Gardner et al., 1964; Celia et al., 1990], método que ya ha sido ampliamente usado para tratar problemas de transporte de contaminantes en agua subterránea principalmente cuando en dichos problemas domina el proceso de advección. La idea principal es formular la ecuación de transporte de acuerdo a un enfoque mixto, plantear una parte de la ecuación en términos Lagrangianos -conforme a un sistema de referencia en movimiento- y la otra parte en términos Eulerianos -conforme a un sistema de referencia fijo-. Utilizar el método de características para resolver el término de advección, y hacer uso del método de diferencias finitas o elemento finito para resolver los términos correspondientes a dispersión, fuentes-sumideros y términos de reacción.

El método de características aun cuando tiene la gran ventaja de tratar de manera efectiva los problemas dominados por advección, tiene asociadas ciertas limitaciones como el hecho de requerir de una gran cantidad de memoria computacional y gran tiempo de ejecución, principalmente cuando se trazan un gran número de partículas en movimiento como es el caso de problemas tridimensionales. El mismo método también puede conducir a fuertes discrepancias en el balance de masa, cuando se aplica en áreas donde se tiene un flujo fuertemente divergente o convergente como es el caso de celdas fuente o celdas sumidero [El-Kadi, 1988]. Esta serie de limitaciones de acuerdo con [Zheng, 1993] se pueden minimizar efectuando un cierto número de cambios en el método tradicional de características. Dichos cambios permiten reducir en forma sustancial el número total de

partículas en movimiento que son necesarias para realizar la simulación del transporte advectivo de un contaminante en agua subterránea. Los cambios a que hace referencia [Zheng, 1993] incluyen: un procedimiento dinámico de colocación de partículas, un esquema consistente de interpolación de velocidades y una técnica de seguimiento de partículas de alto orden, que acopladas con un manejo efectivo de inserción y eliminación de partículas en celdas fuentes y en celdas sumidero, pueden mejorar las discrepancias en el balance de masa. Si aunado a esto, se considera que la formulación Euler-Lagrange permite trabajar de manera satisfactoria el rango completo de números de Peclet $(0, \infty)$, se obtiene un procedimiento que permite tratar problemas de transporte de contaminantes en un campo más amplio y a la vez con quizá, los mismos recursos que antes permitían tratar problemas más sencillos.

4.4 Formulación Euler-Lagrange de la ecuación de transporte

En la formulación Euler-Lagrange de la ecuación de transporte, se distinguen dos términos por separado, aquellos que describen el transporte por advección y los que describen la dispersión y fuentes-sumideros. La forma de hacer esta separación es la siguiente:

Consideremos la ecuación de transporte en un medio poroso, ecuación (2.63), y desarrollemos el segundo término del lado derecho de esta ecuación.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) = v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{q_s}{\theta} \quad (4.1)$$

Si sustituimos la ecuación (4.1) en la ecuación (2.63) se obtiene

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - C \frac{q_s}{\theta} + \frac{q_s}{\theta} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right) \quad (4.2)$$

Dividiendo la ecuación (4.2) entre R, se obtiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \bar{v}_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{q_s}{R\theta} (C - C_s) - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right) \quad (4.3)$$

donde $\bar{v}_i = \frac{v_i}{R}$ representa la velocidad retardada de una partícula contaminante.

Para obtener una solución de la ecuación (4.3), se requiere la solución de la ecuación de flujo correspondiente, dado que esta proporciona los términos de flujo necesarios para realizar los cálculos de transporte. Si los cambios en la concentración no afectan apreciablemente la densidad del fluido, la ecuación de transporte puede ser desacoplada de la ecuación de flujo de manera que la ecuación de flujo y la de transporte se puedan resolver independientemente.

La ecuación (4.3) es una expresión Euleriana, en la cual el término $\frac{\partial C}{\partial t}$ nos da el cambio en la concentración del soluto (C) en un punto fijo en el espacio. Sin embargo, la ecuación (4.3) también se puede expresar de la siguiente manera

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{q_s}{R\theta} (C - C_s) - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right) \quad (4.4)$$

donde $\frac{DC}{Dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i}$

La ecuación (4.4) corresponde a una formulación mixta en donde el miembro izquierdo de esta ecuación $\frac{DC}{Dt}$ corresponde a una formulación Lagrangiana, mientras el miembro

derecho de la misma ecuación, corresponde a una formulación Euleriana. El término $\frac{DC}{Dt}$ da el cambio en la concentración del soluto (C) a lo largo de una curva característica de una partícula contaminante, esto es, una curva característica determinada por el campo de velocidades.

4.5 Método de características (MOC)

Se describe a continuación el método de características, incorporando los cambios sugeridos por [Zheng, 1993], con el fin de reducir la cantidad de memoria computacional necesaria para simular el transporte advectivo de contaminantes en un sistema.

En el método tradicional de características, se coloca un número uniforme de partículas en cada celda de la malla y con base en esto se simula el movimiento del contaminante. En el enfoque de colocación dinámica de partículas sugerido por [Zheng, 1993], se considera que hay un ahorro sustancial de memoria de computadora si se coloca un número máximo de partículas en celdas cuyo gradiente de concentración -llamado $DCELL_{i,j,k}$, ecuación (4.20)- sea mayor que una concentración DCEPS dada, y un número mínimo de partículas en celdas cuyo gradiente de concentración $DCELL_{i,j,k}$ sea menor que este valor. El valor de DCEPS se obtiene de manera empírica y tiene las siguientes consecuencias. Mientras más grande sea su valor, menos partículas son requeridas, y en consecuencia el procedimiento se vuelve más eficiente. Sin embargo, si DCEPS es demasiado grande, la solución puede no ser lo suficientemente exacta. Debido a esto se tiene la necesidad de mantener un balance entre exactitud y eficiencia cuando se selecciona DCEPS. Una forma de seleccionar el valor apropiado es iniciar con un valor tal como cero e incrementar éste hasta que la diferencia entre las soluciones sea obvia. Este enfoque puede reducir el número de partículas hasta un valor alrededor del 20% del número total de partículas comparado con el de una distribución uniforme.

Para obtener la velocidad en un punto arbitrario de la malla, por sencillez se puede utilizar un esquema de interpolación lineal con base en las cargas hidráulicas calculadas en el modelo de flujo. Para mover partículas de un punto a otro dentro de la malla, se hace uso del campo de velocidades calculado antes y de un algoritmo de seguimiento de partículas que puede ser, el algoritmo de Euler de primer orden o bien, el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden. El algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden generalmente es más exacto que el de Euler de primer orden y permite el uso de pasos de tiempo mayores. Sin embargo, el primero de ellos es computacionalmente menos eficiente que el segundo. Debido a esto se incluye la opción de usar el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden para mover partículas localizadas en celdas que contengan o que sean adyacentes a celdas fuente o a celdas sumidero, y el algoritmo de Euler de primer orden para mover partículas localizadas en cualquier otro lugar.

Como se puede ver de lo anterior, el procedimiento sugerido por [Zheng, 1993] hace más eficiente la traza de partículas al poder elegir entre el algoritmo de Euler de primer orden y el de Runge-Kutta de cuarto orden, algo que el método tradicional de características no posee. Por último, para evitar que se acumule un gran número de partículas en celdas sumidero y las celdas fuente siempre conserven un número suficiente de partículas para poder simular en forma adecuada el proceso de advección, en cada paso de tiempo la concentración de las partículas es actualizada para considerar los cambios debidos a dispersión, fuentes-sumideros y reacciones químicas y a continuación, todas ellas son reemplazadas por un nuevo conjunto de estas que será máximo o mínimo dependiendo del tipo de celda que se tenga.

A continuación se utiliza el método de Diferencias Finitas para aproximar la derivada total

$\frac{DC}{Dt}$ en la ecuación (4.4)

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{C_m^{n+1} - C_m^n}{\Delta t} \quad (4.5)$$

Sustituyendo la ecuación (4.5) en la ecuación (4.4) se obtiene.

$$C_m^{n+1} = C_m^n + \Delta t \cdot \text{RHS} \quad (4.6)$$

donde C_m^{n+1} = concentración promedio de soluto en la celda (m) de diferencias finitas en el nivel de tiempo (n+1).

C_m^n = concentración promedio de soluto en la celda (m) en el nivel de tiempo (n+1) con base en las concentraciones de las partículas en movimiento en el nivel de tiempo (n).

Δt = incremento en el tiempo.

RHS = aproximación en diferencias finitas de los términos del lado derecho de la ecuación (4.4). Dicha aproximación es explícita cuando se usan los valores de la concentración en el tiempo (n) e implícita cuando se usan los valores de la concentración en el nivel de tiempo (n+1).

La ecuación (4.6) constituye el algoritmo básico del método de características. En esta formulación, el término C_m^n en (4.6) el cual contiene los efectos de advección, se aproxima

con una técnica de seguimiento de partículas hacia adelante. El segundo término $\Delta t \cdot \text{RHS}$ de la misma ecuación (4.6) el cual considera los efectos de dispersión, fuentes-sumideros y reacciones químicas se resuelve vía un método Euleriano, que en este caso será el método de diferencias finitas. Debido a que la técnica de seguimiento de partículas es un método Lagrangiano basado en un sistema de coordenadas en movimiento, y el de diferencias finitas es un método Euleriano basado en una malla fija, el método de características pertenece a una familia de técnicas numéricas frecuentemente conocidas como métodos Euler-Lagrange. El método de características proporciona una solución exacta para problemas de transporte dominados por advección, debido a que está virtualmente libre de problemas de dispersión numérica. Dependiendo del método Lagrangiano que se utilice para aproximar el término de advección, el método combinado Euler-Lagrange se clasifica como: Método de Características [Garder, et al., 1964; Konikow y Bredehoeft, 1978]; y Método Modificado de Características [Russell y Wheeler, 1983; Cheng et al., 1984].

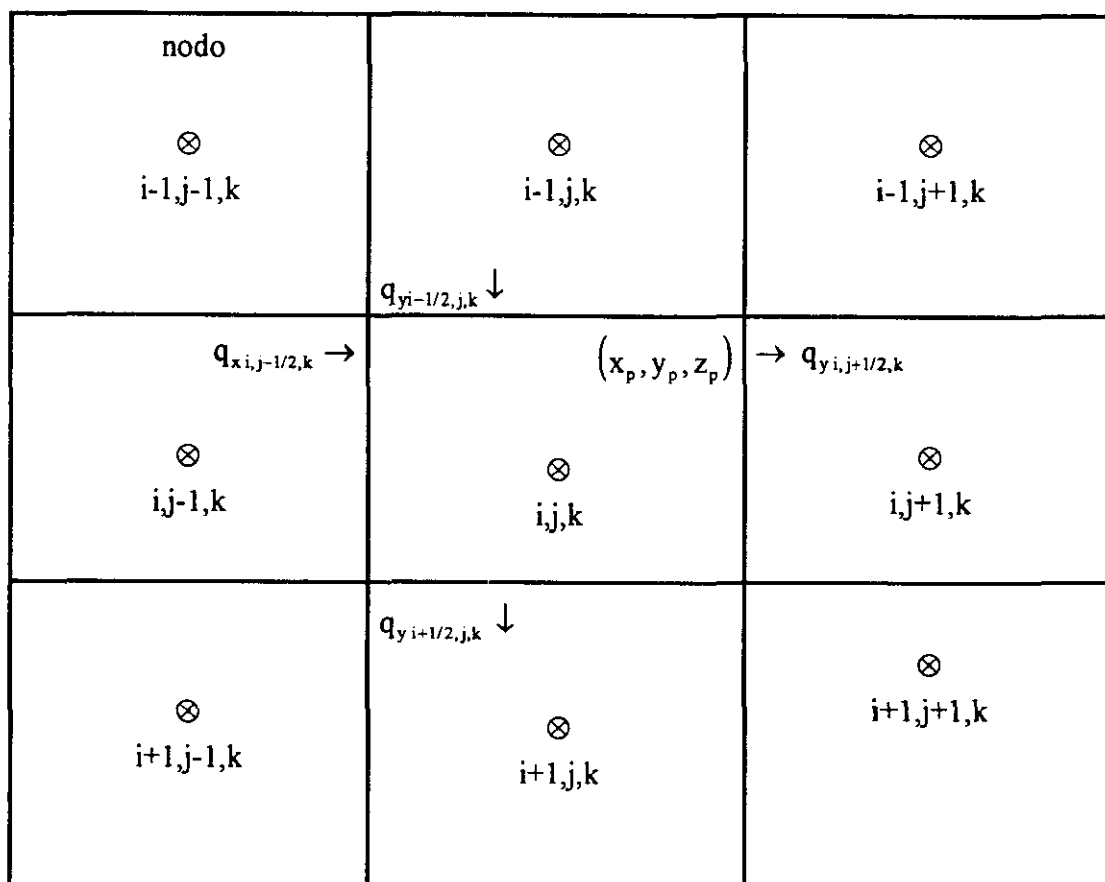


Figura 4.1 *Esquema de interpolación de la velocidad usado para el seguimiento de partículas*

En el método de características se usa la técnica de seguimiento de partículas para resolver el término de advección. Al principio de la simulación, se distribuye un conjunto de partículas en movimiento en el campo de flujo, con un patrón de distribución que puede ser fijo o aleatorio. A cada una de las partículas en movimiento se le asocia una posición y una concentración con respecto al sistema de coordenadas (figura 4.1). Las partículas son trazadas hacia adelante a través del campo de flujo usando incrementos pequeños de tiempo. Al final de cada incremento de tiempo se obtiene una concentración promedio $C_m^{n'}$ en cada celda (m) debida exclusivamente al proceso de advección, con base en las concentraciones de las partículas en movimiento que se localizan dentro de la m-ésima celda, de acuerdo con la siguiente relación.

$$C_m^{n'} = \frac{1}{np} \sum_{\ell=1}^{np} C_{\ell}^n \quad (4.7)$$

donde np = número de partículas en la m-ésima celda
 C_{ℓ}^n = concentración de la ℓ - éxima partícula en el nivel de tiempo (n) dentro de la celda (m).

Después de evaluar $C_m^{n'}$ para todas las celdas, se obtiene una concentración pesada $C_m^{n\hat{}}$ con base en la concentración $C_m^{n'}$ y la concentración en el nivel de tiempo anterior C_m^n .

$$C_m^{n\hat{}} = \omega C_m^{n'} + (1-\omega) C_m^n \quad (4.8)$$

donde ω = factor de peso cuyo valor se encuentra entre 0 y 1.

Una vez realizado el cálculo para todas las celdas, se usa $C_m^{n\hat{}}$ para calcular el segundo término en la ecuación (4.6), esto es, los cambios en la concentración debidos a dispersión, fuentes-sumideros y reacciones químicas con un método de diferencias finitas explícito, obteniéndose lo siguiente:

$$\Delta C_m^{n+1} = \Delta t \cdot DF(C_m^{n\hat{}}) \quad (4.9)$$

Hecho este cálculo se obtendrá la concentración para la celda (m) en el nivel de tiempo (n+1) como la suma de los términos C_m^n y ΔC_m^{n+1} :

$$C_m^{n+1} = C_m^n + \Delta C_m^{n+1} \quad (4.10)$$

Para completar el proceso en un intervalo de tiempo Δt , la concentración de las partículas en movimiento se actualiza para que reflejen los cambios debidos a la dispersión, fuentes-sumideros y reacciones químicas. Este proceso se repite hasta cubrir el periodo de tiempo deseado.

Una de las características de esta técnica es que está virtualmente libre de problemas de dispersión numérica, algo que crea serias dificultades cuando se usan otros esquemas numéricos. Su principal desventaja radica en que puede tornarse lento y requerir una gran cantidad de memoria en una computadora cuando se trabaja con un número grande de partículas en movimiento, especialmente en problemas tridimensionales.

4.6 Discretización espacial

Para discretizar espacialmente el sistema se sigue la convención utilizada por [McDonald y Harbaugh, 1988], en donde el sistema se discretiza en una malla de bloques o celdas, cuya localización se describe en términos de renglones (I), columnas (J) y capas (K) como se muestra en la figura 4.1. El ancho de las celdas en la dirección de los renglones en una columna dada J se denota por Δr_j , el ancho de las celdas en la dirección de las columnas en un renglón dado I se denota por Δc_i , y el espesor de las celdas en una capa dada K se denota por Δv_k . Debido a que el modelo de transporte requiere el uso de las coordenadas espaciales x,y,z, se considera que la orientación de los ejes coordenados coinciden con la orientación de los renglones, columnas y capas respectivamente. El origen del sistema coordenado se localiza en la esquina superior izquierda de la malla -celda (1,1,1)-. De acuerdo a la misma convención seguida en MODFLOW, las capas se numeran de arriba hacia abajo, esto es, la dirección positiva del eje z es hacia abajo.

La malla del sistema en el modelo de transporte se basa en una formulación de bloque centrado como se muestra en la figura 4.1. En esta formulación, se coloca un punto llamado nodo en el centro de la celda, en donde se calcula el valor de la concentración. Los

parámetros hidráulicos y químicos se consideran uniformes sobre toda la extensión de la celda.

4.7 Discretización temporal y evaluación del término advectivo

En modelos de flujo como MODFLOW, el tiempo de simulación se divide en "periodos de tiempo", y estos a su vez se dividen en pasos de tiempo si la simulación es transitoria. La solución del modelo de transporte utilizando el esquema combinado Euler-Lagrange se basa en un esquema explícito, por consiguiente, la longitud de los pasos de tiempo en el modelo de flujo pueden resultar demasiado grandes para ser utilizados en el modelo de transporte. Previendo los posibles problemas que pudieran resultar de esto, los pasos de tiempo utilizados en el modelo de flujo se subdividen a su vez en nuevos intervalos de tiempo llamados pasos de tiempo de transporte.

Tanto el método de características como el método modificado de características, usan la técnica de seguimiento de una partícula para aproximar la componente advectiva del proceso de transporte. Esta técnica requiere de la evaluación de la velocidad en un punto dado de la celda con base en la carga hidráulica obtenida en los nodos por medio del modelo de flujo, motivo por el cual se requiere interpolar la velocidad para poder realizar los cálculos de seguimiento de una partícula. Uno de los esquemas más simples de interpolación de la velocidad es el lineal por tramos [Pollock, 1988 y Zheng, 1988]. En este esquema se considera que la velocidad varía linealmente dentro de una celda de diferencias finitas con respecto a la dirección de esa componente. Por ejemplo, la componente x de la velocidad de Darcy en un punto arbitrario dentro de la celda (i,j,k) se puede expresar en términos de los flujos sobre las interfaces de las celdas en la misma dirección figura 4.1 como:

$$q_x(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_x)q_{i,j-1/2,k} + \alpha_x q_{i,j+1/2,k} \quad (4.11)$$

donde

$$q_{i,j-1/2,k} = -K_{i,j-1/2,k} \frac{(h_{i,j,k} - h_{i,j-1,k})}{x_j - x_{j-1}} = \text{flujo a través de la interface de las celdas } (i, j-1, k) \text{ e } (i, j, k).$$

$K_{i,j-1/2,k}$ = conductividad hidráulica promedio entre las dos celdas.

$$q_{i,j+1/2,k} = -K_{i,j+1/2,k} \frac{(h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k})}{x_{j+1} - x_j} = \text{flujo a través de la interface entre las celdas } (i, j-1, k) \text{ e } (i, j, k).$$

$$\alpha_x = \frac{x_p - x_{j-1/2}}{\Delta x_j} = \text{factor de interpolación para la componente x.}$$

x_p, y_p, z_p = coordenadas de la posición de la partícula.

$x_{j\pm 1/2}$ = coordenadas de las interfaces izquierda y derecha de la celda (i, j, k) .

Δx_j = ancho de la celda a lo largo del eje x en la celda (i, j, k) .

Con base en esto, la componente x de la velocidad lineal o velocidad de poro del agua está dada por:

$$v_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_x(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.12)$$

donde $\theta_{i,j,k}$ es el valor de la porosidad en la celda (i, j, k) .

De manera análoga, las componentes y,z de la velocidad están dadas por:

$$q_y(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_y)q_{i-1/2,j,k} + \alpha_y q_{i+1/2,j,k} \quad (4.13)$$

$$v_y(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_y(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.14)$$

donde $\alpha_y = \frac{y_p - y_{i-1/2}}{\Delta y_i}$ es el factor de interpolación para la componente y.

$$q_z(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_z)q_{i,j,k-1/2} + \alpha_z q_{i,j,k+1/2} \quad (4.15)$$

$$v_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_z(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.16)$$

donde

$\alpha_z = \frac{z_p - z_{k-1/2}}{\Delta z_k}$ es el factor de interpolación para la componente z

4.8 Seguimiento de partículas

Una vez que se conoce el campo de velocidades, se puede utilizar el esquema de seguimiento para mover partículas de una posición a otra y aproximar el movimiento advectivo del contaminante.

Uno de los algoritmos más sencillos que sirve para este propósito es el algoritmo de Euler de primer grado, el cual se puede expresar como:

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + \frac{\Delta t}{R} v_x(x^n, y^n, z^n) \\ y^{n+1} &= y^n + \frac{\Delta t}{R} v_y(x^n, y^n, z^n) \\ z^{n+1} &= z^n + \frac{\Delta t}{R} v_z(x^n, y^n, z^n) \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde $x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}$ = coordenadas de la partícula en el nivel de tiempo (n+1).

x^n, y^n, z^n = coordenadas de la misma partícula en el nivel de tiempo (n).

v_x, v_y, v_z = velocidades evaluadas en el punto (x^n, y^n, z^n) .

R = factor de retardación resultante de la incorporación de los isoterms de sorción en la ecuación de transporte.

Δt = tamaño del paso de transporte, el cual se determina por medio de la "Condición de Courant".

$$|\Delta t| \leq \gamma_c R \min\left(\frac{\Delta x}{v_x}, \frac{\Delta y}{v_y}, \frac{\Delta z}{v_z}\right) \quad (4.18)$$

donde γ_c = número de Courant.

Este valor representa el número de celdas que una partícula puede moverse en cualquier dirección en un paso de tiempo de transporte. La partícula se traza hacia adelante si el signo de Δt es positivo y hacia atrás si el signo de Δt es negativo.

El algoritmo de Euler funciona con bastante exactitud cuando las partículas se localizan en áreas donde la velocidad es relativamente uniforme. Sin embargo, cuando las partículas se localizan en áreas donde el flujo es convergente o divergente -por ejemplo alrededor de fuentes o sumideros-, el algoritmo de Euler de primer orden puede no ser suficientemente exacto, a menos que Δt sea muy pequeño. Una forma de solucionar este problema es utilizar un algoritmo de orden mayor. El algoritmo de Runge Kutta de cuarto orden tiene las características necesarias para ser utilizado con este propósito. La idea básica de este algoritmo es evaluar la velocidad cuatro veces en diferentes puntos de la trayectoria de seguimiento: una en el punto inicial, dos en los puntos intermedios y una en el punto final. Una velocidad pesada con base en los valores calculados en estos cuatro puntos se utiliza para mover la partícula a su nueva posición $(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1})$. Este procedimiento queda expresado de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ y^{n+1} &= y^n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \\ z^{n+1} &= z^n + \frac{1}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4) \end{aligned} \quad (4.19)$$

donde

$$k_1 = \Delta t v_x(x^n, y^n, z^n, t^n)$$

$$k_2 = \Delta t v_x\left(x^n + \frac{k_1}{2}, y^n + \frac{l_1}{2}, z^n + \frac{m_1}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_3 = \Delta t v_x\left(x^n + \frac{k_2}{2}, y^n + \frac{l_2}{2}, z^n + \frac{m_2}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_4 = \Delta t v_x(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t)$$

$$l_1 = \Delta t v_y(x^n, y^n, z^n, t^n)$$

$$l_2 = \Delta t v_y\left(x^n + \frac{k_1}{2}, y^n + \frac{l_1}{2}, z^n + \frac{m_1}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$l_4 = \Delta t v_y(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t)$$

$$m_1 = \Delta t v_z(x^n, y^n, z^n, t^n)$$

$$m_2 = \Delta t v_z\left(x^n + \frac{k_1}{2}, y^n + \frac{l_1}{2}, z^n + \frac{m_1}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$m_3 = \Delta t v_z\left(x^n + \frac{k_2}{2}, y^n + \frac{l_2}{2}, z^n + \frac{m_2}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$m_4 = \Delta t v_z(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t)$$

El algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden es más exacto y permite usar trazas de seguimiento mayores. Sin embargo, el esfuerzo computacional requerido para este algoritmo es considerablemente mayor que el algoritmo de Euler de primer orden, de modo que comparativamente es menos eficiente para simulaciones tridimensionales donde se requiere un gran número de partículas.

4.9 Colocación dinámica de partículas

El primer paso en el método de características, es colocar un determinado número de partículas en cada celda de la malla de diferencias finitas. Si la distribución fuera homogénea, el número de partículas a colocar sería bastante grande, y el esfuerzo computacional también sería grande. Con la intención de disminuir el número de partículas que se van a utilizar, se define una condición llamada "gradiente de concentración relativo", definido de la siguiente manera:

$$DCCELL_{i,j,k} = \frac{CMAX_{i,j,k} - CMIN_{i,j,k}}{CMAX - AMIN} \quad (4.20)$$

donde $CMAX_{i,j,k}$ y $CMIN_{i,j,k}$ = concentración máxima y mínima en la vecindad inmediata de la celda (i,j,k).

$CMAX$ y $CMIN$ = concentración máxima y mínima en toda la malla.

Se dan dos números, NPH y NPL , y se impone la condición de que cuando $DCCELL_{i,j,k}$ sea mayor que una concentración dada $DCEPS$, se utilicen NPH partículas, y cuando $DCCELL_{i,j,k}$ sea menor que $DCEPS$, se utilicen NPL partículas.

$$\begin{aligned} NP_{i,j,k} &= NPH & \text{si} & DCCELL_{i,j,k} > DCEPS \\ NP_{i,j,k} &= NPL & \text{si} & DCCELL_{i,j,k} \leq DCEPS \end{aligned} \quad (4.21)$$

donde $NP_{i,j,k}$ = número de partículas colocadas en la celda (i,j,k).

Debido a que en las celdas fuente las partículas fluyen hacia afuera de la celda y en celdas sumidero las partículas convergen hacia el interior de la celda, en cada paso de tiempo de transporte es necesario agregar o remover partículas con el fin de mantener un control sobre éstas, esto es, se requiere de un mínimo -diferente de cero- de partículas que pueda tener una celda y también de un máximo -para que no crezca indefinidamente el número- de partículas. Por ejemplo, si al final de un paso de tiempo de transporte se acumulan demasiadas partículas en una celda sumidero, todas las partículas que se localicen en la celda se reemplazan por el número máximo permitido de manera que la celda continúe con la misma concentración sin que el número de partículas rebase el máximo permitido.

Cada partícula tiene asociada sus coordenadas espaciales (x,y,z) y su concentración. La concentración inicial de la partícula se asigna como la concentración de la celda donde la partícula se inicializó. Al principio de cada paso de transporte, todas las partículas se mueven sobre un incremento de tiempo Δt , usando para ello la técnica de seguimiento descrita antes. Al final de cada paso de tiempo de transporte, las coordenadas (x,y,z) de las partículas en movimiento se actualizan para que reflejen su nueva posición. La concentración promedio de una celda al final de un paso de tiempo de transporte debido a

advección solamente $C_{i,j,k}^{n*}$ se obtiene de la suma de las concentraciones de todas las partículas que se localizan en la celda, dividida entre el número de partículas.

$$C_{i,j,k}^{n*} = \frac{1}{np_{i,j,k}} \sum_{\ell=1}^{np_{i,j,k}} C_{\ell}^n \quad \text{si } np_{i,j,k} > 0 \quad (4.22)$$

Si el número de partículas en la celda es cero, la concentración de la celda se hace igual a la concentración que tenía la propia celda en el nivel de tiempo anterior

$$C_{i,j,k}^{n*} = C_{i,j,k}^n \quad \text{si } np_{i,j,k} = 0 \quad (4.23)$$

Después de evaluar el término $C_{i,j,k}^{n*}$ en cada celda, se usa este valor para calcular los cambios de concentración debidos a dispersión, fuentes-sumideros y reacciones químicas ($\Delta C_{i,j,k}^{n+1}$) y la concentración de todas las partículas en movimiento se actualiza para que reflejen los cambios en la concentración ($\Delta C_{i,j,k}^{n+1}$) calculada en cada celda donde se localice cada partícula. La forma de actualizar la concentración de cada partícula en movimiento localizada en la celda (i,j,k) es:

$$C_{\ell}^{n+1} = C_{\ell}^n + \Delta C_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.24)$$

donde C_{ℓ}^{n+1} = concentración de la ℓ - ésima partícula localizada en la celda (i,j,k) en el nuevo nivel de tiempo.

La ecuación (4.24) se aplica directamente si ($\Delta C_{i,j,k}^{n+1}$) es positiva. Si esta diferencia fuera negativa, la concentración de la partícula en movimiento puede llegar a ser negativa si su concentración en el nivel de tiempo anterior C_{ℓ}^n es cero o más pequeña. Para prevenir este efecto, se da más peso a las partículas con altas concentraciones que a las partículas con bajas concentraciones.

$$C_i^{n+1} = C_i^n \cdot \left(1 + \frac{\Delta C_{i,j,k}^{n+1}}{C_{i,j,k}^n} \right) \quad (4.25)$$

4.10 Método modificado de características (MMOC)

Este método es similar al método de características excepto en la forma de aproximar el término de advección. En el método modificado de características (MMOC) se coloca una sola partícula en el nodo de cada celda de la malla en cada nuevo nivel de tiempo (n+1). La partícula se traza hacia atrás para encontrar su posición en el nivel de tiempo (n). La concentración asociada con esa posición se usa para aproximar el término C_m^n de la siguiente manera.

$$C_m^n = C^n(x_p) = C^n(x_m - d) \quad (4.26)$$

- donde
- x_p = posición que alcanza la partícula empezando en el punto nodal (m) -nodo de la celda (m) cuando es trazada hacia atrás a lo largo de la característica en el incremento de tiempo Δt .
 - x_m = vector de posición del punto nodal (m).
 - d = desplazamiento nodal característico o distancia a lo largo de la curva característica desde x_m hasta x_p .
 - $C^n(x_p)$ = concentración en la posición x_p en el nivel de tiempo (n). Dicha concentración por lo regular se obtiene de la interpolación de las concentraciones de los puntos nodales vecinos.

En el método modificado de características se usa una sola partícula para cada celda de la malla de diferencias finitas, mientras que en el método de características se requieren de varias partículas por celda. Por consiguiente el método modificado de características usado con un esquema de interpolación de bajo orden es generalmente más rápido que el método de características. El método modificado de características también está virtualmente libre de problemas de oscilación artificial si se implementa con un esquema de interpolación de bajo orden. El método modificado de características con un esquema de interpolación de bajo orden, por lo regular funciona mejor en situaciones donde no se tienen frentes abruptos.

4.11 Procedimiento (MMOC)

El primer paso en el procedimiento (MMOC), es mover una partícula localizada en el nodo de la celda hacia atrás en el tiempo, usando para ello la técnica de seguimiento de partículas. El propósito de este seguimiento hacia atrás es encontrar la posición original de la partícula desde la cual inició su movimiento hasta alcanzar el nodo en que se encuentra al final del paso de tiempo de transporte. La concentración asociada con esa posición, denotada por $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ es la concentración de la celda debida a advección solamente en el intervalo de tiempo Δt .

Como la posición $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ generalmente no coincide con el nodo de la celda, es necesario interpolar la concentración en $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ con base en las concentraciones en los nodos vecinos. Para esta interpolación, se usa un polinomio de primer grado, esto es, lineal en una dimensión, bilineal en dos dimensiones y trilineal en tres dimensiones. La ecuación general para el polinomio de interpolación es como sigue: suponiendo que \hat{x} esté localizado entre los nodos x_{j-1} y x_j , \hat{y} entre los nodos y_{i-1} y y_i , y \hat{z} entre los nodos z_{k-1} y z_k , entonces:

$$C(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \left. \begin{aligned} & \left\{ (1-\omega_x)(1-\omega_y)(1-\omega_z)C_{i-1,j-1,k-1} + (1-\omega_x)\omega_y(1-\omega_z)C_{i,j-1,k-1} \right. \\ & \left. + \omega_x(1-\omega_y)(1-\omega_z)C_{i-1,j,k-1} + \omega_x\omega_y(1-\omega_z)C_{i,j,k-1} \right. \\ & \left. + (1-\omega_x)(1-\omega_y)\omega_z C_{i-1,j-1,k} + (1-\omega_x)\omega_y\omega_z C_{i,j-1,k} \right. \\ & \left. + \omega_x(1-\omega_y)\omega_z C_{i-1,j,k} + \omega_x\omega_y\omega_z C_{i,j,k} \right\} \end{aligned} \right\} (4.27)$$

donde los factores de interpolación $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ están dados por:

$$\left. \begin{aligned} \omega_x &= \frac{\hat{x} - x_{j-1}}{0.5\Delta x_j + 0.5\Delta x_{j-1}} \\ \omega_y &= \frac{\hat{y} - y_{j-1}}{0.5\Delta y_i + 0.5\Delta y_{i-1}} \\ \omega_z &= \frac{\hat{z} - z_{k-1}}{0.5\Delta z_k + 0.5\Delta z_{k-1}} \end{aligned} \right\} \quad (4.28)$$

Este procedimiento está planteado para tres dimensiones. Sin embargo, si alguna dimensión no se simula, el factor de peso en esa dirección es cero, y si alguna celda es inactiva, el cálculo no se realiza.

4.12 Método híbrido de características (HMOC)

Como se ha descrito en las secciones anteriores, cualquiera de los dos esquemas (MOC) o (MMOC) se puede utilizar para resolver la ecuación de transporte en su formulación mixta Euler-Lagrange. La selección del método a usar se basa en el tipo de frente de concentraciones que se tenga presente, y de los recursos computacionales disponibles. Por lo general, el esquema MOC requiere de mayor memoria y mayor tiempo de ejecución. Una manera de combinar la eficiencia computacional del esquema (MMOC) con la exactitud del esquema (MOC), es utilizar un procedimiento automático para resolver el término de advección por medio del esquema (MOC) cuando se presenten frentes abruptos de concentración, y utilizar el esquema (MMOC) para resolver el término de advección cuando se tengan frentes suaves de concentración. La condición para seleccionar uno u otro esquema, se da en función del gradiente local de concentración que se tenga y de un valor especificado $gc = \nabla C$ para éste. Si el gradiente de concentraciones en un lugar determinado es mayor que dicho valor, se utiliza el esquema (MOC), en caso contrario se utiliza el esquema (MMOC).



CAPÍTULO V

TÉCNICAS PROBADAS DE REMEDIACIÓN DE ACUÍFEROS

5.1 Introducción

La calidad del agua subterránea puede alterarse por procesos que ocurren en forma natural y por procesos que de una u otra manera tienen que ver con las actividades realizadas por el hombre. De acuerdo con [Pye y Kelly, 1984], las tres formas principales de alterar la composición química del agua subterránea son las siguientes:

- i)* La primera de ellas tiene que ver con procesos naturales como la lenta circulación del agua subterránea en estratos geológicos de baja permeabilidad, que incide directamente en la elevación de las concentraciones de cloruros, nitratos, sulfatos, hierro y otros químicos inorgánicos del agua subterránea. La evapotranspiración en fuentes de agua superficiales da como resultado la elevación de concentraciones de sales en este tipo de acuíferos. La prolongada estada del agua en estratos arcillosos aumenta la concentración de silicatos en el agua como: la calcita, óxidos de hierro, manganeso y cuarzo entre otros.
- ii)* La segunda fuente principal de contaminación del agua subterránea, se relaciona con el depósito de residuos tóxicos en lugares que permiten que éstos migren hacia los acuíferos o fuentes de abastecimiento. Entre los distintos tipos de residuos depositados se pueden mencionar: aguas residuales industriales y residenciales que se depositan en lagunas, estanques, hoyos y pequeñas cuencas. Desechos sólidos, tanto industriales como residenciales, lodos industriales, salmuera residual de la explotación petrolera y residuos mineros tanto sólidos como líquidos, que sin previo tratamiento se depositan directamente en el suelo.

iii) La tercera forma principal de contaminación mencionada por [Pye y Kelley, 1984], se relaciona directamente con la actividad del hombre, y en ésta se incluyen: derrames y fugas accidentales de tanques subterráneos de almacenamiento de productos industriales o productos inorgánicos, que incluyen ácidos y cáusticos. Esta última forma de contaminación tiene asociada un problema adicional, no puede ser detectada hasta el momento en que surgen problemas de salud entre la población o se presentan problemas con la flora o la fauna local. De hecho, el indicador principal está relacionado con la salud de la población, y si ésta no se ve seriamente afectada a corto plazo, un gran problema de contaminación puede pasar desapercibido. Las figuras 5.1, 5.2 y 5.3 muestran las tres formas principales de contaminación del agua subterránea.

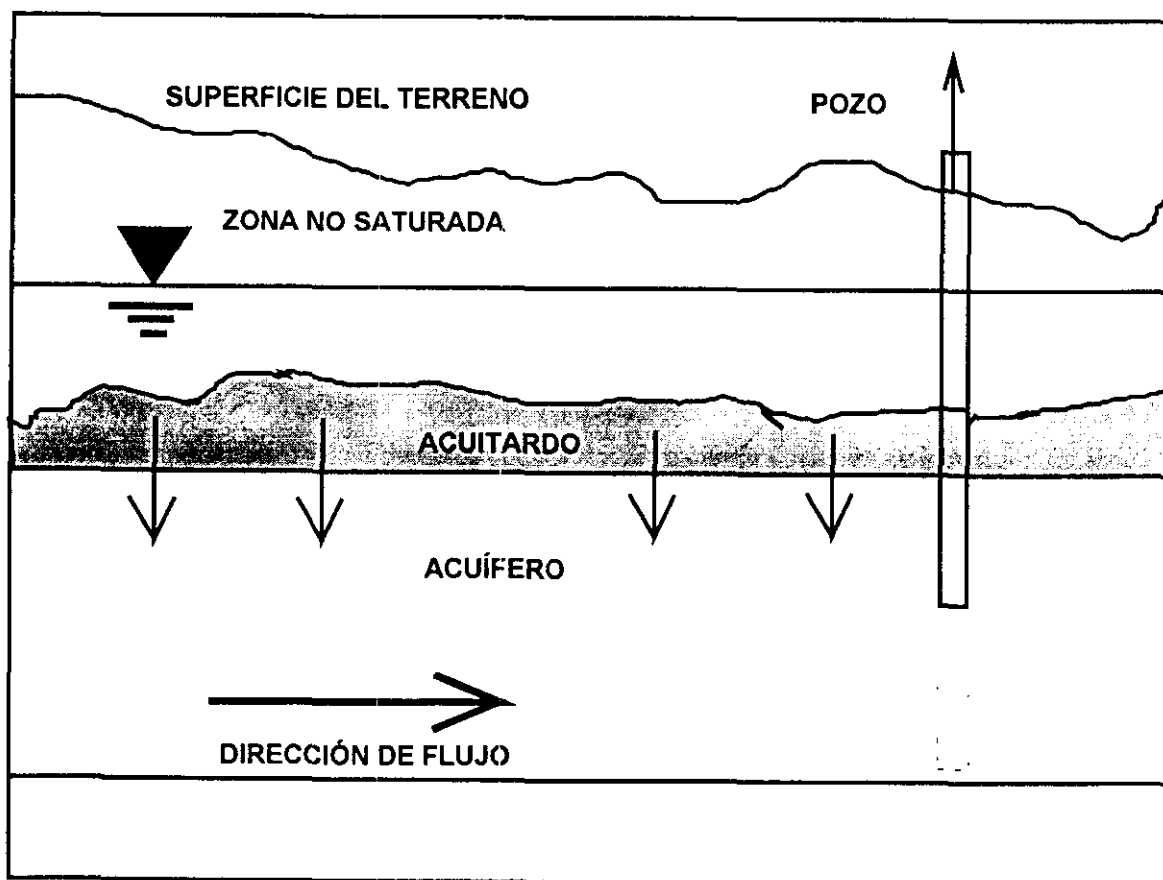


Figura 5.1 *Contaminación del agua subterránea como consecuencia de una lenta circulación del agua en un estrato geológico. La interacción prolongada entre el agua y un estrato geológico de baja permeabilidad, ocasiona un incremento en el agua de los minerales que constituyen el estrato.*

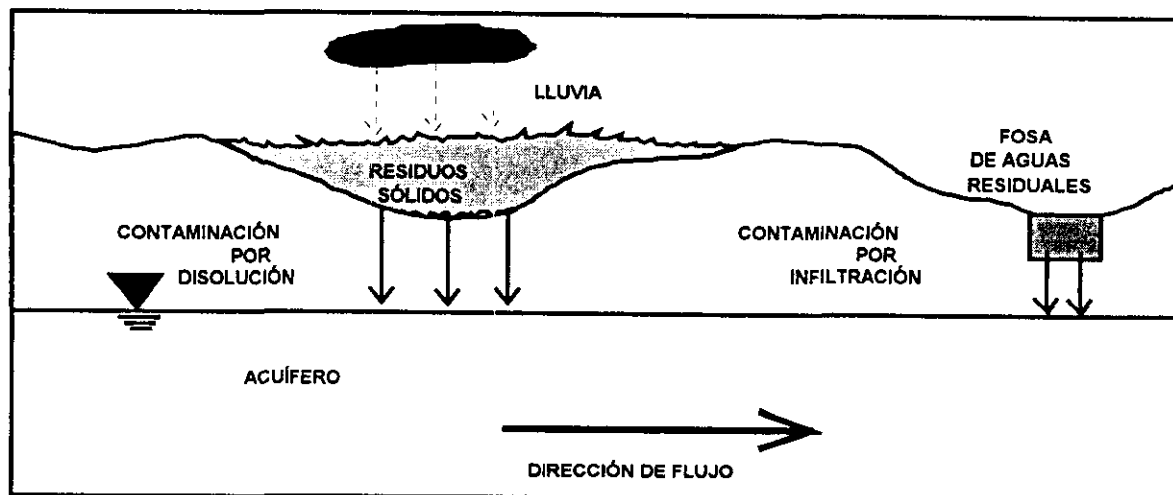


Figura 5.2 Contaminación del agua subterránea debido al depósito de residuos sólidos en lugares no propicios para ello y vertido de aguas residuales industriales y residenciales en fosas ubicadas en suelos con buena permeabilidad.

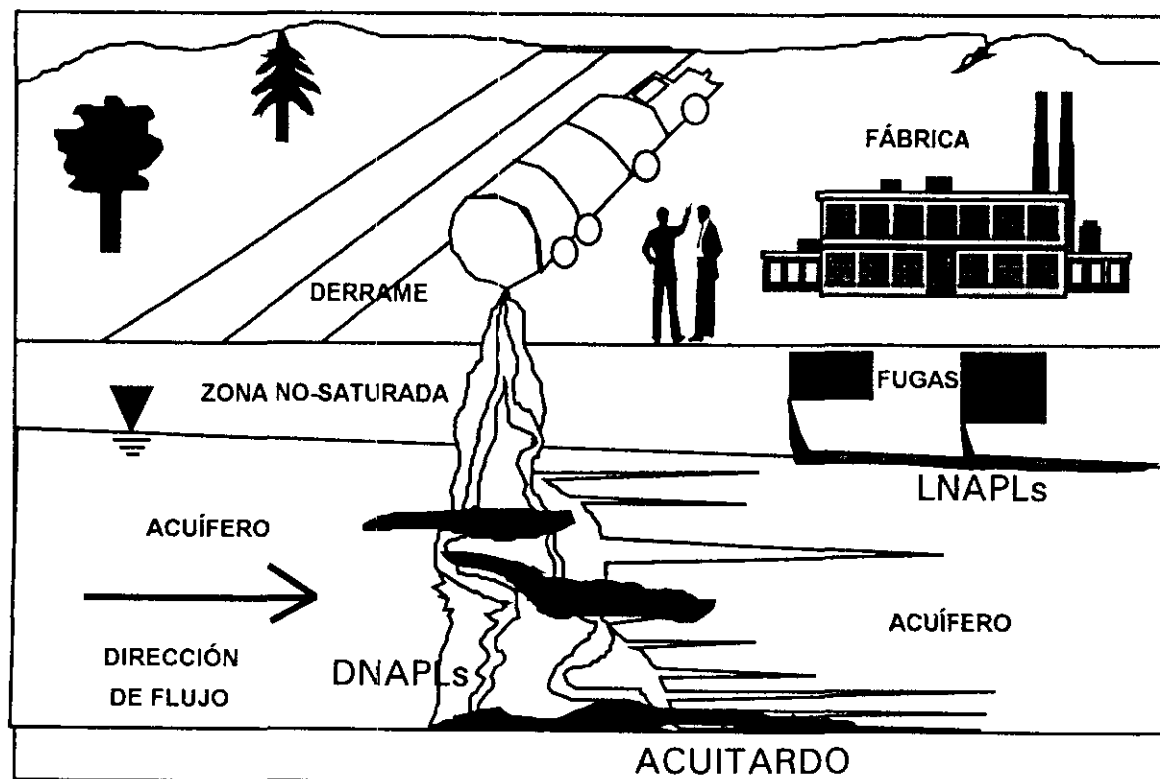


Figura 5.3 Contaminación del agua subterránea por derrames accidentales de productos tóxicos y fugas de tanques subterráneos de almacenamiento.

De las tres formas principales de contaminación del agua subterránea antes mencionadas, las dos últimas representan las más activas y de mayor impacto ambiental en áreas urbanas e industrializadas, donde se manejan y usan enormes volúmenes de sustancias contaminantes que potencialmente pueden afectar la calidad del agua subterránea. Por ejemplo, los registros de problemas de contaminación en países industrializados como Estados Unidos y Canadá, indican que hay alrededor de 2,500,000 casos de problemas de contaminación de agua subterránea que necesitan ser evaluados para una posible remediación [National Research Council, 1990].

En países donde la industria se encuentra en un estado de desarrollo como lo es México, existe la posibilidad real de tener problemas de contaminación de aguas subterráneas del mismo tipo, dado que, los procesos industriales que se llevan a cabo tienen una tendencia creciente y no se cuenta con un control sobre el depósito de residuos industriales. De hecho, no se tiene un registro confiable del volumen de sustancias tóxicas que se manejan o usan, y aún cuando en nuestro país no se hayan reportado de manera oficial casos de contaminación de agua subterránea, esto no implica que no los haya, si no más bien significa que hacen falta evaluaciones para determinar si se tiene o no tal problema.

5.2 Contaminación de acuíferos con DNAPLs

De los grandes problemas de contaminación en agua subterránea que en la actualidad se tienen registrados en los países industrializados, los que con mayor frecuencia se presentan son aquellos en los que aparecen como contaminantes los solventes orgánicos clorados. De entre estos últimos, los más frecuentemente encontrados en el agua subterránea son: el tricloroetileno (TCE), el tricloroetano (TCA), el tetracloroetileno (PCE) y el dicloroetano (DCA), [Cherry y Feenstra, 1990].

El fenómeno que ha dado origen a muchos de los problemas de contaminación de agua subterránea por solventes orgánicos clorados es principalmente: la gran cantidad en que éstos se producen, transportan, usan y depositan por muchos de los sectores industriales de países desarrollados y también de países en vías de desarrollo, aun cuando en estos últimos, el problema no se pueda valorar debido a la escasez de datos. Estas sustancias, aun cuando son prácticamente inmisiones en agua, son lo suficientemente solubles como para que una pequeña fracción de ellas se disuelva y la contamine. Debido a que los solventes orgánicos clorados tienen la propiedad de ser más densos que el agua y prácticamente inmisiones en ella, se les ha denominado DNAPLs (Dense Non-Aqueous Phase Liquids). Su baja

solubilidad en agua, mayor densidad que ésta y baja viscosidad, permiten que cuando ingresan a un sistema acuífero en un estado relativamente puro a través de la superficie, puedan viajar rápidamente hacia abajo a través de la zona no-saturada, alcanzar la zona saturada y moverse a través de ella como una fase no acuosa separada y llegar a grandes profundidades, constituyendo una fuente permanente de contaminación para el agua subterránea.

Feenstra y Cherry (1988) ponen de manifiesto el peligro potencial resultante de las fuentes contaminantes subterráneas de DNAPLs. Considérese un volumen de 800 ℓ de (TCE) en un medio arenoso de $3 \times 3 \times 3 \text{ m}^3$, con una conductividad hidráulica de 10^{-3} cm/s , un gradiente hidráulico de 0.01 y una porosidad del 30%, se tiene aproximadamente una velocidad de flujo del agua de 3 cm/día . Si el (TCE) se disuelve a razón de 7.3 gr/día , (el 10% de su solubilidad en agua), esta fuente le llevaría al menos 300 años el disolverse por completo.

La gran dificultad que presentan para ser removidos, ocasiona que los DNAPLs cuando ingresan a un sistema acuífero en forma relativamente pura, ocasionen problemas ambientales y de salud a largo plazo y en magnitud creciente si no se controlan a tiempo. En los lugares en donde se producen o usan, los suelos y el agua subterránea se contaminan debido a: fugas de tanques de almacenamiento, fugas en las redes de distribución, derrames accidentales en su transportación o como resultado del vaciado en drenajes o en ríos que se utilizan para descarga de aguas residuales generadas en procesos industriales. Entre las principales industrias que usan los solventes orgánicos clorados se encuentran: las que elaboran adhesivos o aerosoles, las industrias productoras de textiles, las industrias dedicadas a la electrónica y un gran número de industrias que requieren del desgrasado de metales. Como ejemplo de esto se tiene que el tricloroetileno (TCE) se usa en operaciones de lavado en seco, desgrasado de metales, como solvente para grasas, ceras, gomas y tintes, para remover el hollín de calderas industriales, en la manufactura de removedores de pintura, tintas para impresión y fumigantes para roedores.

La contaminación del agua subterránea por DNAPLs representa un gran problema debido a que los estándares de potabilidad del agua para muchos solventes orgánicos es muy baja. Por ejemplo, los solventes orgánicos disueltos en el agua con concentraciones de microgramos por litro representan un riesgo potencial para la salud. De hecho, se considera que solventes como el tricloroetileno (TCE) y el cloroformo son cancerígenos, pueden causar daños al hígado y al riñón, ya que basta ingerir agua con una concentración superior a

5 microgramos por litro durante períodos relativamente cortos, del orden de 3 a 5 años, para que se manifiesten problemas de salud [US EPA, 1992].

En México, la presencia de contaminantes organo-clorados ha sido detectada en el subsuelo de canales de aguas residuales [Mazari-Hiriart y Mackay, 1993; Mazari-Hiriart *et al.*, 1996]. Se conoce que el consumo de agua contaminada con solventes orgánicos clorados como: el dicloroetano DCA, el dicloroetileno DCE y el tricloroetano TCA, tienen consecuencias en: la pérdida de peso corporal, la degeneración hepatocelular, el carcinoma hepático y la mortalidad fetal. El tricloroetileno TCE, se relaciona con enfermedades como: depresión, sordera, daño al hígado, problemas cardiacos y problemas visuales. [Ramos y Rodríguez, 1997].

Analizando lo anterior, se pueden valorar las implicaciones que tiene un problema de contaminación de agua subterránea con DNAPLs. Sin embargo, por si esto no fuese un motivo suficiente para mostrar la importancia del problema, considérese la capacidad intrínseca de contaminación del (TCE). El límite de potabilidad de este compuesto es $0.005 \text{ mg} / \ell$, entonces, un miligramo de (TCE) puede potencialmente contaminar 200ℓ de agua; un gramo de (TCE) puede hacer lo mismo con 200 m^3 de agua, y de manera equivalente, un kilogramo puede contaminar 200 Mm^3 . Un volumen como este último lo podría utilizar una población de aproximadamente 500,000 habitantes durante 5 años, considerando que se utilizan 200ℓ por persona cada día. De ahí la importancia que tiene el detectar a tiempo y en su caso contener o restaurar acuíferos contaminados con solventes orgánicos clorados. El mejor de los casos sería el prevenir este tipo de problemas.

En la tabla 5.1 se muestran los límites de potabilidad del agua recomendados para varios compuestos orgánicos e inorgánicos, por parte de la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) y la Comisión Nacional del Agua en México (CNA). Como puede observarse en la tabla, los límites de potabilidad recomendados para orgánicos en la mayoría de los casos, son mucho menores que aquellos recomendados para inorgánicos.

Tabla 5.1 *Concentración máxima permisible de diferentes compuestos, recomendada en el agua para consumo humano. Nótese la diferencia entre valores para orgánicos y para inorgánicos.*

COMPUESTO	CONCENTRACIÓN MÁXIMA (mg / ℓ)	
	USA ⁽¹⁾	CNA ⁽²⁾
COMPUESTOS INORGÁNICOS		
Antimonio (Sb)	0.01	0.1
Arsénico (As)	0.05	0.05
Bario (Ba)	1.0	1.0
Cadmio (Cd)	0.01	0.01
Cloro (Cl)	250	250
Cobre (Cu)	1.0	1.0
Cromo (Cr ^{IV})	0.05	0.05
Fierro (Fe)	0.3	0.3
Flúor (F)	1.4-2.4	1.5
Manganeso (Mn)	0.05	0.1
Nitrato (NO ₃ ⁻)	45	5.0
Plomo (Pb)	0.05	0.05
Sulfato (SO ₄ ²⁻)	250	500
Zinc (Zn)	5.0	5.0

	COMPUESTOS ORGÁNICOS	
Tricloroetileno (TCE)	0.005	0.03
Dicloroetano (DCA)	0.005	-----
Tetracloroetileno (PCE)	0.005	-----
Cloroformo (TCM)	0.1	-----
Tricloroetano (TCA)	0.2	-----

(1) U.S. Environmental Agency, 1992.

(2) Criterios Ecológicos de Calidad del Agua. México, 1989.

En forma paralela al crecimiento de problemas de contaminación en agua subterránea, se han desarrollado técnicas para su remediación aún cuando en la mayoría de los casos, los problemas superan tanto en número como en complejidad a las técnicas. De hecho, la elección de un método de remediación para su aplicación en un sitio específico o incluso, el decidir cuando la remediación de un sitio es necesaria, con frecuencia son tareas bastante difíciles, principalmente porque se requieren datos para valorar las consecuencias ambientales y de salud que un problema de este tipo puede originar, y estos, por lo regular son escasos o simplemente no existen.

Para valorar un problema de contaminación generalmente se tiene que cuantificar: el número de personas afectadas, el porcentaje en que un acuífero fue afectado, el volumen de contaminante liberado, su toxicidad, persistencia y movilidad dentro del flujo subterráneo. Este reconocimiento puede indicar la severidad de un problema de contaminación y permite analizar la posibilidad de aplicar un esquema de remediación para controlar o eliminar dicho problema. De acuerdo con [Charbeneau *et al.*, 1992], la propuesta de un esquema de remediación está asociada con los siguientes elementos de información.

El primero de ellos es conocer si se ha liberado algún contaminante en un sitio específico. En segundo lugar se requieren conocer cuales son las trayectorias potenciales que seguirá el contaminante desde su punto de descarga hasta su punto de exposición. El tercer elemento consiste en determinar si hay comunidades potencialmente expuestas en los puntos de exposición. Si al examinar las trayectorias potenciales del contaminante se encuentra que no existe el riesgo de afectar la salud de una comunidad o los recursos naturales de que ésta se sirve, el proponer un esquema de remediación para eliminar el contaminante liberado, puede ser considerado de poca importancia o al menos puede ser cuestionado desde un punto de vista económico, dado que, se puede argumentar que será suficiente con aplicar un método de remediación pasivo en el que por medio de procesos puramente naturales -sin la intervención del hombre-, como la biodegradación, la volatilización y la absorción, la propia naturaleza se encargue de eliminar dicho contaminante. Por el contrario, si la descarga de un contaminante en un determinado lugar afecta la salud de una comunidad o sus recursos naturales, la intervención del hombre se hace necesaria para eliminar lo más rápidamente posible el contaminante descargado.

5.3 Técnicas más comunes de remediación

Muchas interrogantes pueden plantearse cuando un problema de contaminación del agua subterránea se presenta, por ejemplo: ¿que medidas se pueden tomar para que tal problema no afecte la salud de una comunidad?. ¿se dispone de alguna herramienta que permita contener o eliminar dicho problema?. Una posible respuesta a estas preguntas es: existen técnicas para tratar problemas de contaminación, aun cuando no se dispone de una para cada problema que se presente. Entre las posibles técnicas de remediación de acuíferos que podrían utilizarse para tratar un problema de contaminación, se encuentran las siguientes:

- Método de barreras de aislamiento.
- Método de bombeo y tratamiento.
- Biorremediación de acuíferos contaminados.
- Método de embudos y compuertas.

De los métodos antes mencionados, sólo los dos primeros pueden considerarse como técnicas probadas, en virtud de que éstos se han aplicado un número suficiente de veces en problemas reales como para tener un conocimiento concreto que nos permita estimar el tiempo y costo requerido para alcanzar una meta de remediación específica. Considerando que este trabajo está enfocado a la remediación de acuíferos, y tomando en cuenta que sólo se hará uso de los dos primeros métodos en una aplicación en el siguiente capítulo, se dará una descripción detallada de los métodos: barreras de aislamiento y bombeo y tratamiento.

5.4 Método de barreras de aislamiento

Considerando que la restauración de un acuífero contaminado por DNAPLs es una meta bastante difícil de alcanzar, la mejor propuesta que se puede hacer a corto plazo es: aislar la fuente en el lugar y al mismo tiempo eliminar total o parcialmente la pluma generada. Esto permite restaurar parcialmente el acuífero. Para aislar una fuente contaminante se pueden colocar barreras de baja permeabilidad alrededor de la zona fuente, para desviar parcial o totalmente el flujo de agua en esta zona, en combinación con un esquema de bombeo y tratamiento para inducir un gradiente hacia el interior de las barreras figura 5.4.

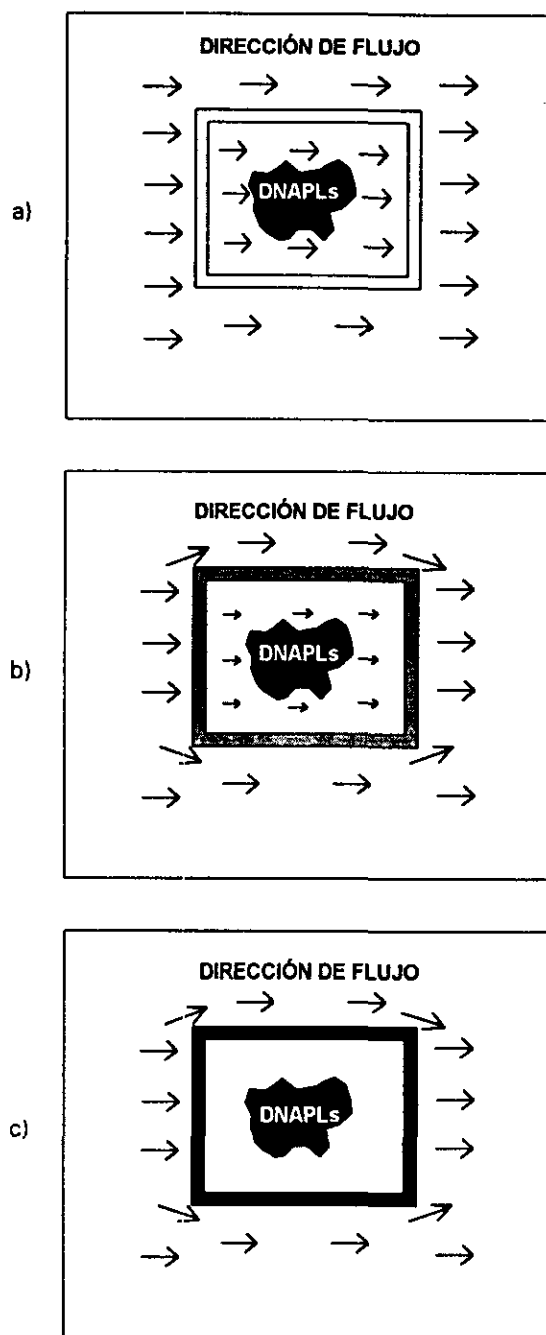


Figura 5.4 *Desviación lateral del flujo a través de la zona fuente dependiendo de que tan baja sea la permeabilidad de las barreras de aislamiento. a) barreras con alta permeabilidad. b) barreras con una permeabilidad media. c) barreras con una permeabilidad muy baja.*

De manera esquemática, la figura 5.5 muestra una vista en planta de la contención de una zona fuente DNAPLs por medio de barreras de aislamiento, usando además un pozo de extracción para no permitir el flujo hacia el exterior. La figura 5.6 muestra una sección transversal del mismo esquema.

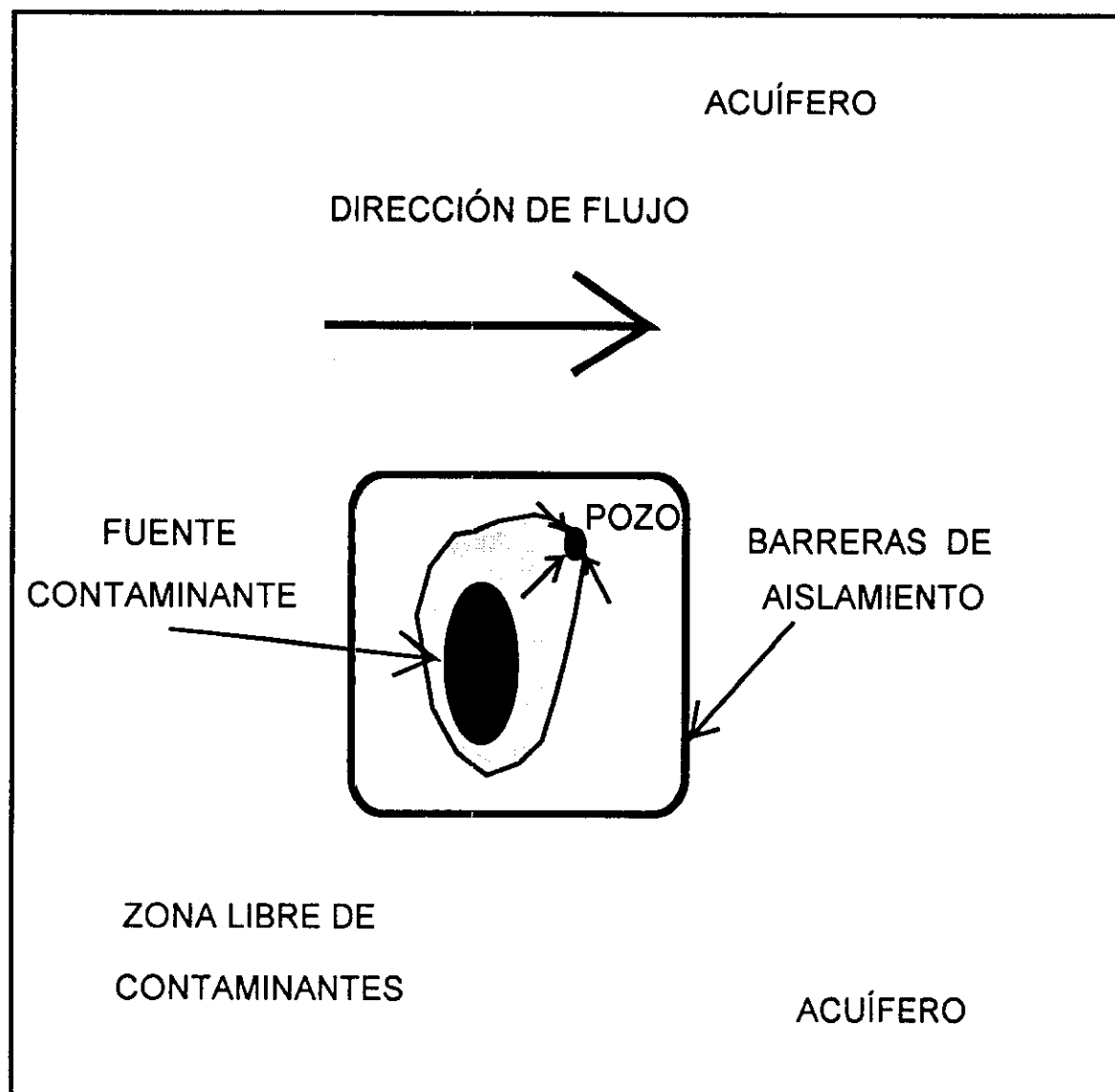


Figura 5.5 *Vista en planta del método de barreras de aislamiento utilizadas para contener una zona fuente DNAPLs. El pozo en operación tiene el propósito de inducir un gradiente hidráulico negativo hacia el interior de la zona fuente.*

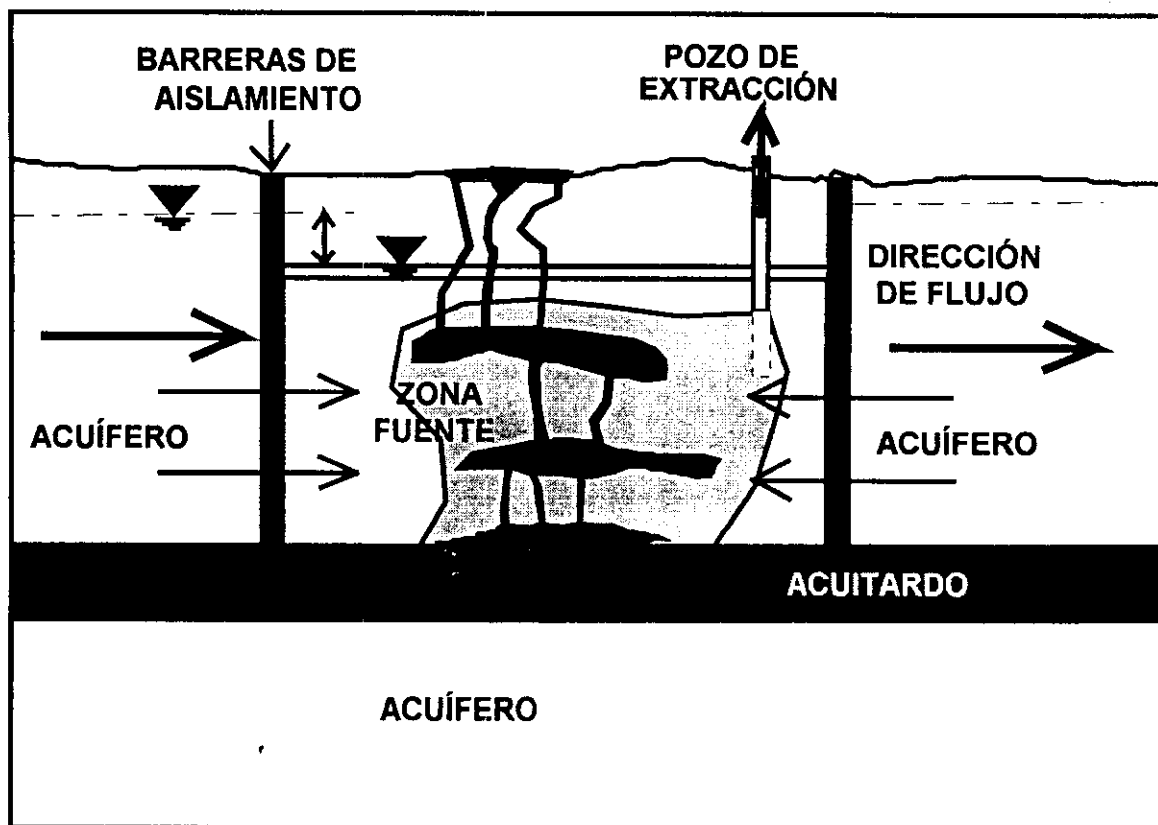


Figura 5.6 Sección transversal del método de barreras de aislamiento utilizando barreras verticales para contener una fuente contaminante. Se utiliza un esquema de bombeo para inducir un gradiente hidráulico negativo hacia el interior de la zona fuente.

Debido a que en muchos casos la fuente contaminante se encuentra distribuida desde unos cuantos metros por debajo de la superficie hasta cientos de metros por debajo de ella, y considerando que las barreras de aislamiento no pueden instalarse hasta esas profundidades, la forma de contener una fuente de estas características es utilizar barreras de aislamiento en la parte superficial y utilizar bombeo y tratamiento en la parte profunda.

Los tipos de materiales que generalmente son empleados en la construcción de barreras de aislamiento incluyen: mezclas de suelo-bentonita, mezclas de cemento-suelo, mezclas de bentonita-cemento, mezclas de asfalto, polietileno de alta densidad, láminas de acero con espesores promedio de 4 a 15 mm. Los espesores de las barreras cuando se utiliza alguna de las mezclas antes mencionadas, se encuentran en el intervalo de 0.1 m hasta 0.5 m [Pankow y Cherry, 1996].

Como es obvio, la conductividad hidráulica del material que se utilice para construir las barreras juega un papel importante en la efectividad del método. No hay un valor específico de la conductividad hidráulica que deba alcanzarse para que las barreras funcionen de manera efectiva. Sin embargo, es de esperarse que mientras menor sea ésta, menor bombeo será requerido para mantener aislada la fuente contaminante, de hecho existen varias técnicas disponibles para la construcción de barreras de aislamiento que indican que es suficiente una permeabilidad menor a 10^{-6} ó 10^{-7} *cm/s* [Cherry *et al.*, 1992], para que estas funcionen de manera adecuada.

Esta técnica puede combinarse con otras como: biorremediación, embudos y compuertas y bombeo y tratamiento de manera directa y simple para incrementar la efectividad de eliminación o contención de la fuente o de la pluma contaminante. De su aplicación combinada se han obtenido los mejores resultados [Ehrenfeld y Bass, 1984; Canter y Knox, 1986; Thomas *et al.*, 1987; Mercer *et al.*, 1990].

En el caso de fuentes superficiales de contaminantes, principalmente sólidos, la forma como se ha aplicado este método es tendiendo una cubierta impermeable sobre toda el área que ocupa la fuente, para evitar que el agua de lluvia fluya a través de los desechos, los disuelva parcialmente y los conduzca hacia abajo hasta el nivel freático, en donde se iniciaría la formación de la pluma correspondiente.

Las ventajas que ofrece la técnica de aislamiento y/o contención son las siguientes:

- Es una técnica pasiva.
- Para fuentes DNAPLs cercanas a la superficie, 30 metros o menos, evitan que la contaminación se extienda y en consecuencia se tiene un control de ésta.
- El mantenimiento requerido para contener una fuente contaminante superficial es mínimo comparado con el que requieren otros métodos, como por ejemplo bombeo y tratamiento.
- Existen técnicas probadas para la construcción de las barreras de aislamiento que permiten que éstas tengan permeabilidades inferiores a 10^{-6} *cm/s*.

- Puede utilizarse para todo tipo de contaminantes.
- Pueden hacerse variantes del método para utilizar cortinas de tratamiento.
- Puede combinarse de manera simple con métodos como embudos y compuertas, biorremediación y bombeo y tratamiento.

Las limitaciones del método de barreras de aislamiento son las siguientes:

- No se puede aplicar a grandes profundidades, mayores a 30 metros, debido a que su costo es muy elevado.
- Existe poca información respecto a la vida útil de las barreras de aislamiento. La expectativa de vida de éstas se encuentra alrededor de 100 años.
- El costo de instalación de la barreras de aislamiento generalmente es alto.

5.5 Método de bombeo y tratamiento

De entre las técnicas de remediación con que se cuenta en la actualidad, el método de bombeo y tratamiento se ha establecido como una de las de mayor uso para el saneamiento de acuíferos contaminados. Este hecho la ha constituido en una de las pocas técnicas probadas que se tienen. En esencia, este método consiste de la extracción de agua contaminada desde el acuífero por medio de pozos de extracción para su tratamiento en la superficie utilizando para ello diversas técnicas, para posteriormente reinyectarla de manera tal que facilite la limpieza o al menos no interfiera con ella.

Esta técnica se ha recomendado frecuentemente [US, EPA, 1989] en virtud de no existir técnicas probadas que muestren mejores resultados para el tratamiento de acuíferos contaminados. De acuerdo con el Comité de la National Research Council (1994), la técnica puede aplicarse de forma más eficiente cuando los potenciales sitios a restaurar se clasifican de la siguiente forma:

Categoría 1

- Acuíferos cuyos contaminantes se encuentran totalmente disueltos, se tiene un medio homogéneo con una conductividad mayor a 10^{-5} cm/s y un factor de retardación menor a 10. Este es el caso ideal para operar el método de bombeo y tratamiento.

Categoría 2

- Acuíferos cuyos contaminantes se encuentran totalmente disueltos, en un medio heterogéneo.
- Acuíferos con contaminantes disueltos y adsorbidos en un medio homogéneo.

Categoría 3

- Acuíferos en medios fracturados con contaminantes disueltos y adsorbidos.
- Acuíferos con contaminantes adsorbidos en un medio heterogéneo.
- Acuíferos que contienen LNAPLs (sustancias poco solubles en agua y menos densas que ésta), y un medio homogéneo o heterogéneo.
- Acuíferos que contienen DNAPLs (sustancias poco solubles en agua y más densas que ésta), y un medio homogéneo.

Categoría 4

- Acuíferos que contienen LNAPLs y DNAPLs en un medio fracturado o en un medio heterogéneo.

Las categorías están ordenadas en forma creciente de acuerdo a la dificultad que presentan para alcanzar una meta de remediación para un sitio específico. La clasificación anterior nos permite hacer un análisis cualitativo de las expectativas de remediación que se pueden obtener aplicando el método de bombeo y tratamiento [National Research Council, 1994].

Entre las críticas más frecuentes que ha recibido esta técnica se encuentran:

- Su elevado costo de instalación y mantenimiento.
- El tiempo relativamente largo -años y quizá décadas- que debe mantenerse en operación para obtener buenos resultados.

Se han desarrollado nuevas técnicas de remediación para el saneamiento de acuíferos contaminados, pero la mayoría de ellas se encuentra en la actualidad en etapa experimental a nivel laboratorio o a nivel campo, y ninguna de ellas ha probado ser mejor que el método de bombeo y tratamiento principalmente cuando la limpieza se tiene que hacer a grandes profundidades, mayores de 50 m, y a muy bajos niveles de concentración para contaminantes en solución.

El esquema básico que se sigue para poder aplicar el método de bombeo y tratamiento en un problema específico está constituido por los siguientes puntos de acuerdo con [Hoffman, 1993]:

- La localización y eliminación -en los casos en que esto sea posible- de fuentes de contaminación de agua subterránea que se encuentran en la superficie y en la zona no saturada para disminuir su impacto.
- Una caracterización detallada de la hidrogeología y la química del lugar.
- Diseño inicial del esquema de remediación que contenga la pluma y la fuente.
- El uso de la computadora como ayuda en la interpretación de datos, despliegue gráfico de los mismos y como un sistema de apoyo en la toma de decisiones.
- Instalación de un campo inicial de pozos.
- Determinación de los niveles de limpieza apropiados.
- Un sistema de monitoreo extensivo para poder observar los avances de la remediación.
- Una reevaluación continua de la operación del campo inicial de pozos, incluyendo un rediseño más apropiado -manejo dinámico-.
- La reinyección de agua tratada para aumentar la rapidez de limpieza de los contaminantes.

Se da a continuación una descripción detallada de cada uno de los elementos que deben considerarse en el método de bombeo y tratamiento.

La localización de las fuentes contaminantes de agua subterránea que se encuentren en la superficie y/o en la zona no-saturada con el fin de disminuir su impacto

La localización y caracterización de las fuentes de contaminación es un aspecto fundamental en la aplicación de cualquier método de remediación. El localizar las fuentes nos coloca en posición de removerlas -cuando esto sea posible-, aislarlas, o llevar a cabo algún tratamiento que disminuya su impacto. Su caracterización implica el conocer el tipo de contaminante que la compone, su masa o volumen total descargado, el área total afectada por la infiltración de químicos y los registros temporales de su descarga. Puede ocurrir que toda esta información no esté disponible, ya sea porque el contaminante se haya liberado hace mucho tiempo, o que el sitio se encuentre abandonado, o que simplemente no se lleve registro alguno. La falta de información para definir la fuente contaminante es uno de los errores que en la actualidad causan mayor problema en el diseño de un esquema de remediación. Los datos necesarios para caracterizar la pluma incluyen: su distribución espacial y temporal así como sus propiedades físicas y químicas [U.S. EPA, 1986].

Debido a que no todos los componentes del contaminante se detectan en los análisis rutinarios, se hace necesario utilizar indicadores químicos que reflejen la posibilidad de contaminación de un sitio determinado. Por lo general, los indicadores químicos se seleccionan en base a su movilidad, persistencia, sencillez de medida y volumen de contaminantes en el sitio. Al principio y al final de la operación de limpieza se deben realizar análisis para todos los constituyentes del contaminante, y con mayor frecuencia se requieren análisis para detectar los indicadores químicos. Las propiedades químicas de la pluma son necesarias para determinar los mecanismos de transporte del contaminante. Las propiedades que influyen en la movilidad de los químicos disueltos en el agua son: su solubilidad acuosa, su densidad, su coeficiente de partición octanol-agua, su coeficiente de partición de carbono orgánico, la constante de la ley de Henry y su biodegradabilidad. Después del análisis de las muestras, los resultados de los datos de concentración deberán ser graficados en dos o tres dimensiones para determinar su distribución espacial. Las gráficas de delimitación de la pluma y los resultados de las pruebas de bombeo del acuífero nos permiten estimar la migración de los contaminantes e identificar las posibles localizaciones para los pozos de inyección y extracción usados para la remediación.

Caracterización de la hidrogeología y la química del lugar.

Algo esencial para decidir la localización del campo inicial de pozos de extracción, es la descripción detallada de la geología regional y local del sitio, como podría ser el tipo de material y su distribución. Como parte de la investigación geológica que se debe llevar a cabo en el lugar, se pueden recolectar muestras de sedimentos o rocas con el fin de realizar análisis de laboratorio para determinar algunos parámetros del suelo como conductividad hidráulica, porosidad, diámetro medio del grano, identificación mineralógica, coeficiente de partición, coeficiente de distribución y coeficiente de saturación para los químicos de interés. La determinación de estos parámetros nos pueden proporcionar información de la extensión de la pluma contaminante.

Debido a que todo esquema de remediación se ve afectado por el flujo de agua subterránea, las características de éste se deben conocer con suficiente exactitud, esto es, se debe conocer la conductividad hidráulica del medio, su coeficiente de almacenamiento, el espesor del material, así como el campo de velocidades. Los pozos pueden ser usados para realizar pruebas de bombeo y determinar la conductividad hidráulica.

Otro elemento importante es la determinación de las fronteras físicas e hidráulicas que afectan la dirección del flujo. En general el flujo de agua subterránea depende de la porosidad y la conductividad hidráulica del medio a través del cual viaja, así como del gradiente hidráulico que se tenga. Este último a su vez se ve influenciado por las zonas de recarga y descarga [Freeze y Cherry, 1979; Pankow y Cherry, 1996]. Debido a que el movimiento advectivo de los contaminantes depende del movimiento del agua subterránea, es necesario caracterizar tanto la velocidad como la dirección del flujo de áreas de recarga hacia áreas de descarga. También se hace necesario que en la caracterización del sitio se determine la magnitud de la velocidad así como la dirección de ésta de áreas de recarga hacia áreas de descarga. De hecho, es recomendable que en la caracterización del sitio, la determinación del flujo se lleve a cabo en un intervalo corto de tiempo, dado que éste puede cambiar si se toman intervalos grandes de tiempo [Zheng y Bennett, 1995].

Diseño del régimen inicial de bombeo para contener el avance de la pluma y reducir el tiempo de remediación

Este paso tiene como objetivo el delimitar el área que requiere remediación y maximizar la masa de contaminante removido para reducir el tiempo de limpieza. El diseño del plan de remediación debe incluir dos conjuntos de pozos de extracción [Dresen *et al.*, 1991]. Uno que detenga el avance de la pluma contaminante hacia los pozos de suministro de agua - principalmente cuando los pozos se utilizan para suministro de agua potable-, y otro que remueva masa del contaminante. El último conjunto se debe establecer en el área que contenga la fuente, en donde se tienen altas concentraciones con el fin de reducir su dispersión y disminuir el tiempo necesario para alcanzar las concentraciones deseadas, ya que mientras más localizada se encuentre el área contaminada, menos equipo será requerido y esto redundará en el abatimiento del costo económico.

Establecer un sistema de apoyo de decisiones que permita una integración e interpretación rápida de los datos.

Los modelos numéricos de flujo y transporte, son una herramienta poderosa y necesaria que debe ser utilizada cuando se está diseñando un esquema de remediación. El uso de la modelación nos permite entre otras cosas: predecir el movimiento del contaminante, determinar la localización y la razón del flujo de los pozos de extracción, evaluar diferentes estrategias de bombeo e inyección para reducir el tiempo de limpieza. De hecho, el uso de los modelos de flujo y transporte para propósitos de remediación, nos coloca en posición de usar alguna técnica de optimización que minimice las variables costo económico y tiempo de operación y a su vez maximice la masa de contaminante extraída. Del análisis de los resultados generados por los modelos, también podemos estimar el tiempo necesario que debe operar el sistema para alcanzar los niveles de limpieza propuestos, predecir las concentraciones de los contaminantes en áreas de descarga, y estimar los efectos del control de fuentes sobre la remediación. Este tipo de análisis debe realizarse antes de empezar a montar cualquier tipo de equipo en campo, con el fin de tomar toda la ventaja posible de la información disponible. La confiabilidad de estas consideraciones queda en función de la sofisticación del modelo y de la calidad de los datos con que alimentemos a éstos. Se debe poner especial cuidado cuando los resultados del modelo se basen en parámetros estimados.

Fase de instalación de los primeros pozos de extracción

La instalación de los primeros pozos de extracción se debe hacer con el propósito de controlar hidráulicamente a la pluma o el de remover la masa contaminante. Estos pozos deberán operarse hasta que se alcancen condiciones de estado estacionario o se vea una tendencia de que este estado se establece. Esta operación se puede realizar a través de la recolección y el análisis de los datos de los piezómetros y los pozos de observación. De hecho, en este punto los modelos que se están utilizando se pueden validar o corregir para que reflejen los datos empíricos. Con la información actualizada en los modelos, se pueden diseñar los siguientes pozos de extracción. Este enfoque asegura la localización y el diseño más eficiente de cada uno de los centros de extracción.

Alcance de la concentración del contaminante en el acuífero a un nivel que permita que el agua sea potable o que tenga una concentración determinada de acuerdo con el uso que se le pretenda dar

Aunque el método de bombeo y tratamiento puede proporcionar una limpieza a cualquier nivel deseado -operándolo el tiempo suficiente-, las metas deben estar en función del uso que se pretenda al sistema, esto es, el nivel por alcanzar dependerá de si el uso es: agua potable, agua para riego o para recreación, cada una definirá un nivel propio. Independientemente de las metas propuestas, el método de bombeo y tratamiento incorpora tres de las características requeridas para la limpieza del agua subterránea.

- Un control hidráulico de la pluma y la fuente contaminante.
- Maximiza la masa de contaminante removida.
- La dinámica del método permite alcanzar relativamente rápido los niveles de concentración que se proponen como meta.

Mantener un monitoreo extensivo del sistema de remediación

Con el propósito de que el esquema de limpieza funcione eficientemente, se deben emplazar piezómetros y pozos de observación y preferentemente realizar un muestreo vertical en la vecindad de cada centro de bombeo, en las márgenes de la pluma contaminante y en otros lugares estratégicos para poder realizar análisis químicos del agua proveniente de los pozos de extracción, de los pozos de observación y de los piezómetros emplazados, con el fin de detectar los cambios de concentración del contaminante y así poder decidir si el esquema de

remediación está funcionando apropiadamente. Si en alguno de estos puntos de observación no se detectan cambios en la concentración, pudiera ocurrir que el sistema de limpieza tal y como se planeó no está funcionando correctamente, y tal vez requiera de alguna modificación. El objetivo principal de este punto es la comprensión -mientras más completa mejor- del comportamiento del sistema para poder utilizar este conocimiento en el emplazamiento de futuros pozos de extracción para optimizar el control hidráulico y maximizar la cantidad de masa contaminante eliminada [Keely, 1984].

Diseño de un campo de pozos tal que la extracción y la inyección puedan variarse con el fin de reducir las zonas de estancamiento

Una vez que el conjunto de pozos de extracción se haya emplazado y se opere hasta alcanzar condiciones de equilibrio, generalmente aparecerán áreas de estancamiento de agua subterránea o de movimiento muy lento de la misma [Keely, 1984]. Como resultado de este fenómeno, los contaminantes en estas áreas se moverán muy lentamente, lo que ocasiona un retraso en el tiempo de limpieza. Si se emplazan pozos de extracción adicionales en estas áreas, el campo completo de pozos puede ser manejado en base a los resultados de flujo medido y también en base a los cambios de concentración. Una fracción de los pozos de extracción pueden ser periódicamente detenidos y otros puestos a funcionar con el fin de variar el régimen de bombeo y asegurar que las plumas contaminantes sean reducidas lo más rápidamente posible. De acuerdo con [Isherwood *et al.*, 1991b], esta estrategia puede disminuir considerablemente el tiempo y costo de la limpieza.

Evaluar el uso de celdas de recirculación y otras técnicas complementarias

El agua subterránea tratada de pozos de extracción, puede ser re-inyectada al sistema para ayudar a incrementar la velocidad del agua en la vecindad de los pozos y facilitar la desorción de los contaminantes para que la limpieza sea más rápida. Uno de los principales problemas que plantea el uso del método de bombeo y tratamiento, es el de reducir el tiempo de operación para la limpieza de un sistema. El intervalo de tiempo relativamente largo que debe mantenerse en operación el método, se debe principalmente a que parte del contaminante queda atrapado en los espacios interporosos y el flujo de agua por si solo no es suficiente para removerlo o le lleva mucho tiempo el hacerlo. Una manera de minimizar este problema es haciendo uso de técnicas complementarias que agilicen el procedimiento. Entre las técnicas complementarias que se pueden utilizar se encuentran:

- La inyección de agentes químicos, agua caliente o vapor.
- Alguna técnica de biorremediación.

La inyección de agentes químicos para inducir la degradación química del contaminante o para alterar las características de adsorción de los contaminantes o de las formaciones materiales. El empleo de un mecanismo que favorezca la disolución de los contaminantes atrapados disminuiría el tiempo y el costo del método.

Resumen de procesos que afectan el tiempo de limpieza en el método de bombeo y tratamiento

La eficiencia del método puede verse afectada por diversos procesos. Entre los más comunmente detectados se encuentran los siguientes:

- La mezcla de agua subterránea limpia y agua subterránea contaminada, causada por la extracción. La mezcla aumenta el volumen de agua que requiere tratamiento.
- Las heterogeneidades geológicas, principalmente la presencia de estrato de baja permeabilidad.
- La existencia de NAPLs (sustancias poco solubles en agua que pueden moverse con ésta en forma separada). En estos sitios, el tiempo de limpieza está en función de la rapidez de disolución de los NAPLs.
- La adsorción del contaminante en el medio. En estos sitios el tiempo de limpieza se encuentra condicionado a la rapidez de desorción del medio.
- La permanencia de las fuentes contaminantes. Mientras las fuentes originales de contaminación se encuentren en el subsuelo, el método de bombeo y tratamiento mostrará resultados muy pobres en la limpieza de un sitio.

En contraste con lo anterior, se tienen procesos como la degradación biológica natural y la volatilización que en cierta manera permiten que el tiempo de limpieza sea reducido.

Una de las cualidades que tienen las técnicas de remediación probadas, es el poder determinar el tiempo que le tomaría a dicha técnica el limpiar un sitio específico. [Zheng *et al.*, 1992] indica que dicho tiempo se puede estimar a partir de la siguiente relación:

$$PV = -R \ln \frac{C_{wt}}{C_{w0}}$$

donde PV = volumen de agua que necesita ser extraído.
 C_{wt} = concentración que se desea alcanzar.
 C_{w0} = concentración inicial del contaminante en el acuífero.
 R = factor de retardación.

El tiempo de limpieza se expresaría como:

$$t = \frac{PV}{V_a}$$

donde V_a = volumen de agua que contiene el acuífero.

Por último, podemos decir que el método de bombeo y tratamiento es susceptible de mejoras en base a un mejor entendimiento de la geohidrología y la química del suelo para propósitos de remediación. También podemos mencionar que el uso de modelos matemáticos y la computación se hacen indispensables para la interpretación y el análisis de los datos en este método en particular, ya que con estas dos herramientas la tarea de limpieza se puede hacer más barata, más eficiente y en menos tiempo.

Esquema funcional del método de bombeo y tratamiento y los modelos de flujo y transporte

En síntesis, podemos decir que el método de bombeo y tratamiento sin considerar ninguna técnica de optimización se puede asociar al uso de modelos de flujo y transporte de la siguiente manera. De la caracterización hidrogeológica del lugar se obtienen los parámetros hidráulicos como conductividad hidráulica, coeficiente de almacenamiento, fronteras físicas e hidráulicas y distribución de la carga piezométrica. También se obtiene la porosidad del

medio, la identificación mineralógica, localización de las fuentes de contaminación, distribución de la concentración de indicadores químicos, espesores de las diversas unidades geológicas. Los primeros parámetros nos sirven para alimentar el modelo de flujo y obtener el campo de velocidades. Los parámetros como distribución de la concentración e identificación mineralógica, nos permiten armar un mapa de isolíneas para detectar zonas de alta concentración. Teniendo el campo de velocidades se puede bosquejar la dirección de flujo del sistema. Si aunado a esto se tienen identificadas las zonas de alta concentración en el sistema, se puede proponer el primer campo de pozos de extracción con los siguientes objetivos:

- detener el avance de la pluma contaminante;
- extraer agua con altas concentraciones del contaminante.

Para saber en que grado se pueden cubrir estos objetivos, se debe recurrir a los modelos de flujo y transporte. La simulación del comportamiento de este sistema por medio de la modelación nos permitirá decidir si la ubicación y gasto de extracción de los pozos es adecuada o si se debe cambiar la ubicación o el gasto de extracción o ambos. Puesto que no contamos con una técnica de optimización, esto deberá hacerse por ensayo y error pero tomando en cuenta la trayectorias seguidas por el contaminante y considerando las áreas de mayor concentración. Una vez que quede ubicado y determinado el primer campo de pozos de extracción, el siguiente paso consiste en localizar el primer campo de pozos de inyección.

Nuevamente, la forma de hacer esto es a través de la simulación del comportamiento del sistema por medio de los modelos matemáticos de flujo y transporte y también se hará por ensayo y error. Los resultados que obtengamos determinarán la localización de los pozos de inyección. Cuando hayamos llegado a este punto, y dependiendo del gasto de extracción que tengamos, se decidirá la técnica de tratamiento que se va a utilizar para tratar el agua contaminada o si esta agua no va a ser tratada. Si el agua extraída no va a ser tratada, se deberá localizar un lugar para vaciarla teniendo en mente que al seleccionar dicho lugar éste no debe tener comunicación hidráulica con el sistema que estamos limpiando, pues de lo contrario no serviría de nada el trabajo realizado.

Ya que hemos cubierto el proceso hasta esta etapa, y sin utilizar ninguna técnica complementaria de optimización, nos preguntaremos por el tiempo que necesitamos operar este esquema para alcanzar un nivel de limpieza determinado, de acuerdo con el uso que pretendemos dar al sistema. Para ello, haremos uso nuevamente de los modelos de flujo y

transporte con el fin de estimar un valor para este tiempo. De los resultados obtenidos en la estimación de este tiempo y considerando todo el equipo que se necesita para realizar el trabajo, también podremos obtener un valor para el costo económico que implica la limpieza de este sistema.

5.6 Estudios previos documentados del método de bombeo y tratamiento

Se describen a continuación 4 casos de contaminación, en donde se ha utilizado el método de bombeo y tratamiento como una técnica de remediación. Esta descripción se hace con la idea de mostrar el comportamiento del método bajo distintos ambientes de operación.

Caso 1

Restauración completa de agua contaminada con gasolina, derrame de una estación de servicio

En esta estación de servicio se derramó una cantidad indeterminada de gasolina cuando accidentalmente se perforó un tanque subterráneo de almacenamiento que contenía 38,000 litros de gasolina, durante la perforación de un pozo de observación. Inmediatamente después del accidente, se inició una etapa de recuperación y se lograron extraer 83,000 litros de agua mezclada con gasolina. En cuestión de días, se instaló un sistema de pozos de observación para estimar la extensión de la pluma contaminante y proporcionar información para el diseño de un sistema de bombeo y tratamiento. El acuífero contaminado estaba constituido por sedimentos densos de arena fina con zonas de arenas semiconsolidadas.

Antes de iniciar la etapa de bombeo, las concentraciones máximas de los compuestos de gasolina disueltos en el agua eran los siguientes: benceno 3,600 ppm; tolueno 4,030 ppm; etilbencene 730 ppm; xileno 5,300 ppm. Después de un año de operación, el sistema de bombeo y tratamiento redujo todas estas concentraciones en los pozos de extracción por debajo del límite de potabilidad. Las concentraciones en varios de los pozos de observación, aún permanecían por encima de este límite. Después de tres años de operación, el sistema redujo las concentraciones por debajo del límite de potabilidad en todos los pozos de observación. En ese momento se detuvo el bombeo en el sitio, y las concentraciones en los pozos de observación no rebasan los límites de potabilidad. Este caso muestra la potencialidad del método de bombeo y tratamiento en condiciones favorables [American Petroleum Institute, 1993].

Caso 2

Restauración de un acuífero contaminado con solventes orgánicos; Salinas, California

Este caso ilustra la capacidad del método de bombeo y tratamiento para reducir el tamaño de una pluma contaminante a niveles básicos de salud. Sin embargo, también muestra que aunque las metas de limpieza se hayan aparentemente alcanzado, puede quedar algo de contaminación residual.

La empresa Firestone Tire and Rubber Company operó una planta manufacturera de llantas para Salinas, California desde 1963 hasta 1980. Cuando fue requerida para hacer unas investigaciones ambientales, se encontraron contaminantes como: dicloroetano (DCA), dicloroetileno (DCE) y tricloroetano (TCA). Los registros históricos indicaron que el TCA fue el solvente más comúnmente usado en este sitio, y los otros dos compuestos fueron producidos por degradación del TCA.

El acuífero contaminado estaba compuesto por tres zonas interconectadas: una superficial de aproximadamente 30 metros, una intermedia de entre 30 y 40 metros y una profunda con espesores de entre 60 y 150 metros. Las zonas están separadas por capas de arcilla y sedimentos de espesor variable y son discontinuas localmente, solamente las zonas profundas son usadas extensivamente. La pluma inicial fue de 900 metros de largo por 300 metros de ancho en el acuífero superficial, 120 metros de largo y 30 metros de ancho en el acuífero intermedio, y 2,000 metros de largo por 500 metros de ancho en el acuífero profundo. El sistema de bombeo y tratamiento fue diseñado para limpiar el acuífero superficial y el acuífero intermedio, debido a que en el acuífero profundo, las concentraciones no rebasaron los límites de potabilidad.

La extracción de agua se inició en 1986 en el acuífero superficial, y en 1989 en el acuífero intermedio con un bombeo combinado de entre 2,100 litros por minuto y 2,800 litros por minuto. En junio de 1992 se habían alcanzado los estándares básicos de salud en todos los 25 pozos de extracción. Sin embargo, en una pequeña área "hot spot" entre los pozos de extracción, las muestras de pozos de monitoreo alcanzaron niveles que rebasan el límite de potabilidad del agua, 6 microgramos por litro. A pesar de esto el sistema de bombeo y tratamiento se paró en noviembre de 1992, bajo la condición de que el sistema fuese monitoreado hasta junio de 1994. Después de que se detuvo el bombeo, en dicho punto se observaron incrementos en la concentración de DCE desde 18 microgramos por litro hasta

50 microgramos por litro, pero posteriormente regresó a un nivel aproximado de 20 microgramos por litro [International Technology Corporation, 1989; Smedes *et al.*, 1993].

Caso 3

Limpieza de contaminantes disueltos y aislamiento de la fuente contaminante, San José California

Este ejemplo muestra la capacidad del método de bombeo y tratamiento para mantener los estándares de limpieza en una parte de la zona contaminada, si la fuente contaminante se aísla para prevenir una regeneración continua de la pluma.

En 1981, la empresa Fairchil Semiconductor Corporation en San José California, descubrió una ruptura en un tanque que se utilizaba para almacenar desechos de solventes. Mediante una investigación realizada por la propia empresa, se puso de manifiesto que varios pozos de municipales de suministro de agua potable y cinco pozos privados fueron contaminados.

La empresa se encargó de evaluar la extensión de la pluma contaminante, y para ello instaló 124 pozos de monitoreo. La pluma se localizó en un medio geológico complejo, compuesto por arena aluvial estratificada y depósitos de grava, donde capas de sedimentos y arcilla separaban las arenas de las gravas. Las investigaciones mostraron que la pluma tenía una longitud de 1,700 metros y un ancho de 300 metros. La mayor parte de ésta se encontraba gradiente abajo del área donde se liberó el contaminante, y de hecho, la pluma se formó por disolución de éste. Los contaminantes principales fueron: TCA, DCE y Freón.

El sistema de bombeo y tratamiento fue inicialmente diseñado para una restauración completa del acuífero. La empresa instaló 11 pozos de extracción para contener la fuente y la pluma. El sistema alcanzó la contención hidráulica completa en 1982. En 1985, la empresa construyó un conjunto de barreras de aislamiento usando la bentonita, y circundó la planta completa para aislar la zona fuente. Con estas acciones, las concentraciones en la parte exterior a las barreras de aislamiento disminuyeron fuertemente, quedando por debajo de los límites de potabilidad del agua. En 1991, la empresa detuvo el sistema de bombeo en la parte exterior a las barreras.

Aparentemente, el éxito en este caso se debe a que la empresa aisló la zona fuente, y también a que los procesos de adsorción de los contaminantes en el suelo, fueron muy bajos. Posteriormente, la empresa intentó limpiar la zona fuente utilizando una combinación de las técnicas de excavación y extracción de vapor [Harman *et al.*, 1993; EPA, 1989b].

Caso 4

Estabilización de una zona contaminada utilizando bombeo y tratamiento, San José California

Este ejemplo muestra una situación en la cual, la técnica de bombeo y tratamiento previene la migración del contaminante pero es incapaz de contraer la pluma (reducirla en tamaño) debido a heterogeneidades y a la presencia de DNAPLs. Las principales razones para que no se haya podido alcanzar la contracción de la pluma son: las altas velocidades del flujo de agua subterránea que se tienen en el lugar, y también el hecho de que la zona fuente no se aisló de manera efectiva.

La empresa IBM descubrió la contaminación del agua subterránea en esta fábrica, después de una revisión en todas sus plantas y después de descubrir problemas de contaminación en una planta diferente. Las fuentes de contaminación aparecieron en un lugar donde previamente se había considerado un derrame menor de químicos durante un llenado rutinario de tanques subterráneos de almacenamiento. Durante la investigación, IBM removió y probó todos los tanques subterráneos de almacenamiento así como las tuberías, y encontró que ninguno de los tanques tenían fugas pero, se identificó una fuga en una de las tuberías.

La investigación se inició en 1978, inmediatamente después de descubrirse el problema. Los contaminantes principales fueron: TCA, DCE y Freón. El acuífero estaba constituido por un ensamble complejo de unidades de arena y grava y pequeñas unidades de sedimentos y arcillas. La pluma contaminante ocupaba una área de aproximadamente 4,000 metros de largo por 460 metros de ancho. El volumen de la pluma antes de iniciar el bombeo y tratamiento se calculó en 2 millones de m^3 , conteniendo una masa total disuelta de contaminantes del orden de 130 kg. El sistema de bombeo y tratamiento inició sus operaciones en 1983. Entre 1983 y 1986, estuvieron en operación 12 pozos de extracción, 8 de los cuales se diseñaron para prevenir la migración del contaminante. Dos pozos adicionales se pusieron en operación en 1990, uno para ayudar a contener la fuente y el otro

para ayudar a controlar y eliminar la pluma. Con base en los datos obtenidos del monitoreo, se considera que el sistema aún no ha logrado aislar hidráulicamente la zona fuente, debido a las altas velocidades de flujo que se tienen en el lugar (3 m/día), y también por la extrema heterogeneidad del subsuelo.

Aun cuando a la fecha del reporte (1993), se estima que se ha extraído un volumen de agua contaminada equivalente a 18 veces el volumen de agua que contiene el sitio, se ha observado un cambio muy pequeño en la extensión de la pluma. La masa de contaminantes removida es casi cuatro veces la masa inicial estimada en forma disuelta. Este hecho sugiere que la masa contaminante extra que continúa incorporándose al agua subterránea, proviene de la masa adsorbida en el medio o de una fuente DNAPLs en forma pura, que no se tiene aún ubicada [Harman *et al.*, 1993; EPA, 1989b].

CAPITULO VI

MODELACIÓN DE UN PROBLEMA DE CONTAMINACIÓN

6.1 Introducción

En la actualidad en la mayoría de los países industrializados se ha aceptado en términos generales que una gran cantidad de los problemas de contaminación de agua subterránea, son originados principalmente por el movimiento de algunos solventes orgánicos clorados desde la superficie hacia el subsuelo. Este reconocimiento no es extensivo a países en vías de desarrollo dada la escasez de datos para valorar este tipo de problemas. Sin embargo, muchas de las empresas que generaron problemas de contaminación de acuíferos en los países industrializados, en la actualidad han desplazado sus plantas industriales hacia países en vías de desarrollo, con el propósito de evitarse costos de tratamiento para los residuos que generan. En los países en vías de desarrollo, no se cuenta con una legislación actualizada respecto a las normas de seguridad que se deben observar para el manejo, uso, transporte y depósito de compuestos altamente tóxicos y de sus residuos generados. De hecho, en muchos de estos países, no se han realizado los estudios correspondientes para determinar de impacto ambiental y de salud, que pueden tener compuestos como los solventes orgánicos clorados. En consecuencia, es previsible que a futuro puedan presentarse problemas de contaminación de acuíferos con este tipo de compuestos, y también problemas comunitarios de salud.

Por otra parte, la restauración de acuíferos contaminados con solventes en los países industrializados se encuentra aún en una etapa inicial de investigación, en la que muy pocos acuíferos se han restaurado de manera permanente, y la mayoría de los que han recibido algún tratamiento de remediación por medio de técnicas como bombeo y tratamiento o barreras de aislamiento (técnicas ya probadas), han quedado en un estado de contención de

la fuente contaminante, donde se requiere mantener un esquema de operación activo para que la contaminación no se extienda hacia áreas limpias. Nuevas técnicas de remediación se han agregado a las ya probadas, pero casi todas ellas se encuentran a nivel de laboratorio o en sus etapas iniciales de pruebas de campo, y aun cuando parecen ser muy prometedoras, se requiere de tiempo y presupuesto para mejorarlas y poderlas aplicar a problemas reales [Pankow y Cherry, 1996].

Las limitaciones tecnológicas actuales, no permiten que un acuífero contaminado con DNAPLs pueda ser restaurado de manera permanente, y aún en el caso de que esto fuese posible, dicho proyecto implicaría un alto costo. Sin embargo, lo anterior no implica que una fuente de abastecimiento deba ser abandonada, pues se tiene la opción de remediarla parcialmente por medio del uso de barreras de aislamiento y el método de bombeo y tratamiento, y de esta manera conservar al menos parcialmente dicha fuente. Para poder alcanzar esta meta, es necesario conocer el funcionamiento del sistema de manera tal que, se pueda determinar que porción del acuífero es factible de seguirse aprovechando, bajo que condiciones de operación se puede dar este aprovechamiento, cuál será el costo económico que esto implica, durante cuánto tiempo se puede mantener este esquema y planear a futuro el destino de dicha fuente. Para poder cuantificar estos conceptos, es necesario hacer uso de la modelación matemática como una forma de poder simular los distintos escenarios de operación, y determinar el más conveniente.

6.2 Objetivo de la modelación de un problema teórico de contaminación

A nivel de ilustración y como una forma de mostrar la utilidad de la modelación matemática en problemas de contaminación por solventes orgánicos clorados, se plantea en este trabajo la tarea de valorar distintos escenarios de funcionamiento de un sistema y presentar varias opciones de remediación para un acuífero hipotético contaminado por tricloroetileno (TCE) en forma disuelta, cuya fuente única de contaminación está representada por un río que conduce aguas residuales y que funciona además como una de las fuentes de recarga para el acuífero.

6.3 Planteamiento del problema

Considérese un acuífero rectangular con una área de 10,000 Has y un espesor de 130 m. El sistema es un acuífero libre constituido por arenas y gravas principalmente, y en menor cantidad sedimentos arcillosos. Se distinguen 3 diferentes estratos de acuerdo a sus

propiedades hidráulicas. El primero de ellos (estrato superior, capa 1) está constituido por una combinación de arenas finas y gruesas con un espesor de 30 m. El segundo de los estratos (estrato medio, capa 2) tiene un espesor de 50 m y está constituido por gravas, arenas gruesas y sedimentos arcillosos. El último de los estratos (estrato inferior, capa 3) tiene un espesor de 50 m y lo constituyen gravas, arenas finas y sedimentos arcillosos. Las propiedades hidráulicas de cada uno de ellos se muestra en la tabla 6.1.

Tabla 6.1 *Parámetros hidráulicos utilizados en el modelo de flujo del problema a simular.*

	Conductividad Hidráulica Horizontal	Conductividad Hidráulica Vertical	Almacenamiento Específico
C1	$K_{h_1} = 8.1 \times 10^{-4} \text{ m/s}$	$K_{h_{v_1}} = 2.1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$	$S_{s_1} = 0.10$
C2	$K_{h_2} = 1.4 \times 10^{-3} \text{ m/s}$	$K_{h_{v_2}} = 4.0 \times 10^{-5} \text{ m/s}$	$S_{s_2} = 0.15$
C3	$K_{h_3} = 5.8 \times 10^{-4} \text{ m/s}$		$S_{s_3} = 0.2$

En el primero de los estratos (C1), se localiza el lecho de un río que conduce aguas residuales y que recarga al acuífero cruzándolo diagonalmente de izquierda a derecha (figura 6.1). En la frontera derecha del mismo estrato se tiene un lago que contiene agua de buena calidad y que recarga al sistema. La superficie libre del lago se encuentra a 15 m por debajo de la parte más alta del río y a 7 m por debajo de la parte más baja del mismo. En el segundo de los estratos (estrato medio, capa 2) se encuentran emplazados 16 pozos de extracción que suministran agua para consumo y cuyos gastos son de 50 ℓ/s cada uno. El sistema se ha contaminado por tricloroetileno (TCE) debido a que el agua que conduce el río y que recarga al acuífero, presenta una concentración promedio de esta sustancia de 100 $\mu\text{g}/\ell$. La elección del tricloroetileno (TCE) como contaminante del sistema, se hizo considerando los grandes volúmenes que se usan de esta sustancia en las diferentes actividades realizadas por el hombre, y tomando en cuenta los bajos estándares de potabilidad del agua para consumo humano que se deben observar. En la tabla 6.2 se muestran algunas de sus propiedades físicas y químicas.

Tabla 6.2 *Propiedades físicas y químicas del tricloroetileno (TCE)*

Fórmula	$\text{CCl}_2 = \text{CHCl}$
Densidad	1.46 (g/cm ³)
Viscosidad	0.57 cP
Solubilidad	1100 mg/ℓ
Punto de fusión	-87°C
Punto de ebullición	86.7°C
Presión de vapor	95 mm a 30°C
Color	incolore
Olor	Solvente

Fuentes: [Cherry y Feenstra, 1990], [Verschueren, 1983]

La contaminación actual del acuífero se encuentra en un estado tal que a la fecha, uno de los pozos que se utilizan para suministro se encuentra bombeando agua con una concentración superior a 7 µg/ℓ. Sabiendo que los niveles de potabilidad del agua para este contaminante no deben rebasar los 5 µg/ℓ [US EPA, 1992] y considerando que al menos se requiere tener un 50% de los pozos extrayendo agua con una concentración inferior a 5 µg/ℓ, se propone evaluar diferentes alternativas de funcionamiento del sistema para satisfacer la condición anterior.

Para poder determinar cuantitativamente el tiempo de aprovechamiento del sistema, con base en un esquema de operación fijo y determinar el costo económico de cada uno, se realizarán diferentes simulaciones de flujo y transporte para cada uno de los escenarios que se proponen más abajo. Los resultados de cada una de las simulaciones se analizarán para determinar las mejores opciones de explotación del acuífero, considerando de antemano que cada una de las opciones que se elijan, deben satisfacer la condición de mantener al menos el 50% de los pozos de suministro sin rebasar los límites de potabilidad.

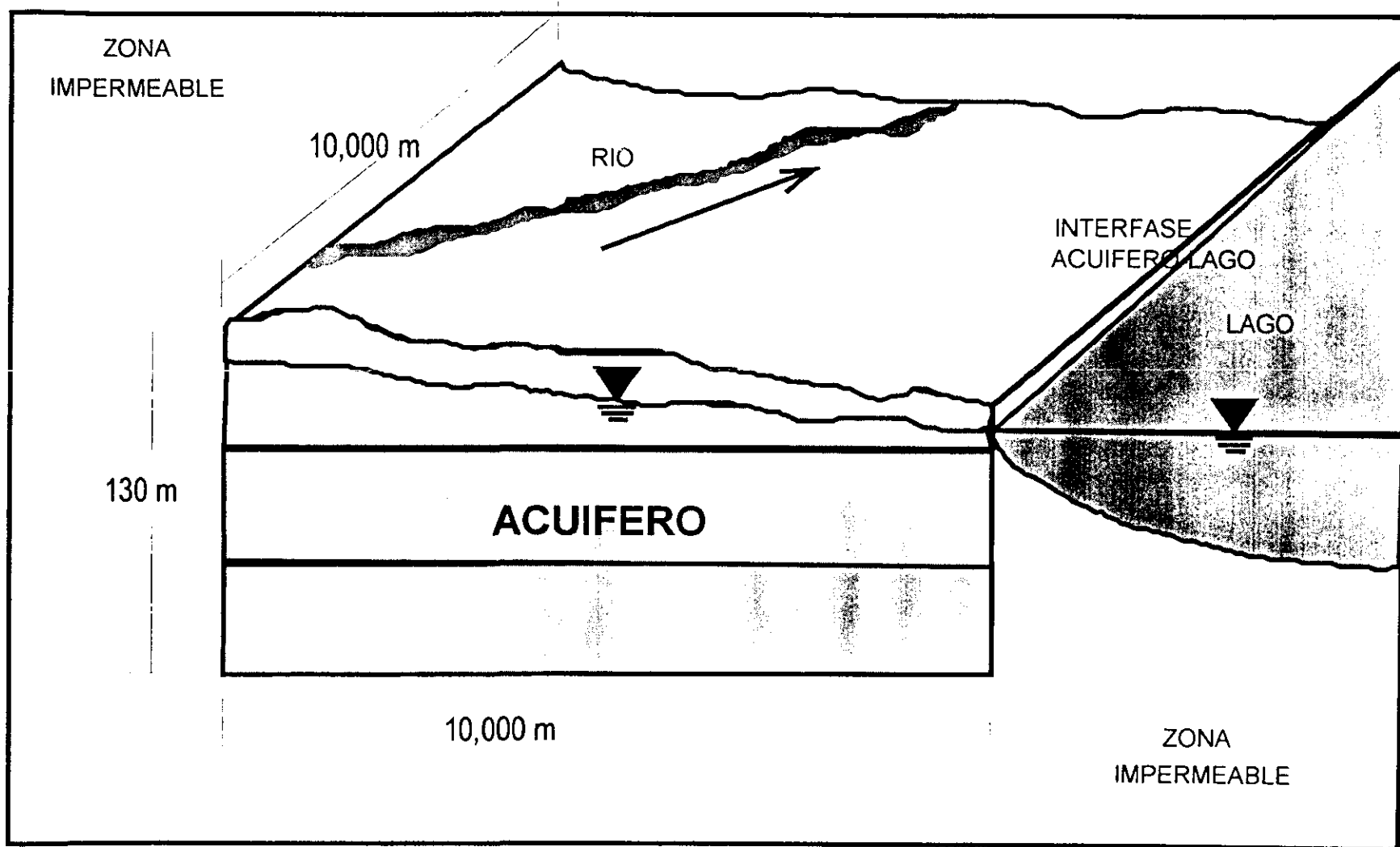


Figura 6.1 Diagrama del área de modelación. Se muestran sus dimensiones y los elementos constitutivos del sistema como la traza del río y el lago.

Los escenarios a simular son los siguientes:

- A) En condiciones naturales sin intentar contener la pluma o la fuente y considerando que solo están en operación los pozos de suministro, estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema. Se considera que el sistema es aprovechable si se tiene como mínimo un 50% de los pozos de suministro bombeando agua con una concentración que no rebase el límite de potabilidad de $5 \mu\text{g}/\ell$.
- B) Bajo las mismas condiciones naturales del caso anterior pero ahora considerando que cada pozo que rebase el límite de potabilidad de $5 \mu\text{g}/\ell$ es clausurado, estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema.
- C) Utilizando exclusivamente pozos de extracción para bombear agua contaminada fuera del sistema, estimar el tiempo máximo de aprovechamiento ($t = t_{\text{max}}$) en función del volumen de agua extraída.
- D) Utilizando un esquema de bombeo y tratamiento estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema ($t = t_{\text{max}}$) en función de la ubicación de los pozos de inyección tomando como base el resultado del caso anterior.
- E) Simular el escenario en el cual se han eliminado las descargas de agua contaminada hacia el río y:
 - 1) Estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema y tiempo mínimo de espera para que éste sea nuevamente aprovechable en condiciones naturales, suponiendo que esto pudiera ocurrir. El criterio para que sea nuevamente aprovechable es que como mínimo se tenga un 50% de los pozos de suministro bombeando agua con una concentración inferior a $5 \mu\text{g}/\ell$.
 - 2) Utilizando exclusivamente pozos de extracción, estimar el tiempo de aprovechamiento en función del volumen de extracción.
 - 3) Utilizando un esquema de bombeo y tratamiento, estimar tiempo de aprovechamiento en función del volumen de extracción y de inyección.
- F) Simular el entubamiento del río como una forma primitiva de aplicar el método de paredes de aislamiento para una fuente y:
 - 1) Estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema y el tiempo mínimo de espera, en condiciones naturales bajo esta restricción. El criterio para determinar el tiempo mínimo es el mismo que el mencionado en el caso anterior.
 - 2) Aplicar exclusivamente un esquema de bombeo para contener y/o eliminar la pluma residual y estimar el tiempo máximo de aprovechamiento en función del volumen de extracción.

- 3) Aplicar bombeo y tratamiento para contener y/o eliminar la pluma residual y estimar el tiempo máximo de aprovechamiento en función del volumen de extracción y de inyección.

6.4 Procedimiento

Para propósitos de modelación, el sistema se ha dividido verticalmente en 3 capas teniendo la primera un espesor de 30 m y la segunda y tercera un espesor de 50 m cada una. Horizontalmente cada capa está dividida en 2500 celdas de $200 \times 200 \text{ m}^2$ cada una. La discretización del sistema en este número de celdas, obedece al hecho de que el transporte de contaminantes en un medio poroso es generalmente un fenómeno local, y si se consideran celdas con área mayor que ésta, el contaminante podría mostrarse diluido en un volumen más grande. La figura 6.2 muestra la malla utilizada para discretizar el sistema y también muestra la ubicación de los pozos de suministro.

Para simular el flujo en este sistema, se ha considerado que los parámetros hidráulicos como conductividad y almacenamiento, son constantes por capa aunque diferentes en cada una de ellas. Las condiciones de frontera para el sistema se han considerado como de no-flujo para las capas 2 y 3, y en la primera capa se utiliza carga constante en la frontera derecha para considerar la influencia del lago en esa región, y de no flujo en el resto de la frontera de esa capa. El río se ubica en la primera capa en forma diagonal asociándole una elevación por celda y una conductividad $K_R = 0.023 \text{ m/s}$ a lo largo de toda su extensión.

En la simulación de transporte se tomó la misma discretización espacial que en el caso de flujo y la fuente contaminante que es el río, se simula por medio de celdas de concentración constante con una concentración igual a $C_R = 100 \mu\text{g}/\ell$ a todo lo largo del río. En las simulaciones de transporte se considera que están presentes los fenómenos de advección, dispersión y sorción. Los valores para parámetros como porosidad, coeficiente de distribución, densidad volumétrica y dispersividad usados para realizar las simulaciones de transporte se muestran en la tabla 6.3.

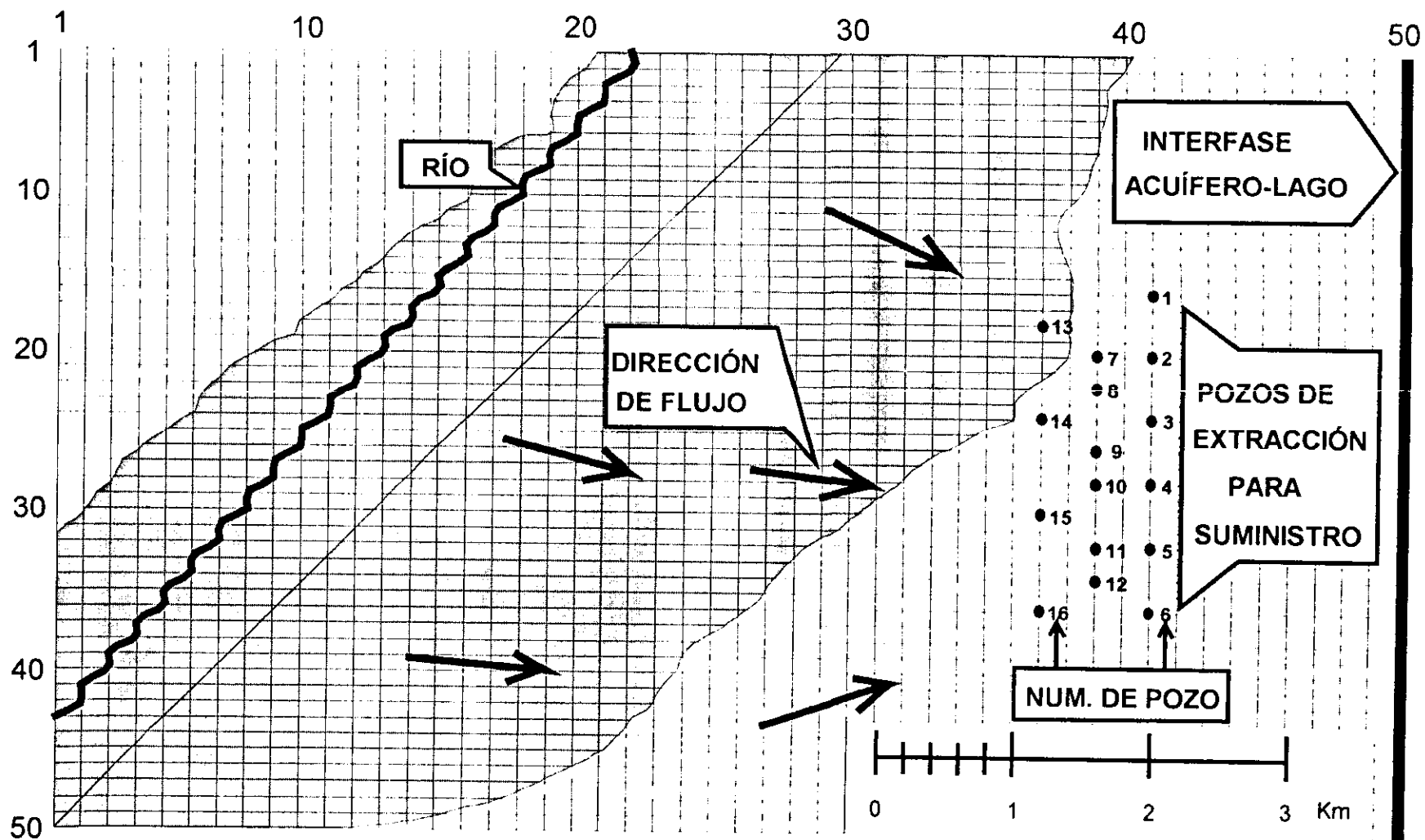


Figura 6.2 Discretización del sistema en celdas. Se muestra la ubicación de los pozos de suministro, la traza del río, la interfase acuífero-lago y la zona contaminada. El área de cada celda es $200 \times 200 \text{ m}^2$.

Tabla 6.3 *Parámetros utilizados en las simulaciones de transporte. El coeficiente de distribución corresponde al del tricloroetileno para el tipo de material que estamos considerando, [Mohsen et al., 1987]. Los valores de porosidad, densidad volumétrica y dispersividad longitudinal son valores promedio reportados en la literatura para arenas y gravas.*

CAPA	PARÁMETRO	VALOR
C1	Porosidad	25%
C2	Porosidad	30%
C3	Porosidad	30%
C1	Coef. de distribución	$K_d = 3.1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{kg}$
C2	Coef. de distribución	$K_d = 1.5 \times 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{kg}$
C3	Coef. de distribución	$K_d = 5.7 \times 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{kg}$
C1	Densidad volumétrica	$\rho_b = 1600 \text{ kg} / \text{m}^3$
C2	Densidad volumétrica	$\rho_b = 1600 \text{ kg} / \text{m}^3$
C3	Densidad volumétrica	$\rho_b = 1600 \text{ kg} / \text{m}^3$
C1	Dispersividad longitudinal	$\alpha_L = 45 \text{ m}$
C2	Dispersividad longitudinal	$\alpha_L = 50 \text{ m}$
C3	Dispersividad longitudinal	$\alpha_L = 30 \text{ m}$

6.5. Simulaciones realizadas

Las simulaciones para flujo y transporte se realizaron en estado transitorio considerando los mismos "períodos de esfuerzo" (intervalo de tiempo durante el cual los parámetros se mantienen constantes) y el mismo número de pasos de tiempo en cada caso. La frontera derecha de la capa 1 tiene asociada en todas las simulaciones de flujo, una carga constante $h = 115 \text{ m}$. En cada una de las simulaciones se tomó como condición inicial para flujo, el estado estacionario del sistema mostrado en las figuras 6.3, 6.4 y 6.5. Para el modelo de transporte se usó como condición inicial la distribución de concentraciones mostrada en las figuras 6.6, 6.7 y 6.8.

Caso 1. Escenario A). Esta simulación es necesaria para evaluar la vida útil del sistema. En este caso se hizo una simulación de flujo y transporte a 50 años considerando 5 "períodos de

esfuerzo" de 10 años cada uno, tanto en flujo como en transporte. En el modelo de flujo permanecen como elementos activos los pozos de suministro, los aportes del río y las celdas de carga constante en la frontera derecha, representando al lago. En el modelo de transporte se tienen como elementos activos las celdas que contienen el lecho del río y que aportan un flujo de agua y de contaminantes hacia el acuífero.

Caso 2. Escenario B). Este escenario se simuló considerando un tiempo de 50 años y un total de 7 "periodos de esfuerzo" tanto en flujo como en transporte, y manteniendo activos todos los elementos del caso anterior, con la única diferencia que en cada uno de los "periodos de esfuerzo", se fueron eliminado los pozos que habían rebasado el límite de potabilidad del agua de $5 \mu\text{g}/\ell$.

Caso 3 Escenario C). Se hicieron múltiples simulaciones a 10 años y un "período de esfuerzo" en cada una. El objetivo de estas simulaciones fue encontrar una ubicación y un gasto para los pozos de extracción que nos permitiera mantener como mínimo el 50% de los pozos de suministro por debajo de la cota de $5 \mu\text{g}/\ell$. De todos los ensayos hechos, los que mejor resultado dieron fueron los asociados con la ubicación mostrada en la figura 6.9 para gastos entre $200 \ell/s$ y $250 \ell/s$. Este esquema nos permitió mantener casi estática la pluma entre los pozos de extracción y los pozos de suministro. Para gastos mayores a $250 \ell/s$, se manifiesta un fenómeno de contracción de la pluma en el área comprendida entre los pozos de control y los pozos de suministro, y para gastos menores a $200 \ell/s$ se observa que la pluma avanza hacia los pozos de suministro.

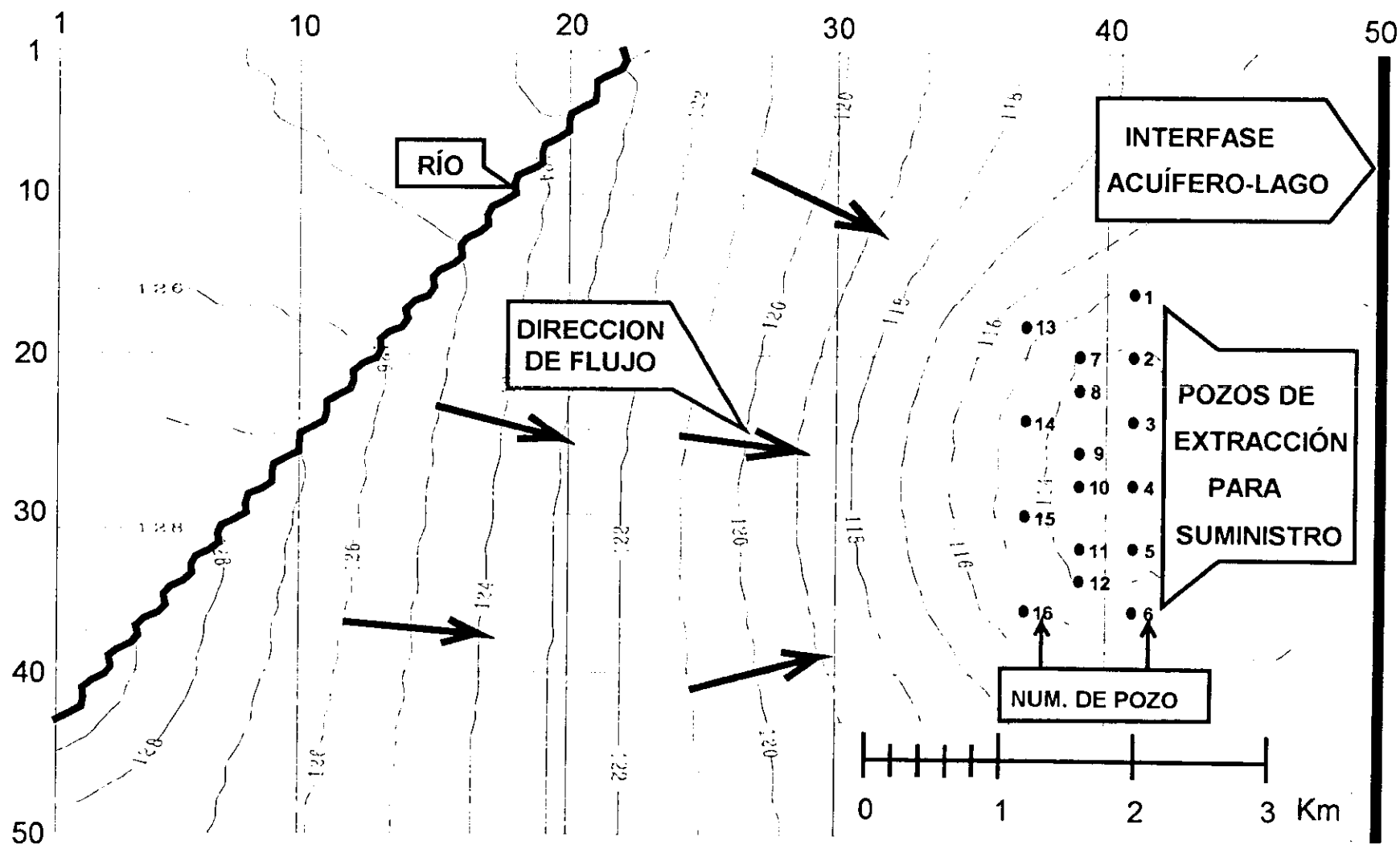


Figura 6.3 *Piezometria inicial (estado estacionario) para la capa 1, utilizada en todas las simulaciones de flujo realizadas en este trabajo.*

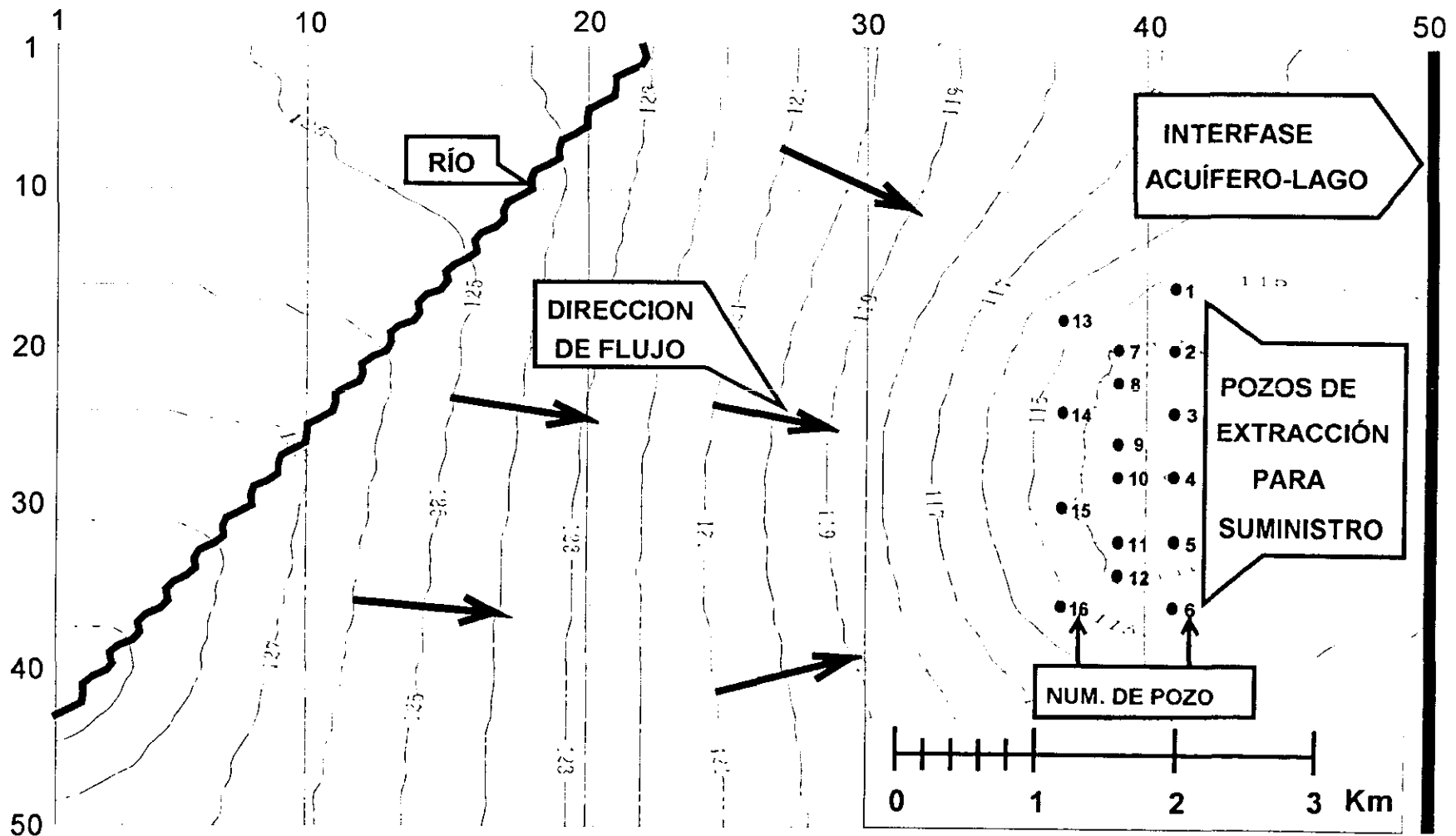


Figura 6.4 *Piezometría inicial (estado estacionario) para la capa 2, utilizada en todas las simulaciones de flujo que se realizaron en este trabajo.*

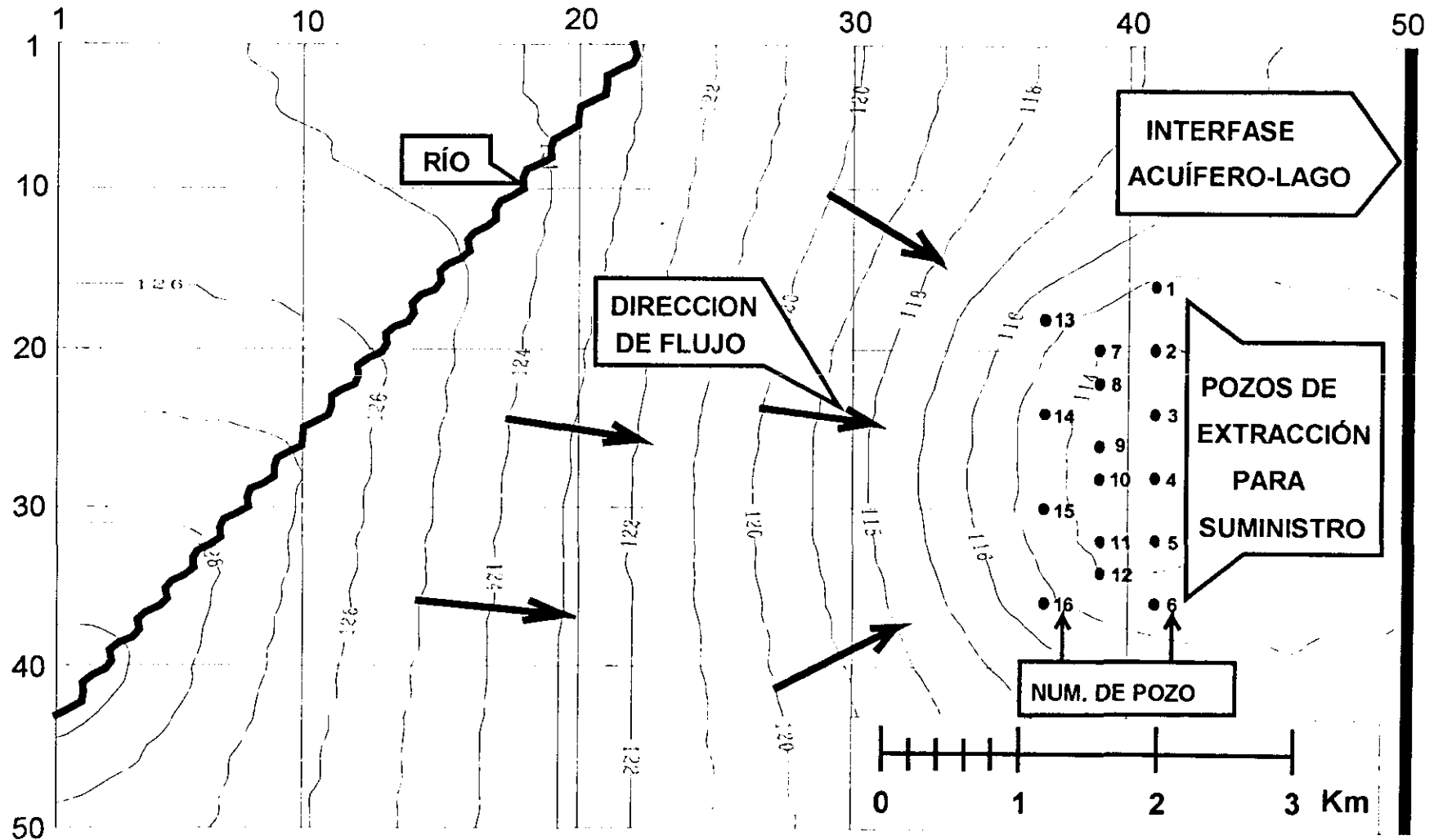


Figura 6.5 *Piezometría inicial (estado estacionario) capa la capa 3, utilizada en todas las simulaciones de flujo hechas en este trabajo.*

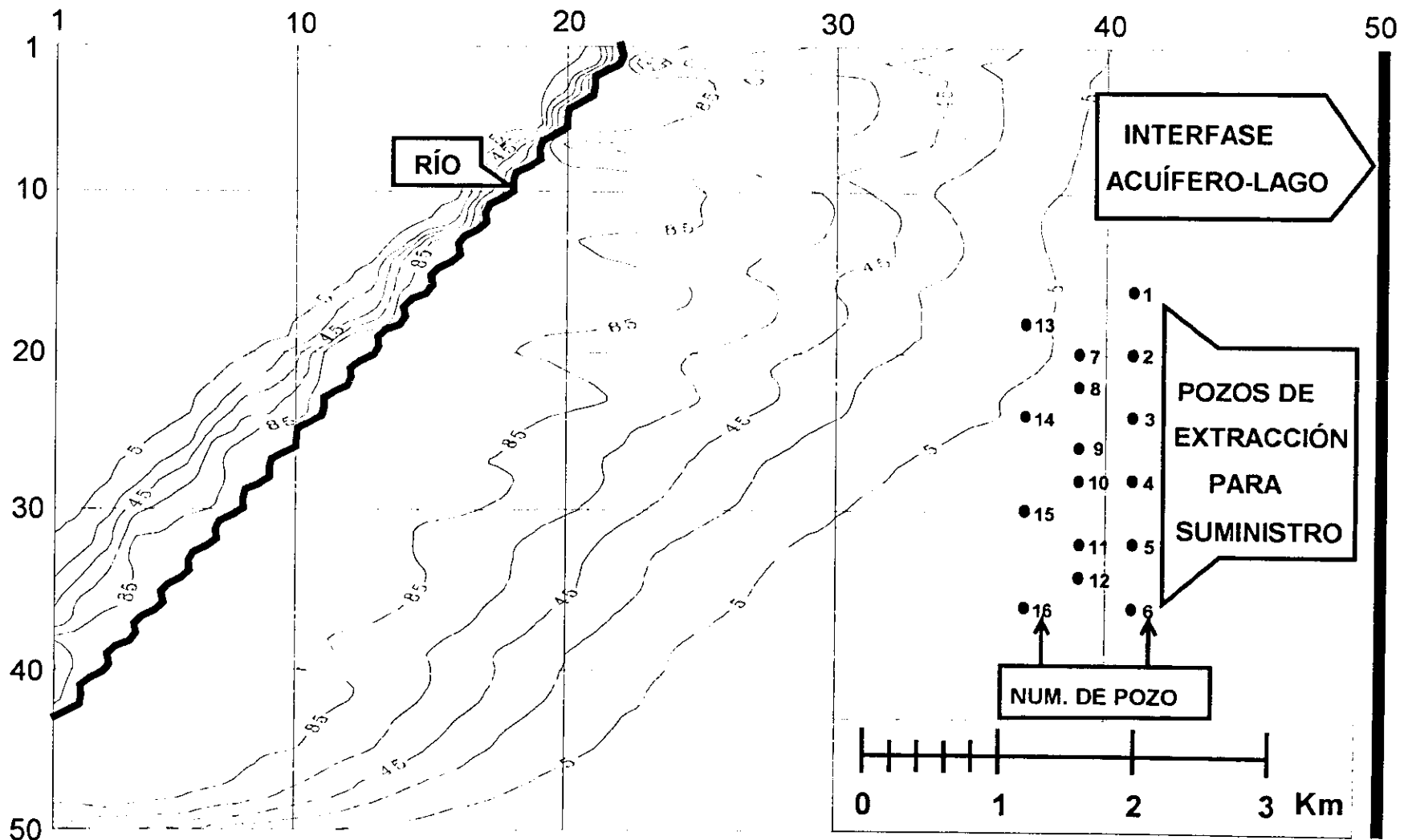


Figura 6.6 *Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 1, usada en todas las simulaciones de transporte.*

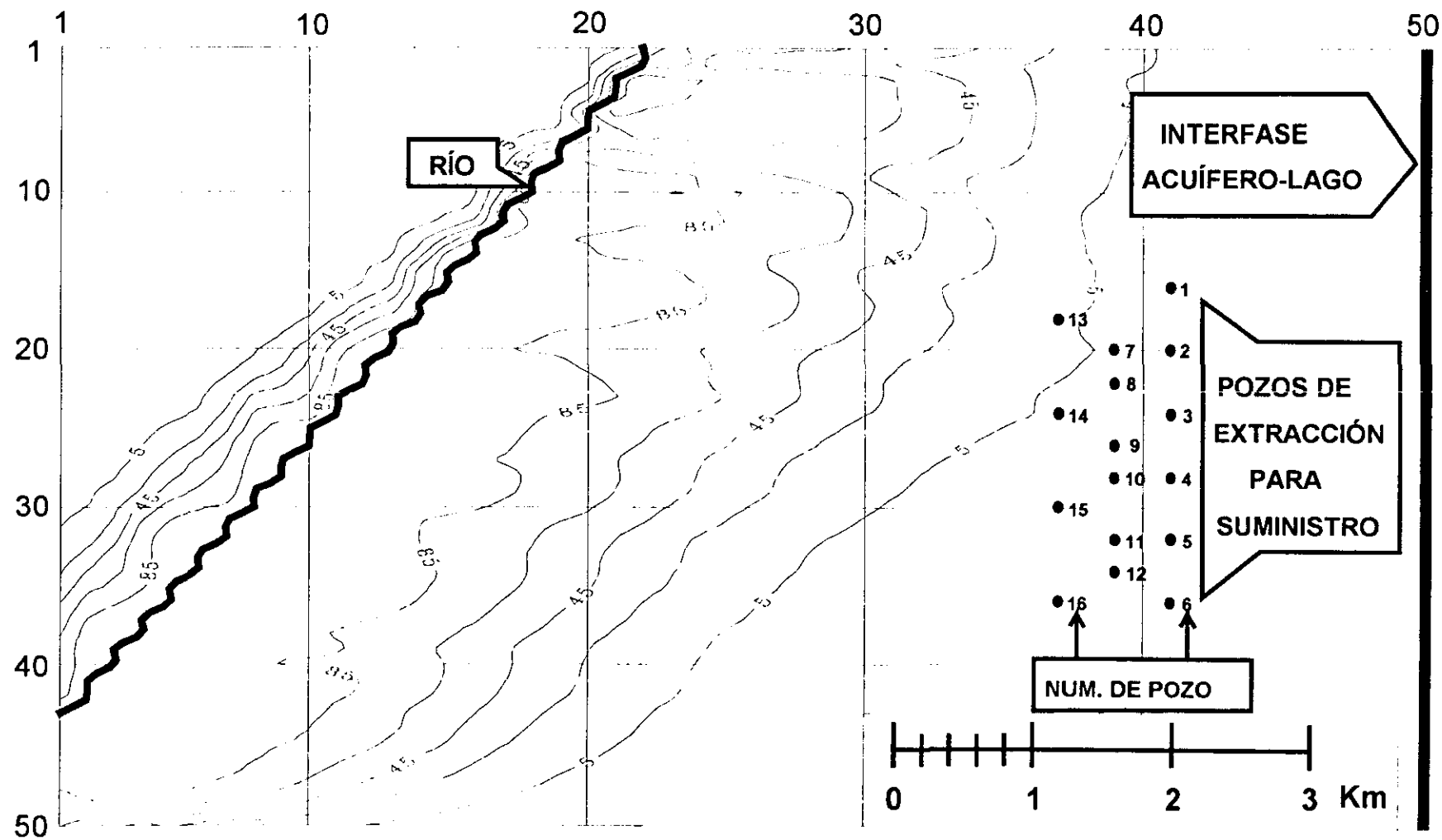


Figura 6.7 *Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2, usada en todas las simulaciones de transporte realizadas.*

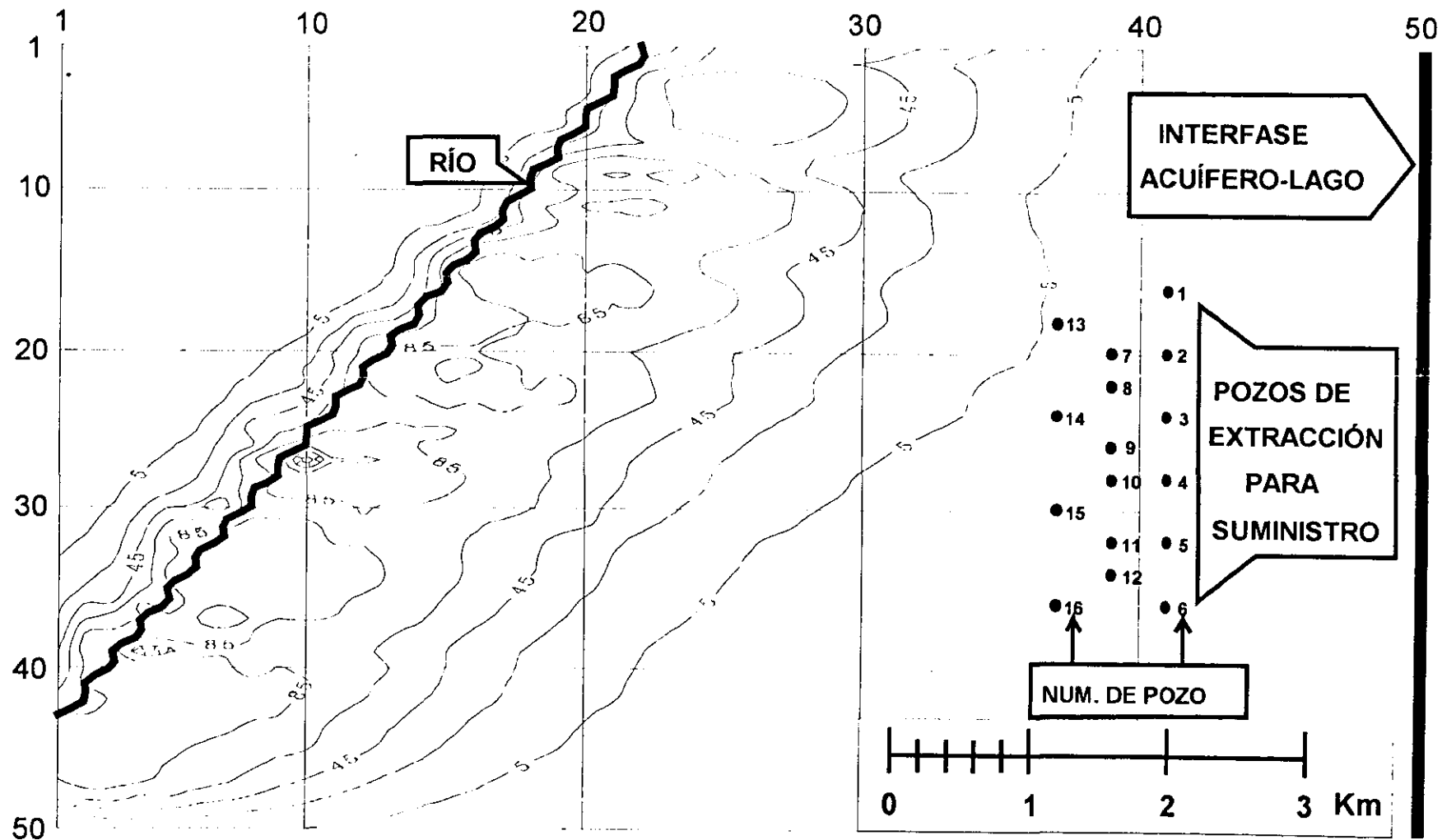


Figura 6.8 *Distribución inicial de concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 3, usada en todas las simulaciones de transporte en este trabajo.*

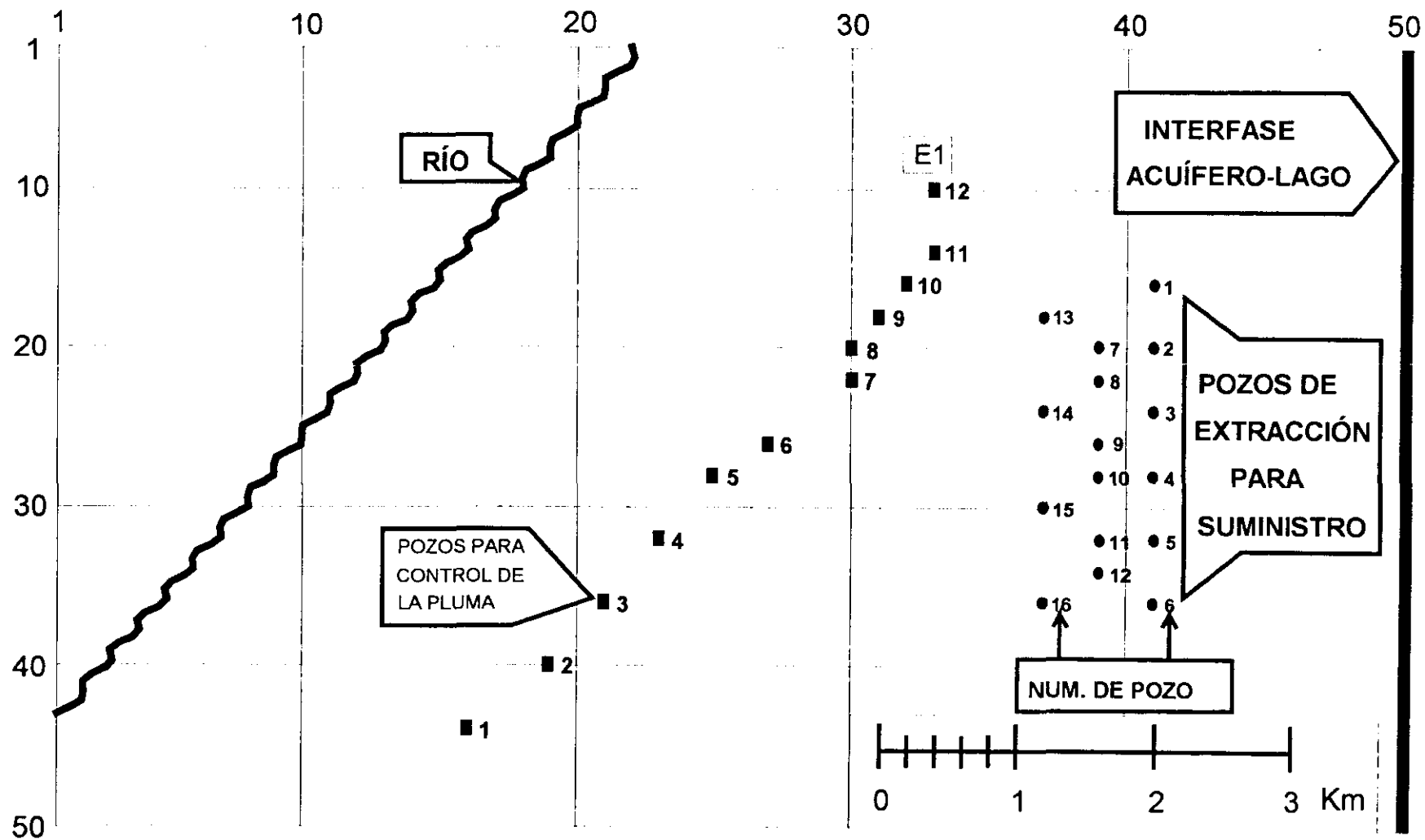


Figura 6.9 Ubicación de los pozos de control utilizados para contener la pluma Caso (3). De los diferentes ensayos hechos, esta ubicación nos permitió cortar el avance de la pluma, batería E1

Caso 4. Escenario D). Simulaciones a 10 años y un "período de esfuerzo". Tomando como referencia los resultados obtenidos en el caso 3, se eligió como ubicación para los pozos de extracción la batería de pozos que se muestra en la figura 6.9. Con base en esto, se ensayaron diferentes ubicaciones para emplazar los pozos de inyección. Dos de las baterías de pozos de inyección que se ensayaron, se muestran en la figura 6.10.

Caso 5 Escenario E1). Esta simulación se realizó considerando que las descargas del contaminante hacia el río fueron eliminadas y que de forma inmediata el río queda libre del contaminante. La eliminación de las descargas contaminantes hacia el río se simularon en el modelo de transporte considerando que las celdas que inicialmente tenían una concentración constante de $100 \mu\text{g}/\ell$, ahora, el agua que fluye hacia estas celdas tiene una concentración de $0 \mu\text{g}/\ell$. En esta simulación se consideró un intervalo de tiempo de 200 años en 20 "períodos de esfuerzo", con el fin de estimar el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema, y el tiempo mínimo de espera para poder considerar al sistema nuevamente como aprovechable.

Caso 6. Escenario E2). En esta simulación los únicos elementos activos para eliminar la pluma residual fueron los pozos de extracción. La ubicación elegida para este propósito se muestra en la figura 6.9.

Caso 7. Escenario E3). En esta simulación además de los elementos activos del caso anterior, se tienen también en operación 8 pozos de inyección. La ubicación de los pozos de extracción e inyección se muestran en las figuras 6.9 y 6.10 respectivamente.

Caso 8. Escenario F1). Para simular el entubamiento del río, en el modelo de flujo se eliminaron los aportes correspondientes y se definieron las celdas por donde antes cruzaba el río simplemente como activas, permitiendo que la carga hidráulica en estas variara de acuerdo al gradiente del sistema. En el modelo de transporte se procedió como en el caso 5, las celdas que en principio tenían una concentración constante de $100 \mu\text{g}/\ell$, ahora el agua que fluye hacia estas tiene una concentración de $0 \mu\text{g}/\ell$. La simulación se realizó considerando un periodo de tiempo de 200 años y 20 "períodos de esfuerzo", con el fin de estimar el tiempo máximo de aprovechamiento y el tiempo mínimo de espera.

Caso 9. Escenario F2). Para simular este escenario se consideraron las mismas condiciones del caso 8 y además, se puso en operación la batería de pozos de extracción mostrada en la figura 6.9 con un gasto de extracción $Q_e = 50 \ell/s$.

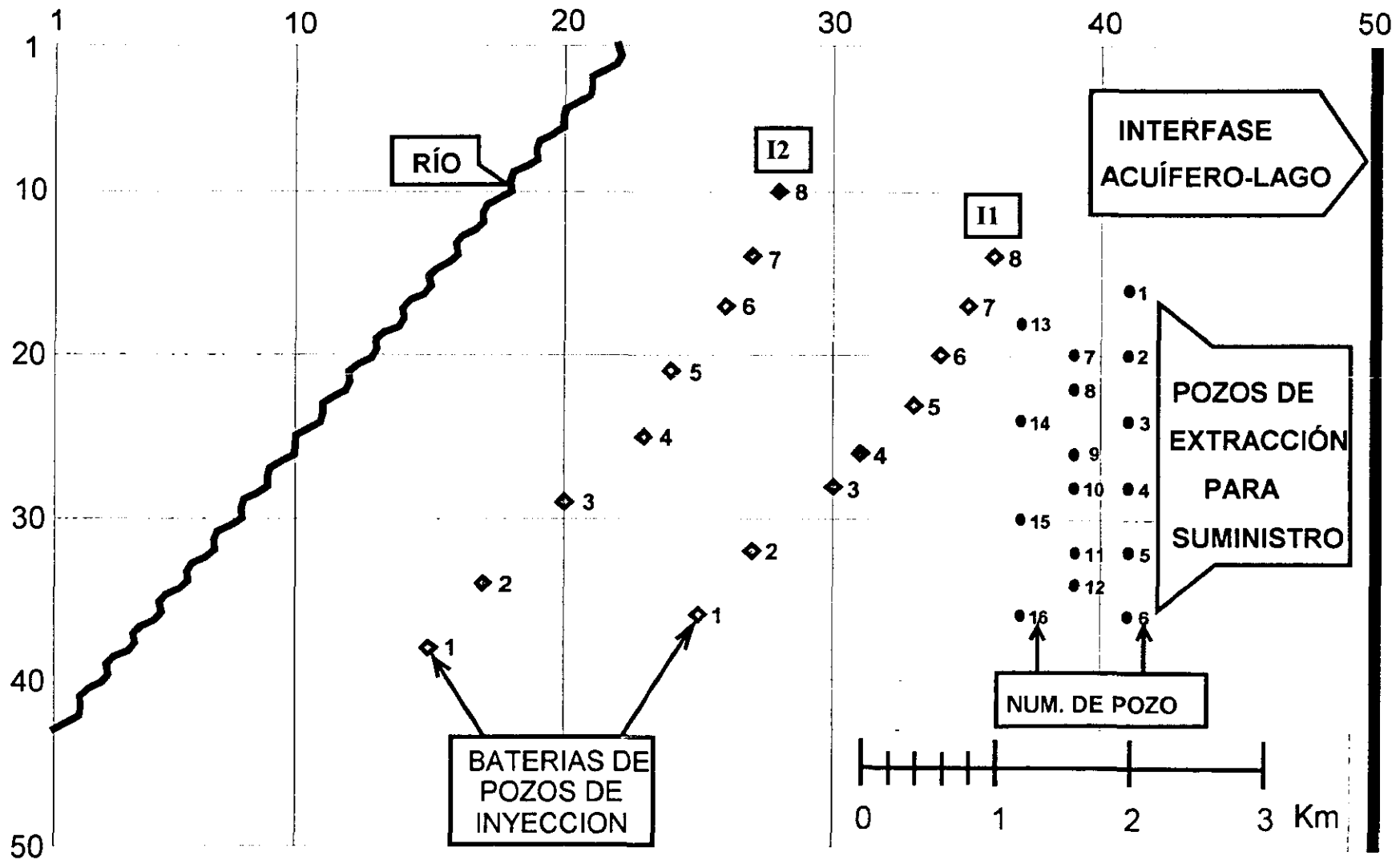


Figura 6.10 Ubicación de las dos baterías de pozos de inyección I1 e I2 que fueron utilizadas en la simulación del caso 4

Caso 10. Escenario F3). La simulación de este escenario consideró las mismas condiciones que en el caso 9 y además se puso en operación la batería I2 de pozos de inyección mostrada en la figura 6.10 con un gasto de inyección $Q_i = 50 \text{ l/s}$.

6.6 Resultados.

Se muestran a continuación los resultados obtenidos en cada uno de los casos simulados.

Los resultados para los casos 1 y 2 (evolución natural sin clausura y evolución natural con clausura) se muestran en la figura 6.11. El esquema de esta figura solo muestra los primeros 10 pozos que rebasan el límite en cada caso. En el caso 1, solo están en operación los pozos de suministro y éstos no son clausurados aun cuando hayan rebasado el límite de potabilidad del agua. En el caso 2, cada pozo que rebase el límite de potabilidad se clausura de inmediato.

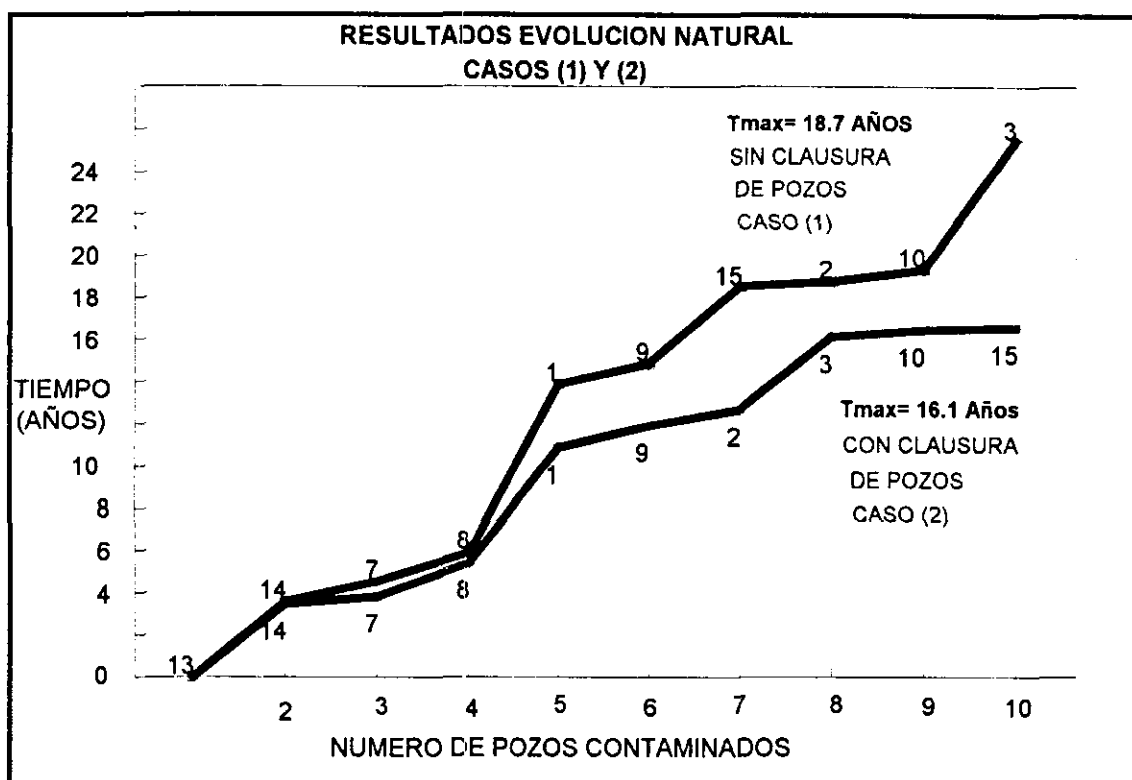


Figura 6.11 *Resultados (Casos 1 y 2). Evolución natural con clausura y sin clausura. El esquema muestra el orden de contaminación de los pozos de suministro y el tiempo máximo de aprovechamiento en cada caso.*

Los resultados para el caso 3 (bombeo exclusivamente) se resumen en la figura 6.12. Se muestra el número de pozos contaminados en 10 y 20 años en función del volumen de extracción considerando que la ubicación de los pozos de control es la mostrada en la figura 6.9. Las figuras 6.13 a la 6.15, muestran las concentraciones para la capa 2 a los 10 años cuando se utiliza un gasto de extracción $Q_e = 150 \ell/s$, $Q_e = 200 \ell/s$ y $Q_e = 250 \ell/s$ por pozo.

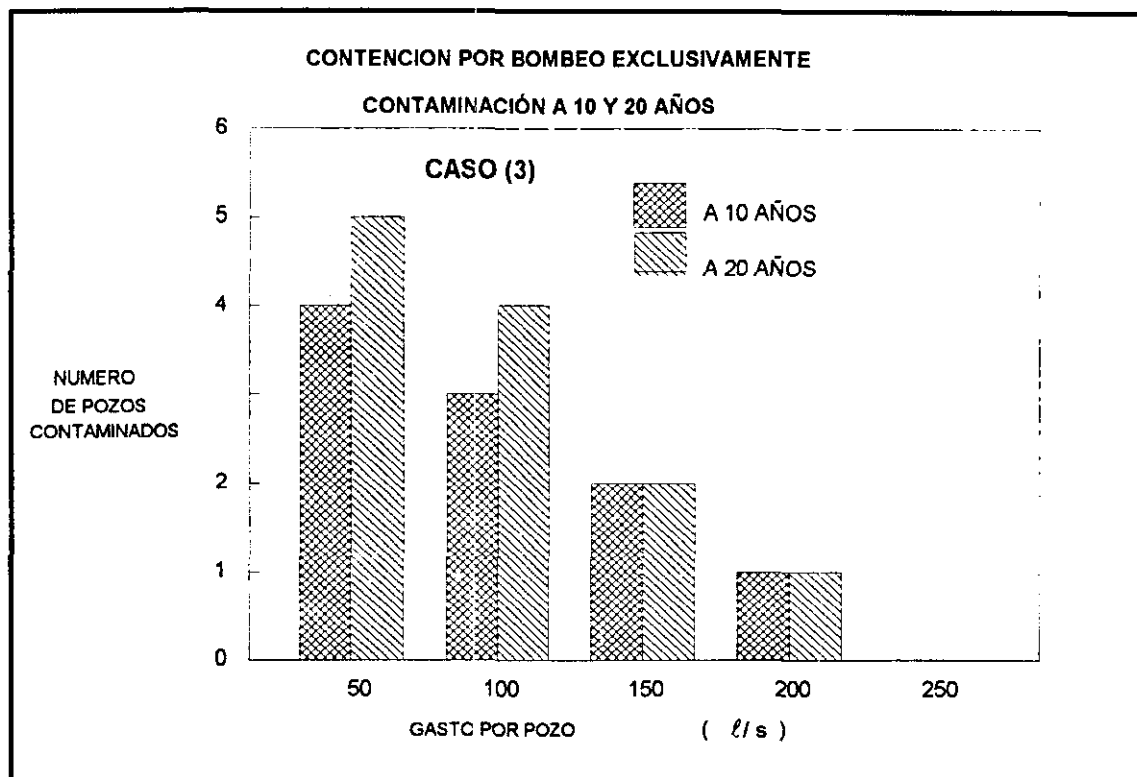


Figura 6.12 *Resultados (Caso 3). Contención de la pluma por bombeo exclusivamente. Número de pozos contaminados en 10 años y 20 años en función del volumen de extracción utilizando la batería de pozos de extracción mostrada en la figura 6.9.*

Los resultados para el caso 4 (bombeo y tratamiento) considerando diferentes ubicaciones para los pozos de inyección, no muestran un resultado notoriamente diferente al obtenido en el caso anterior para volúmenes de inyección inferiores a $50 \ell/s$. El efecto de estos pozos se vuelve más evidente para volúmenes de inyección mayores o iguales a $100 \ell/s$. Los resultados reportados en las figuras 6.16 a 6.19 corresponden a la capa 2 a los 10 años para las baterías de pozos de inyección mostrada en la figura 6.10, cuando se consideran volúmenes de inyección $Q_i = 50 \ell/s$ y $Q_i = 100 \ell/s$.

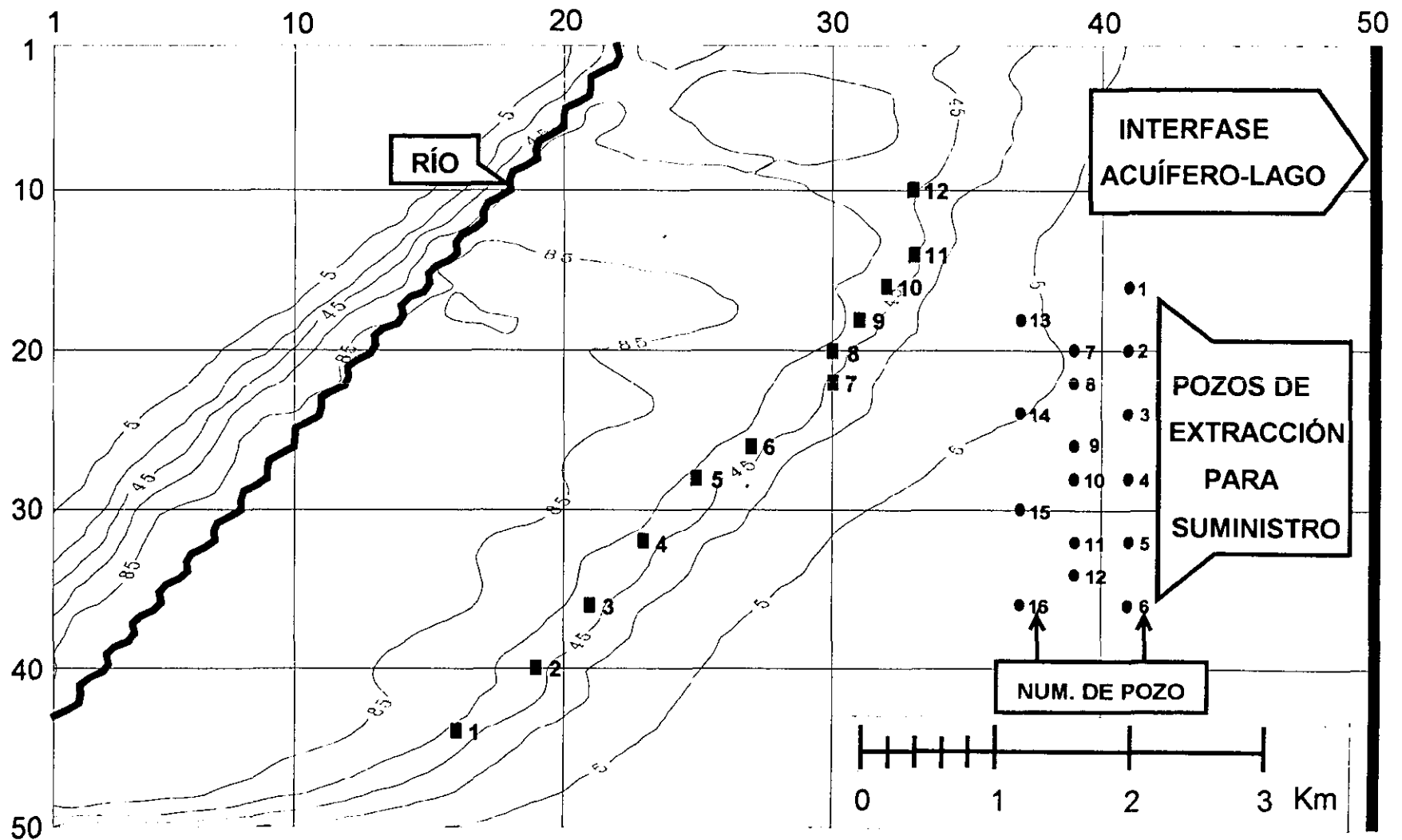


Figura 6.13 Resultados Caso (3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q=150 \ell/s$

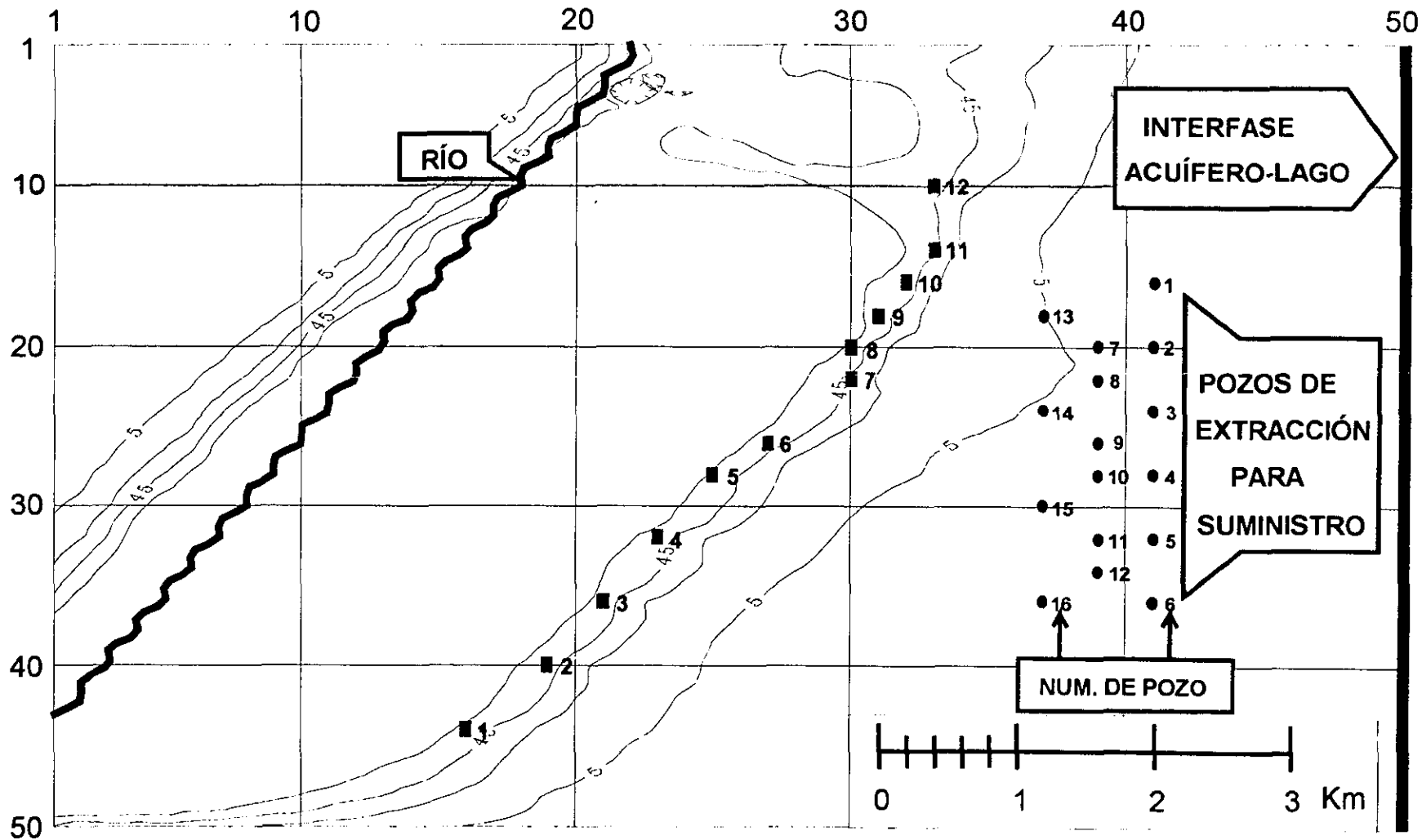


Figura 6.14 *Resultados Caso (3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q=200 \ell/\text{s}$*

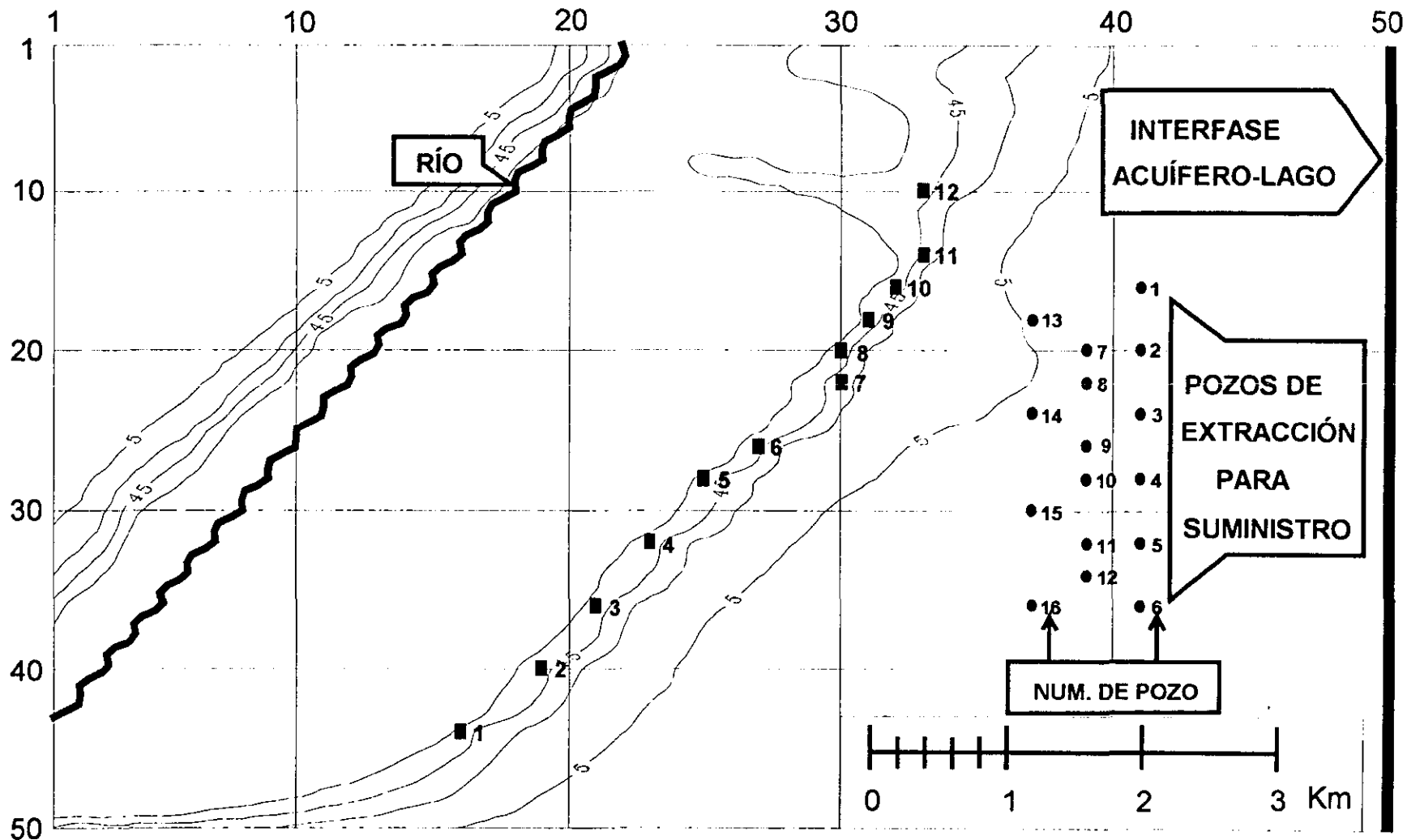


Figura 6.15 *Resultados Caso (3). Contención de pluma por bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q=250 \ell/s$*

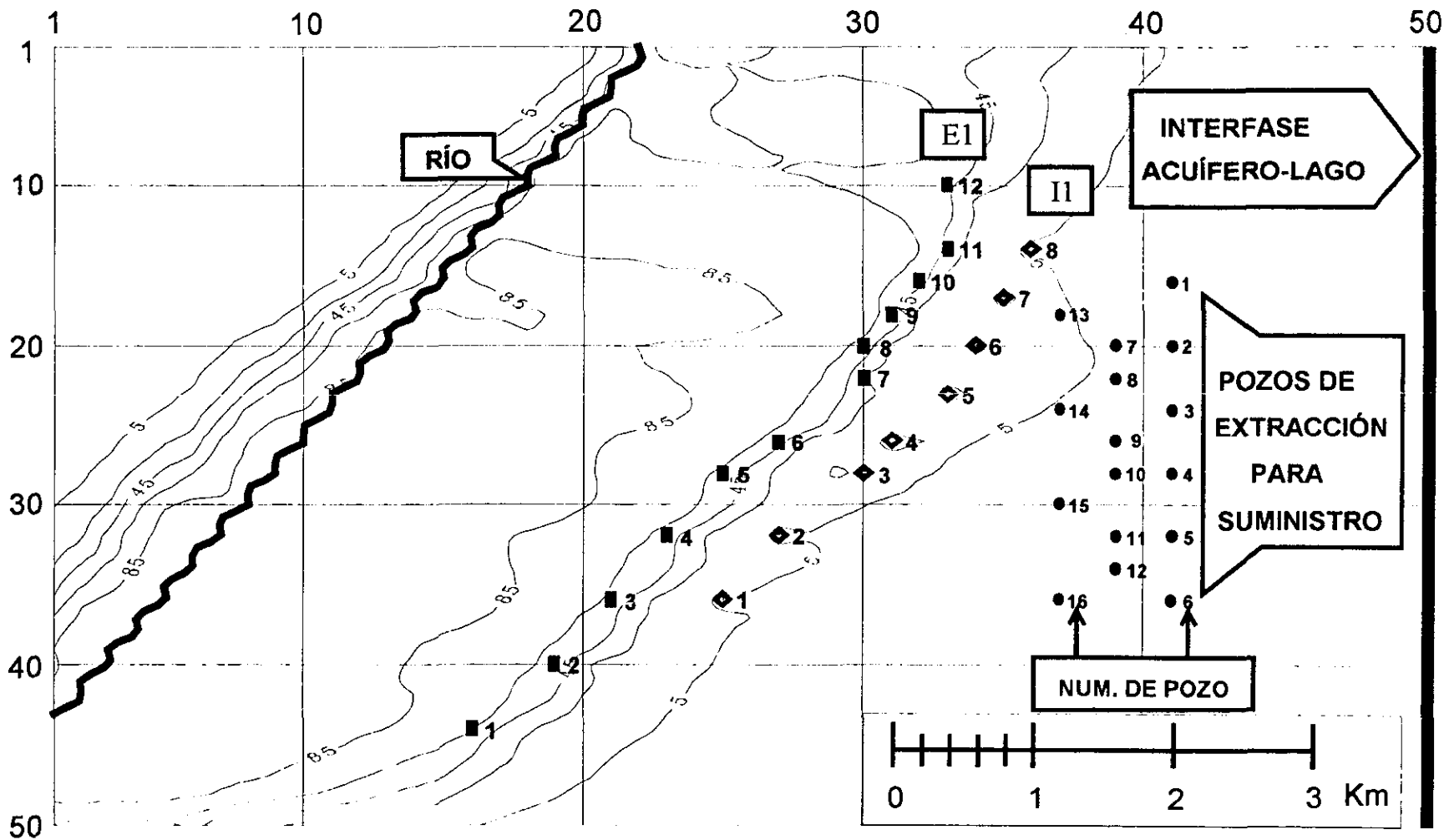


Figura 6.16 Resultados (Caso 4), Contención de la pluma por bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración para el contaminante tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q_e = 250 \ell/s$ y $Q_i = 50 \ell/s$, considerando las baterías E1 e II respectivamente.

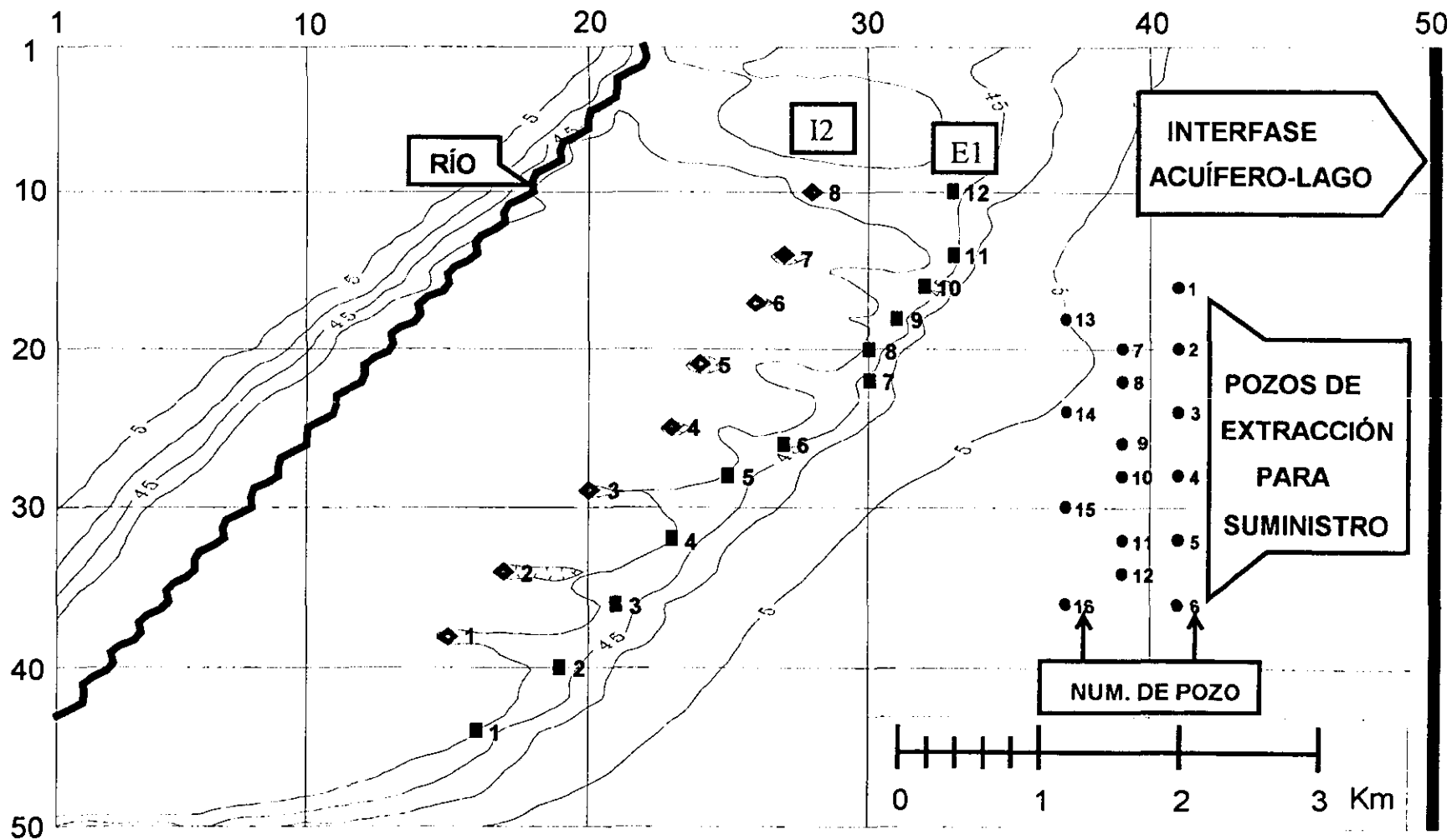


Figura 6.17 Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q_e = 250 \ell/s$ y $Q_i = 50 \ell/s$, considerando las baterías E1 e I2 respectivamente.

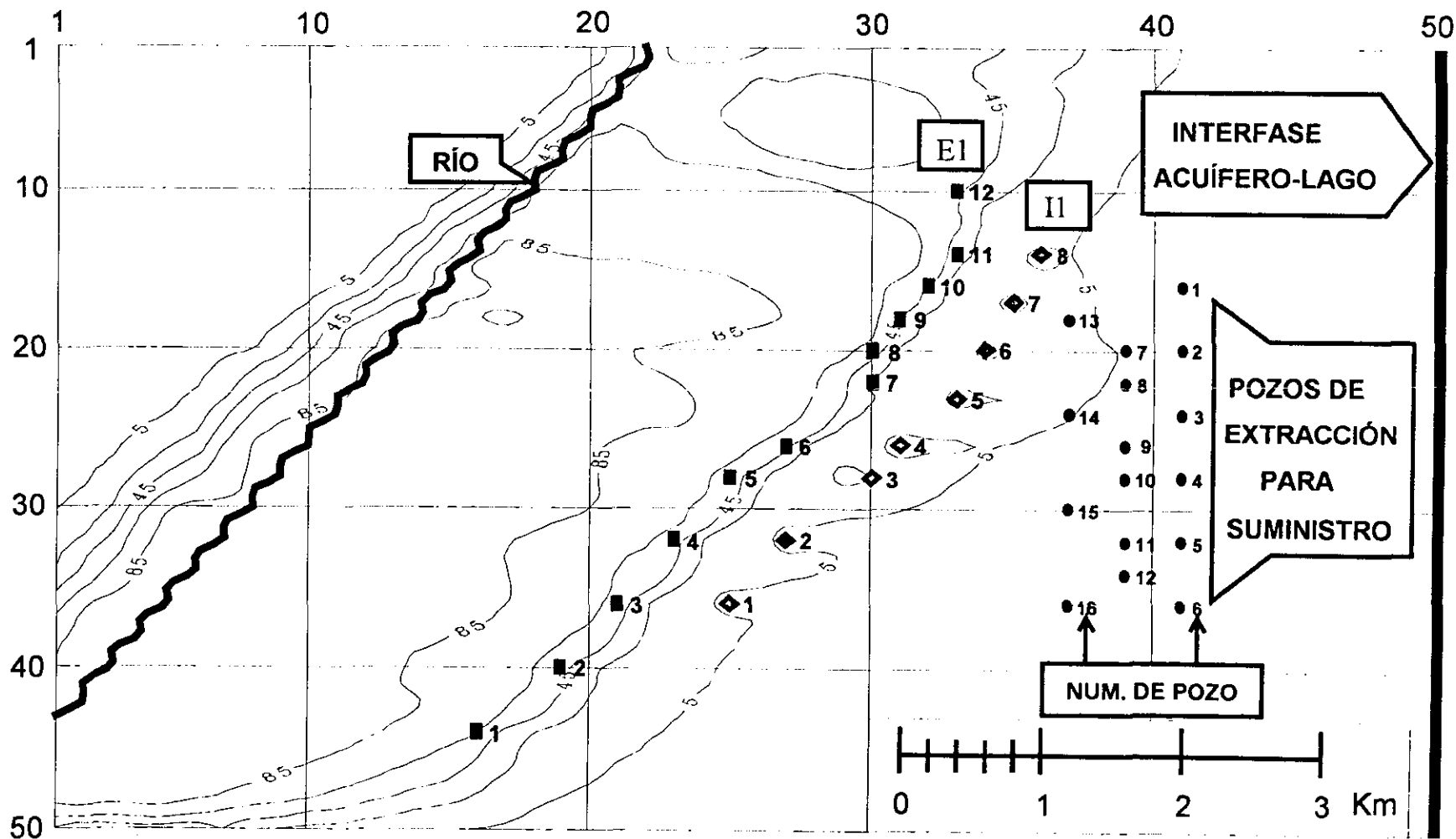


Figura 6.18 *Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q_e = 250 \ell/s$ y $Q_i = 100 \ell/s$, considerando las baterías E1 e II respectivamente.*

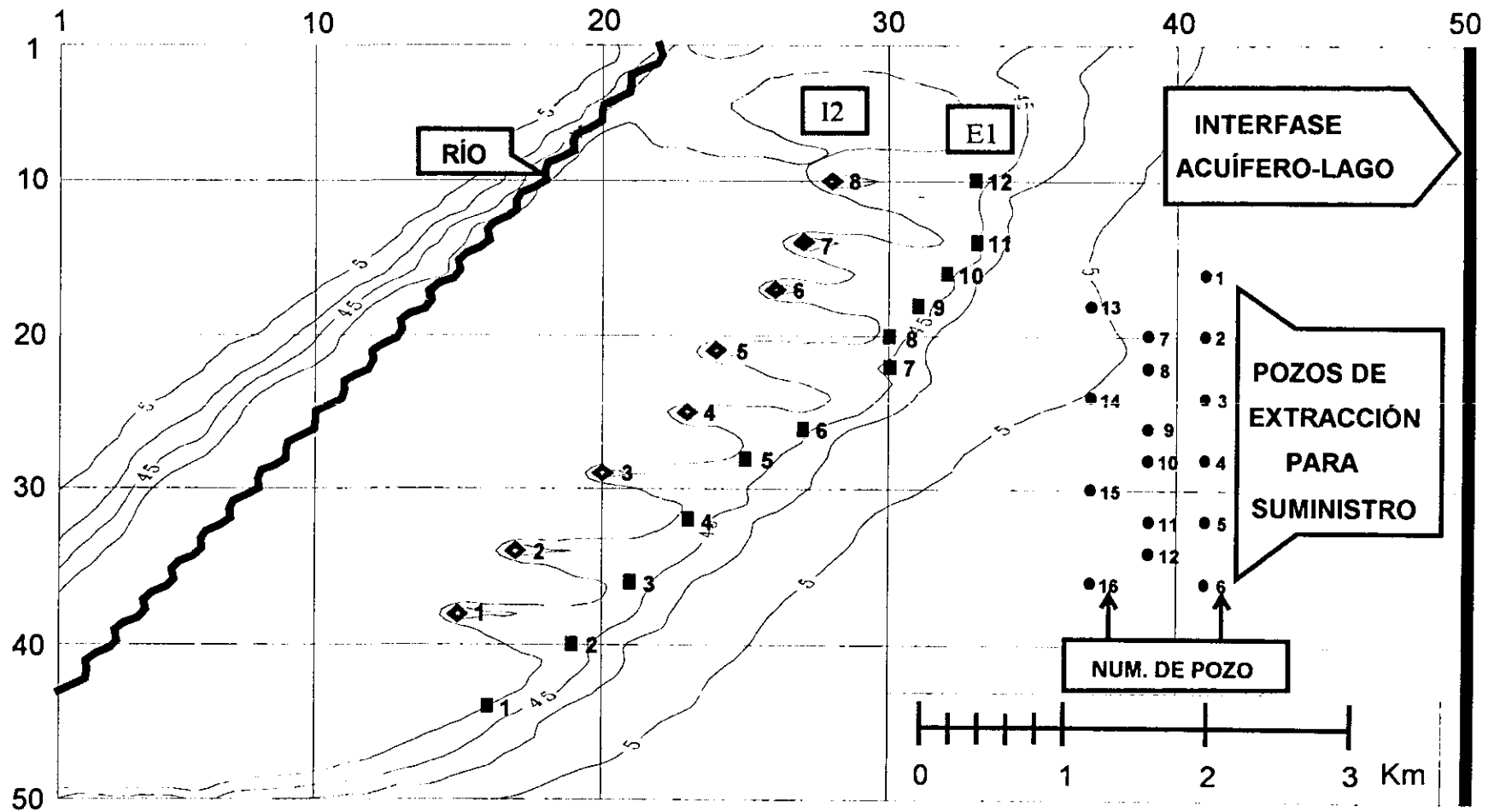


Figura 6.19 Resultados (Caso 4). Contención de pluma por bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración para el tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años con $Q_e = 250 \ell/s$ y $Q_i = 100 \ell/s$, considerando las baterías E1 e I2 respectivamente.

Los resultados para el caso 5 (Eliminación de descargas contaminantes hacia el río) sin emplear ninguna otra técnica para contener la pluma o la fuente se muestran en las figuras 6.20 y 6.21.

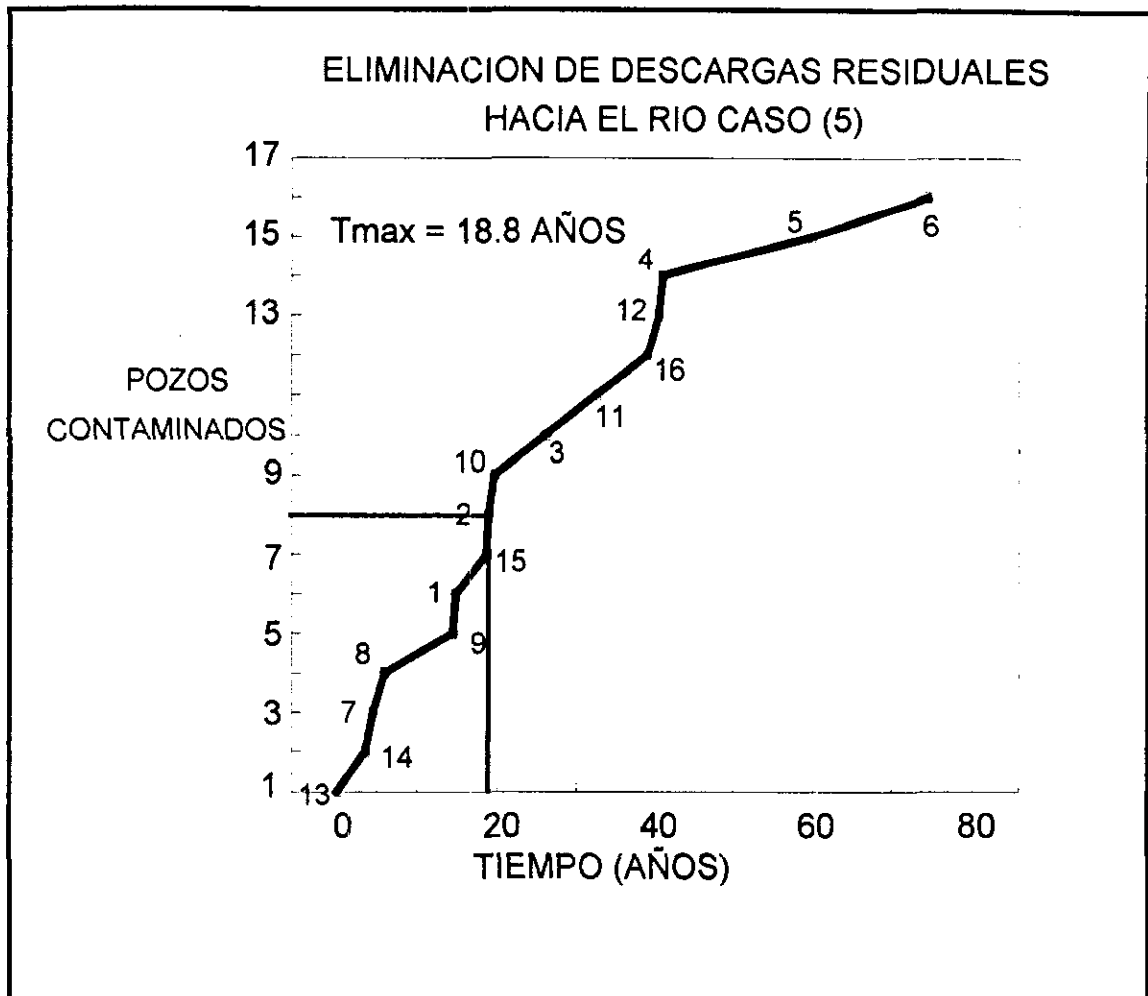


Figura 6.20 *Resultados (Caso 5). Eliminación de descargas residuales hacia el río. El esquema muestra el tiempo y orden de contaminación de los pozos de suministro. Se puede observar en la figura que en aproximadamente 75 años, la totalidad de los pozos de suministro quedan contaminados.*

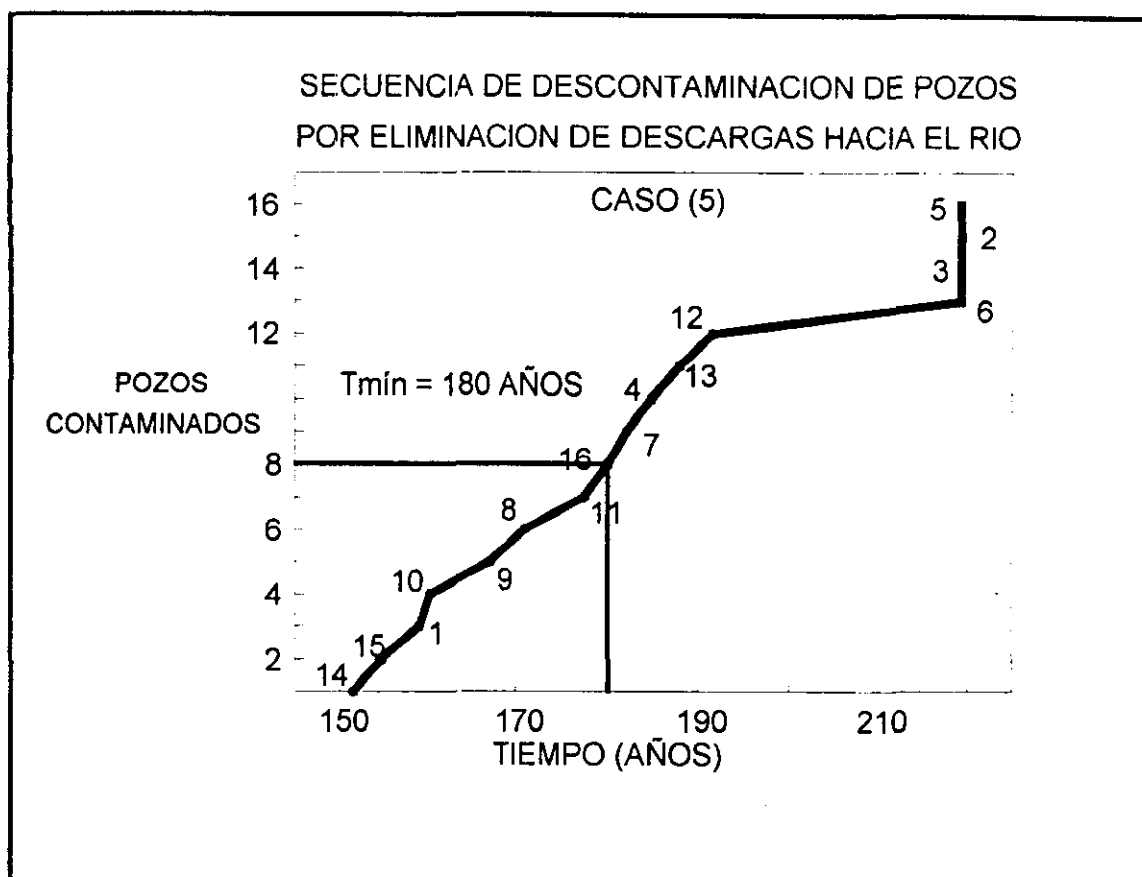


Figura 6.21 *Resultados (Caso 5). Eliminación de descargas residuales hacia el río. La figura muestra el tiempo y orden en que los pozos de suministro empiezan a bombear agua con concentraciones inferiores al límite de potabilidad. Se puede observar que se necesitan mas de 200 años para que la totalidad de los pozos de suministro queden por debajo de este límite.*

Los resultados del caso 6 (Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo exclusivamente) para la capa 2 y un gasto de extracción $Q_e = 250 \ell / s$ por pozo, se muestran en la figura 6.22. Como se puede apreciar en esta figura, la forma como se manifiesta la eliminación de descargas contaminantes hacia el río es por medio del desplazamiento de un frente de mayor concentración de izquierda a derecha. Sin embargo, este hecho no afecta el funcionamiento del sistema en la vecindad de los pozos de suministro, en donde se requiere aplicar todavía un gasto de extracción de entre $200 \ell / s$ y $250 \ell / s$ para poder contener el avance de la pluma.

Para el caso 7 (Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo y tratamiento), los resultados no difieren fuertemente de los del caso anterior. En la figura 6.23. se muestran las concentraciones para la capa 2 considerando un gasto de extracción $Q_e = 250 \ell / s$ y un gasto de inyección $Q_i = 50 \ell / s$ para un tiempo de 20 años. Los efectos de los pozos de inyección son prácticamente locales y no modifican el funcionamiento del sistema en la vecindad de los pozos de suministro.

Los resultados del caso 8 (Entubamiento del río exclusivamente) en contraste con los del caso 5, el efecto de dicha acción se manifiesta casi de inmediato en la vecindad de los pozos de suministro. Las figuras 6.24 y 6.25 muestran los resultados para este caso en la capa 2 a 10 y 20 años respectivamente. Se puede observar que la pluma aun cuando avanza un poco en la vecindad de los pozos de suministro, no lo hace tan rápidamente como para contaminarlos en un periodo corto de tiempo. El frente de mayor concentración en este caso, no se desplaza rápidamente hacia el área de pozos de suministro si no más bien se mantiene en la vecindad derecha de lo que es el lecho del río.

Los resultados del caso 9 (Entubamiento del río aplicando solo bombeo) para la capa 2 a 10 y 20 años se muestran en las figuras 6.26 y 6.27 respectivamente. Como se observa en estas figuras, el frente de mayor concentración no se desplaza hacia el área de pozos de suministro y los frentes pequeños, cercanos a esta área, se contraen ligeramente hacia el área donde están emplazados los pozos de extracción.

Los resultados del caso 10 (Entubamiento del río aplicando bombeo y tratamiento) para la capa 2 a los 10 y 20 años se muestran en las figuras 6.28 y 6.29 respectivamente. Los pozos utilizados para extracción corresponden a los mostrados en la figura 6.9 con un gasto de $Q_e = 50 \ell / s$, y los utilizados para inyección se muestran en la figura 6.10 (I2) con un gasto de $Q_i = 50 \ell / s$.

Para propósitos de comparación y como una forma de resumir el conjunto de simulaciones realizadas, mostramos a continuación los resultados obtenidos en cada una de ellas.

- Caso 1 Se obtiene un tiempo máximo de aprovechamiento del sistema de 18.7 años.
Escenario A) Pasado este intervalo de tiempo, el número de pozos de suministro contaminados rebasa el 50% y consecuentemente el sistema deja de ser aprovechable.
- Caso 2 El tiempo máximo de aprovechamiento del sistema para este caso es 16.1 años, y después de este lapso de tiempo se tiene un porcentaje de pozos de suministro contaminados superior al 50%.
Escenario B)
- Caso 3 De acuerdo a la ubicación de los pozos de extracción mostrada en la figura 6.9, y para gastos entre 200 y 250 ℓ/s , el esquema permite mantener aproximadamente un 93% y un 100% de los pozos de suministro de manera permanente por debajo del límite de potabilidad, siempre y cuando se mantenga el esquema de bombeo.
Escenario C)
- Caso 4 Cuando además de los pozos de extracción considerados en el caso anterior se ponen en operación pozos de inyección con agua tratada a un nivel terciario, los resultados no se manifiestan de manera obvia hasta que se tiene un gasto de inyección de entre 50 y 100 ℓ/s . A pesar de esto, su efecto en cuanto a disminución de las concentraciones en la vecindad de los pozos de suministro sólo se refleja cuando los pozos de inyección se localizan muy cercanos a los pozos de suministro.
Escenario D)
- Caso 5 El hecho de eliminar las descargas contaminantes hacia el río, no se ve reflejado de manera inmediata en la vecindad de los pozos de suministro. Esta acción tiene tan poco efecto a corto plazo que el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema es igual al del primer caso considerado ($t_{\max} = 18.7$ años). Su efecto se manifiesta hasta después de 150 años.
Escenario E1)
- Caso 6 Debido al poco efecto que tiene a corto plazo la eliminación de descargas contaminantes hacia el río, se puede considerar que el (Caso 3) y el (Caso 6) son prácticamente los mismos en el intervalo de 0 a 150 años.
Escenario E2)
- Caso 7 El poco efecto de la eliminación de las descargas contaminantes hacia el río a corto plazo, indica que eliminar las descargas contaminantes hacia el río y aplicar bombeo y tratamiento comparado con aplicar bombeo y tratamiento sin eliminar las descargas hacia el río, da el mismo resultado en el intervalo de 0 a 150 años.
Escenario E3)

- Caso 8
Escenario E1) A diferencia del caso anterior en donde los efectos de las acciones tomadas no se manifestaban de manera inmediata, el entubamiento del río sí tiene efectos a corto plazo en la vecindad de los pozos de suministro. De hecho, los resultados nos indican que esta acción por sí sola permite que más del 50% de los pozos de suministro se mantengan por debajo del límite de potabilidad.
- Caso 9
Escenario E2) El entubamiento del río y la aplicación de un esquema de bombeo nos permiten mantener el 100% de los pozos de suministro sin rebasar el límite de potabilidad. Lo que consideramos importante destacar es que a diferencia del (Caso 3) en donde se requería mantener un gasto de extracción de entre 200 y 250 ℓ/s por pozo para contener el avance de la pluma, en este caso solo se requiere un gasto de extracción no mayor de 50 ℓ/s para lograr el mismo efecto.
- Caso 10
Escenario E3) Los resultados obtenidos en el caso anterior nos permiten prescindir si así lo deseamos, el tener que tratar un determinado volumen de agua contaminada. Sin embargo, si se utiliza un esquema de bombeo y tratamiento con un gasto de extracción $Q_e = 50 \ell/s$ y un gasto de inyección $Q_i = 50 \ell/s$, considerando la batería de pozos de extracción mostrada en la figura 6.9 y la batería de pozos de inyección mostrada en la figura 6.10 (I1), el efecto resultante es una contracción más rápida en la extensión de la pluma además de conservar el 100% de los pozos de suministro por debajo del límite de potabilidad.

Considerando que en este trabajo se ha hecho uso de elementos como pozos de extracción e inyección, barreras de aislamiento y tratamiento de aguas residuales, damos a continuación los costos unitarios estimados para cada uno de estos conceptos.

Instalación de un pozo de extracción de acuerdo con la Comisión Nacional del Agua en Enero de 1997, incluyendo solamente: perforación hasta 200 m con un diámetro de 8", instalación y desmantelamiento de equipo de perforación, colocación de tubería para ademe, aforo o prueba de bombeo 15,500 dólares. Este precio no considera traslado de equipo de perforación, operación del pozo, compra de la bomba, consumo de combustible, excavación y relleno de fosas para lodos y otros conceptos que son necesarios cuando se instala un pozo para extracción, conforme a la Norma Oficial Mexicana [NOM-003-CNA-1996]. El costo de 12 pozos oscilaría alrededor de 186,000 dólares, y el de 20 pozos aproximadamente 310,000 dólares. A este valor habría que agregarle el costo de operación de cada uno de los pozos durante el tiempo que se mantengan en funcionamiento.

Los costos por canalización de un río se estiman en 300,000 pesos los 100 metros, de manera que canalizar 9,000 metros que es la longitud aproximada del río, costaría alrededor de 3,300,000 dólares.

Los costos para tratamiento de aguas residuales contaminadas por solventes, de acuerdo a la empresa Water Treatment Warehouse, Inc., USA., Enero de 1997, se estiman en 166 dólares el metro cúbico. Si consideramos este precio, tratar el agua de un pozo de extracción costaría alrededor de 4320 dólares por pozo por día, considerando que tal pozo extrae un volumen de 50 ℓ / s. El costo de 8 pozos implicaría un gasto aproximado de 34,500 dólares por día.

En la tabla 6.4 se muestra el costo y el tiempo máximo de aprovechamiento para cada una de las alternativas simuladas.

Tabla 6.4 Costo y tiempo máximo de aprovechamiento del sistema para cada una de las alternativas simuladas.

RESULTADOS	COSTO	Tiempo máximo de aprovechamiento	OBSERVACIONES
Caso 1) Evolución natural sin clausura	Ninguno	18.7 Años	Los pozos no son clausurados aun cuando hayan rebasado el límite de potabilidad.
Caso 2) Evolución natural con clausura	Ninguno	16.1 Años	Cada pozo que rebase el límite de potabilidad es clausurado.
Caso 3) Contención de pluma por bombeo exclusivamente.	186,000 dólares más costos de operación.	>100 Años para un gasto de 250 (ℓ / s) por pozo.	Este esquema se debe mantener en funcionamiento continuo para lograr el objetivo propuesto.
Caso 4) Contención de pluma por bombeo y tratamiento.	310,000 dólares + 34,500 dólares diarios + costos de operación.	>100 Años considerando $Q_e = 250 \ell / s$ $Q_i = 50 \ell / s$ por pozo.	Los pozos de inyección tienen una influencia prácticamente local. Son los pozos de extracción los que permiten que se mantengan estas condiciones.
Caso 5) Eliminación de descargas residuales hacia el río exclusivamente.		16.1 Años	El tiempo mínimo de espera para volver a tener el 50% de los pozos de suministro por debajo del límite de potabilidad es 180 años.

Caso 6) Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo exclusivamente,	186,000 dólares + costos de operación.	>100 Años	Lo que permite mantener este esquema, son los pozos de extracción. La eliminación de descargas no incide en este resultado a corto plazo.
Caso 7) Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo y tratamiento.	310,000 dólares + 34,500 dólares diarios + costos de operación.	>100 Años	Nuevamente son los pozos de extracción los que permiten mantener este esquema. Los pozos de inyección tienen una influencia muy local.
Caso 8) Entubamiento del río y evolución en condiciones naturales.	3,300,000 dólares	>50 Años.	Este esquema se mantiene con un 87% de los pozos de suministro sin rebasar la norma de potabilidad.
Caso 9) Entubamiento del río con bombeo exclusivamente.	3,486,000 dólares + costos de operación	>100 Años.	En este caso se mantiene este esquema con un 100% de los pozos de suministro sin rebasar la norma de potabilidad con un bombeo de $Q_e = 50 \ell / s$.
Caso 10) Entubamiento del río con bombeo y tratamiento.	3,610,000 dólares + 34,500 dólares + costos de operación y mantenimiento.	>100 Años.	Este esquema se mantiene con un 87% de los pozos de suministro sin rebasar la norma de potabilidad y con $Q_e = 50 \ell / s$ y $Q_i = 50 \ell / s$.

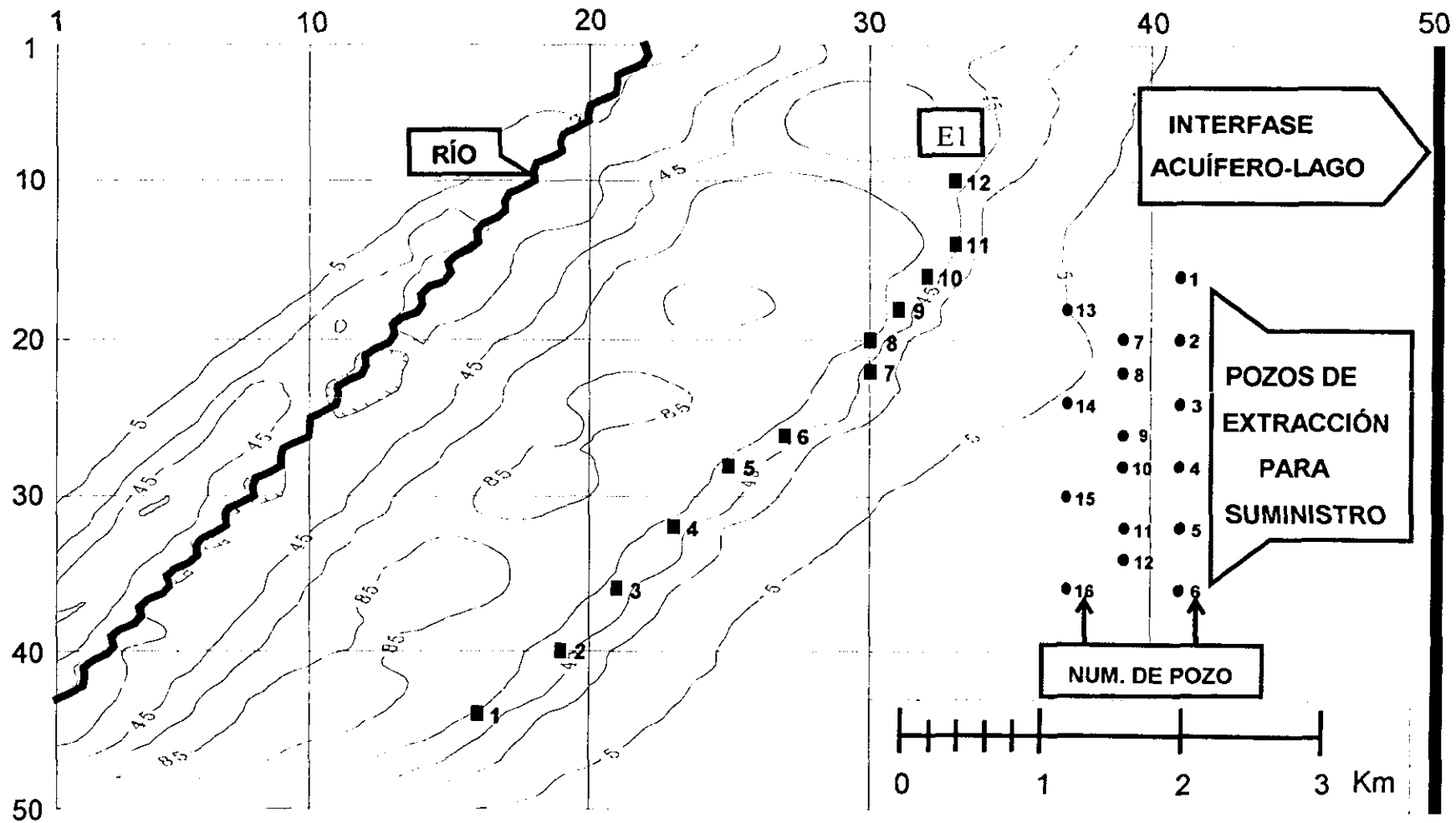


Figura 6.22 *Resultados (Caso 6). Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentración del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 al cabo de 10 años. Se utiliza la batería de pozos de extracción E1 con $Q_e = 250 \ell/s$.*

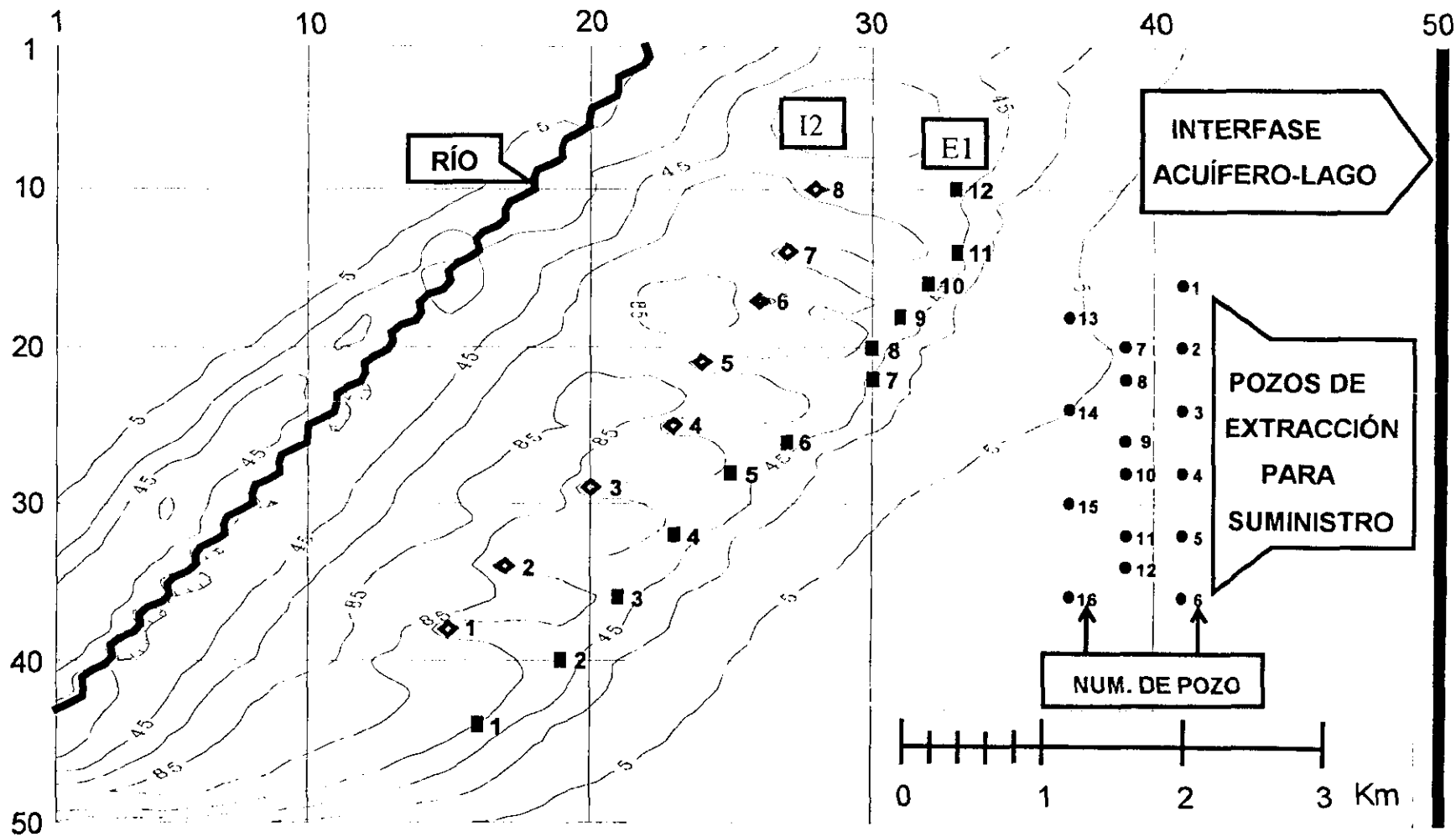


Figura 6.23 Resultados (Caso 7). Eliminación de descargas residuales hacia el río con bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 al cabo de 10 años empleando $Q_e = 250 \ell/s$ y $Q_i = 50 \ell/s$ para las baterías E1 e I2 respectivamente.

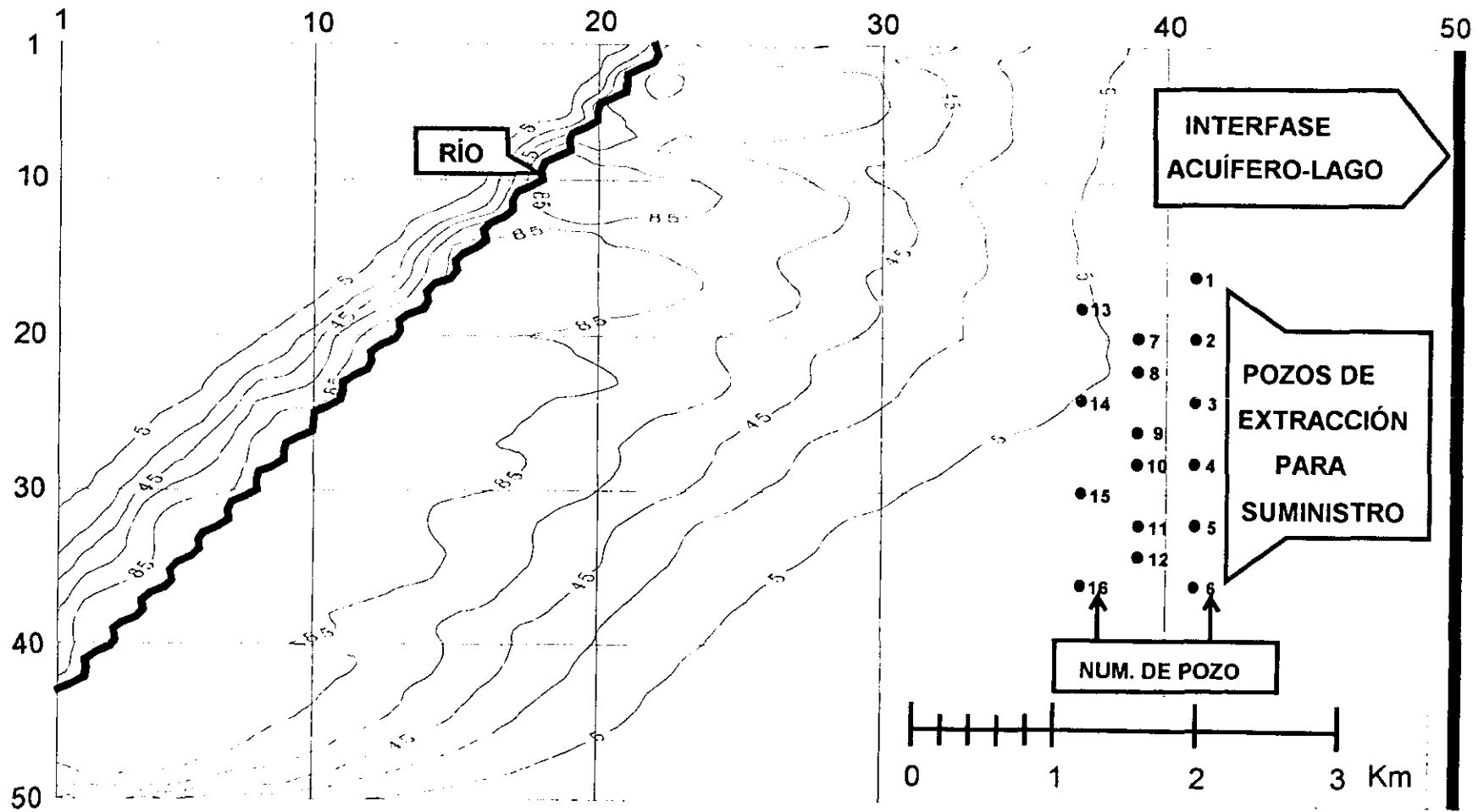


Figura 6.24 *Resultados (Caso 8). Entubamiento del río y evolución en condiciones naturales. Líneas de igual concentración del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 al cabo de 10 años. En esta simulación se eliminó tanto la recarga como el flujo de contaminantes hacia el acuífero.*

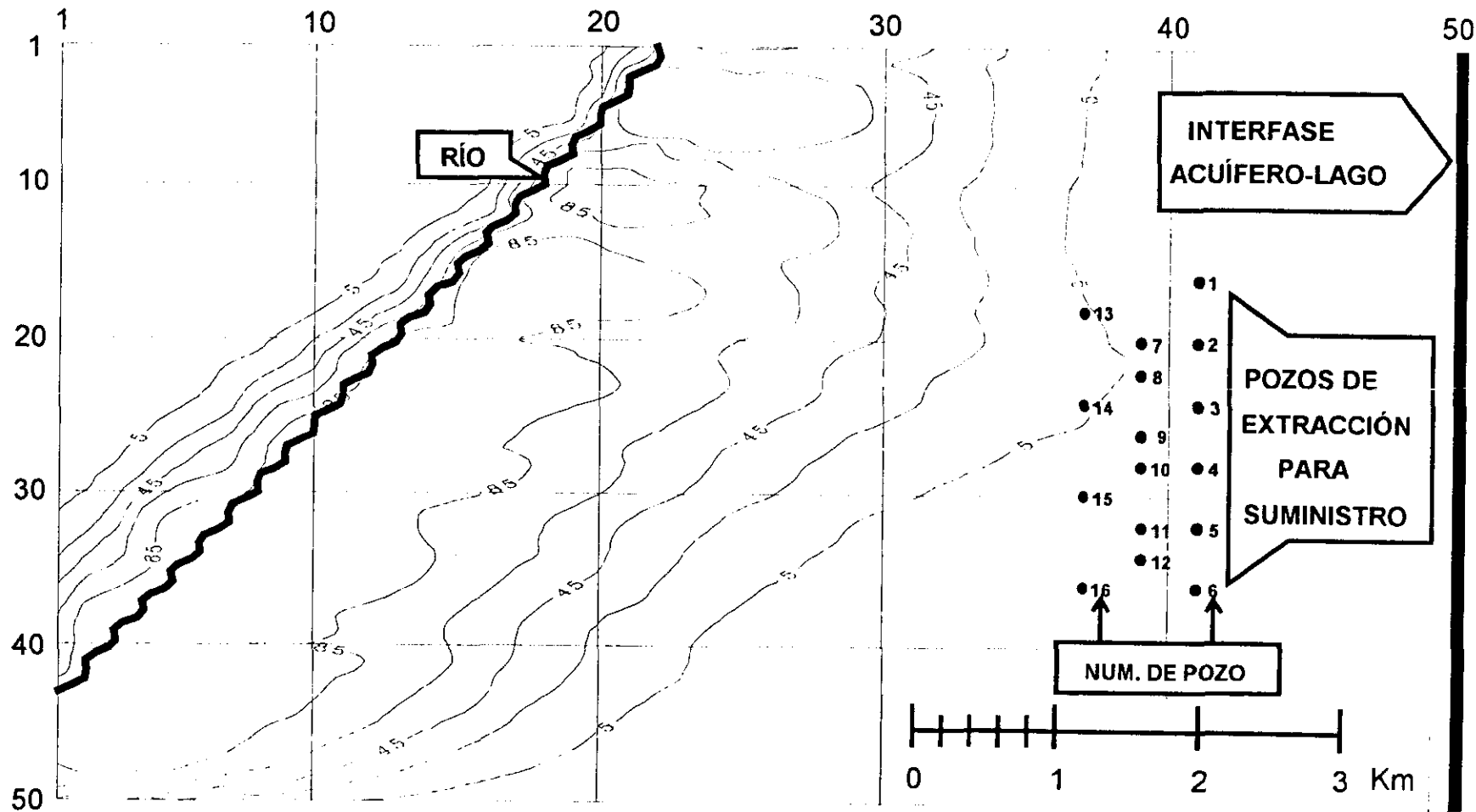


Figura 6.25 *Resultados (Caso 8). Entubamiento del río y evolución en condiciones naturales. Líneas de igual concentración del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 al cabo de 20 años. Nótese que en 10 años, la pluma contaminante no ha avanzado de manera significativa hacia los pozos de suministro.*

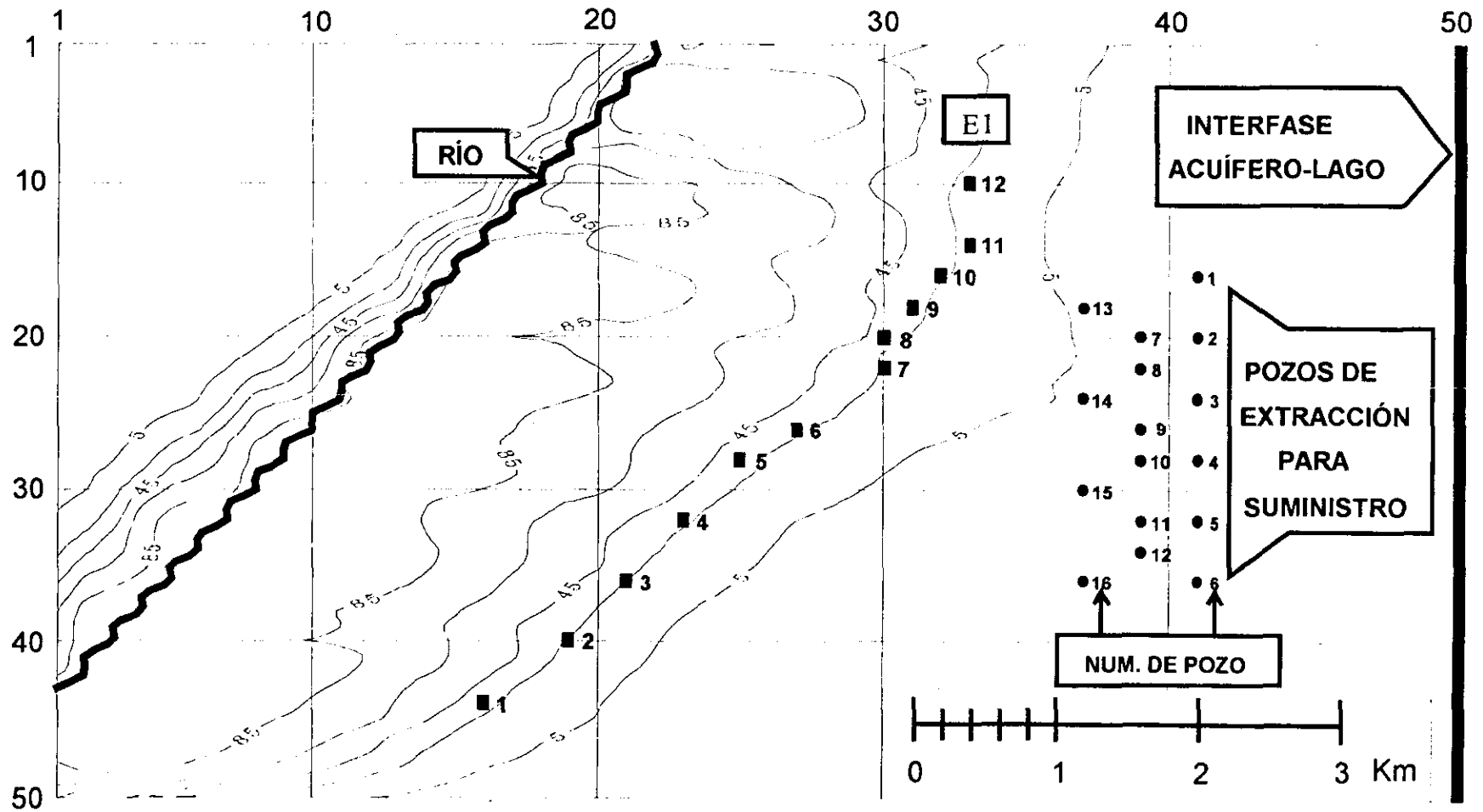


Figura 6.26 Resultados (Caso 9). Entubamiento del río y bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 10 años utilizando la batería de pozos de extracción EI, con un gasto de extracción $Q_e = 50 \ell/s$.

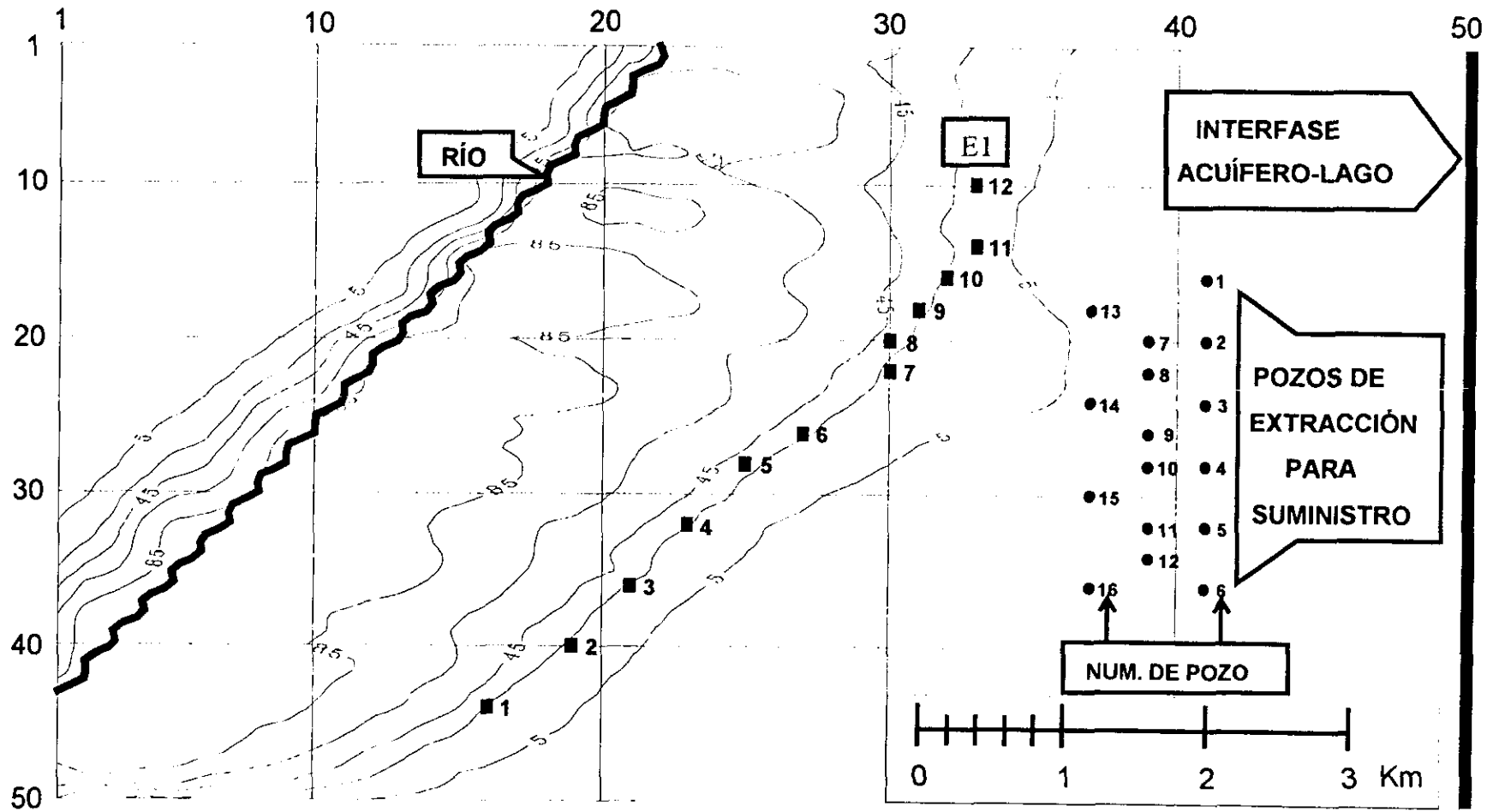


Figura 6.27 Resultados (Caso 9). Entubamiento del río y bombeo exclusivamente. Líneas de igual concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 a los 20 años utilizando la batería de pozos de extracción E1 con un gasto $Q_e = 50 \ell/s.$

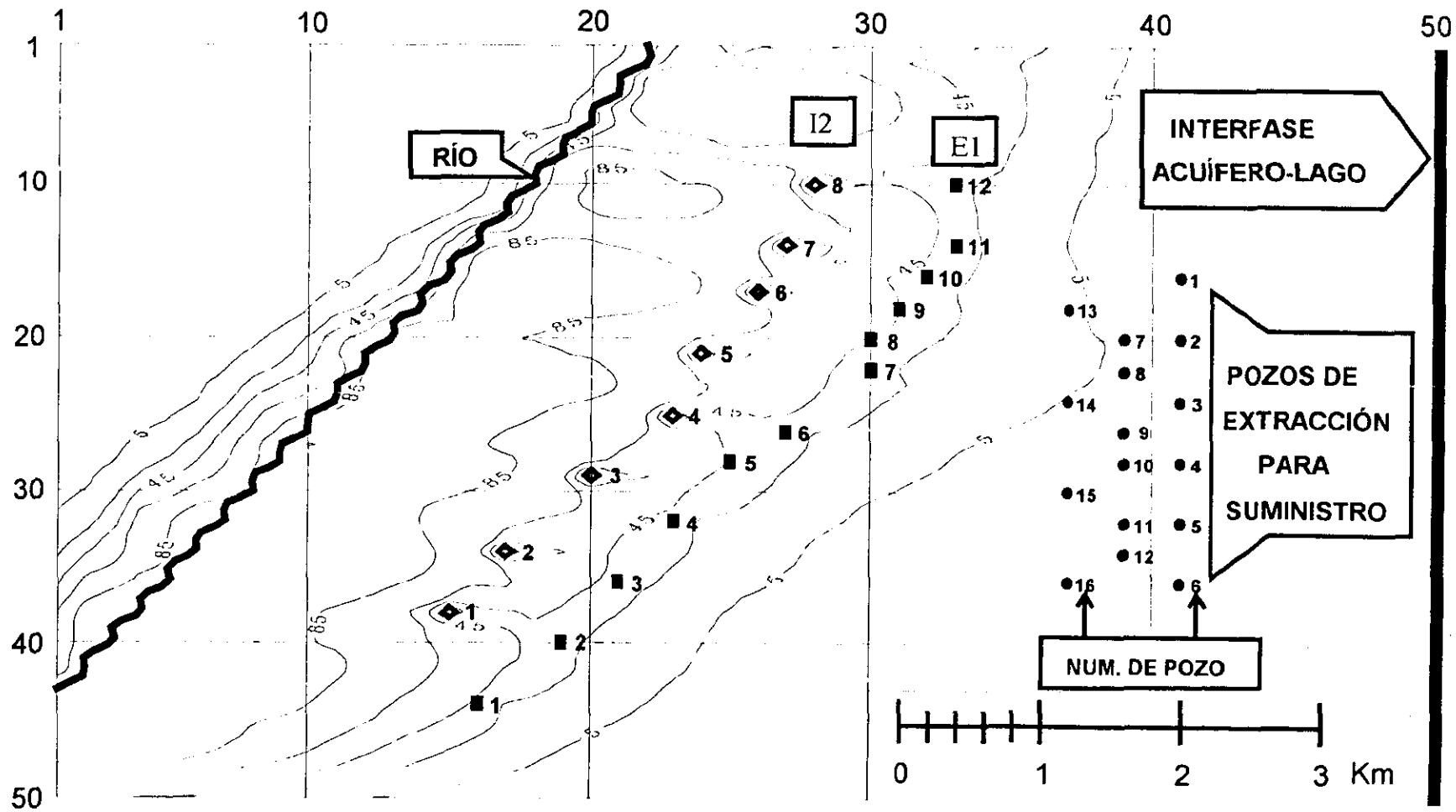


Figura 6.28 Resultados (Caso 10). Entubamiento del río con bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentraciones del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 después de 10 años con $Q_e = 50 \ell/s$ y $Q_i = 50 \ell/s$ para las baterías E1 e I2 respectivamente.

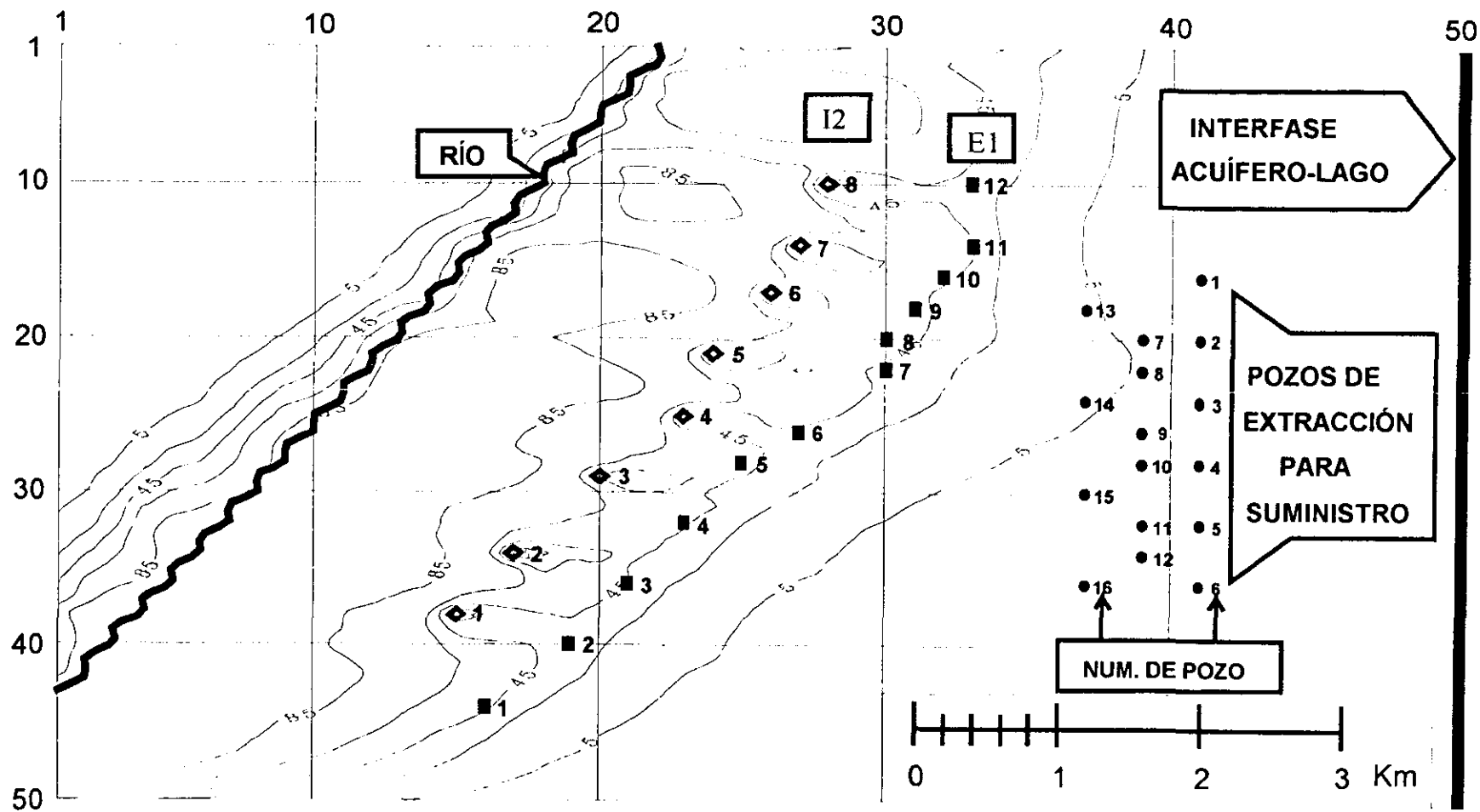


Figura 6.29 Resultados (Caso 10). Entubamiento del río con bombeo y tratamiento. Líneas de igual concentración del tricloroetileno (TCE) ($\mu\text{g}/\ell$) en la capa 2 al cabo de 20 años con $Q_e = 50 \ell/s$ y $Q_i = 50 \ell/s$ para las baterías E1 e I2 respectivamente.

CONCLUSIONES

La contaminación de acuíferos por solventes orgánicos clorados en la actualidad representan un gran problema. Así lo indican los registros históricos de países industrializados, donde se dedican presupuestos bastante altos para tratar este tipo de problemas. En los países en vías de desarrollo, la falta de datos no permite valorar el problema por completo. Por otra parte, la disponibilidad de técnicas de remediación para tratar problemas de contaminación con solventes orgánicos clorados es bastante reducida; a la fecha solo se dispone de la técnica de bombeo y tratamiento y el método de barreras de aislamiento como técnicas probadas, y éstas generalmente no pueden eliminar por completo cualquier problema de contaminación, excepto en muy pocos casos. Técnicas tales como: embudos y compuertas, biorremediación, recuperación de productos libres, vitrificación e incorporación de suelos contaminados al asfalto, aun cuando su potencialidad es bastante prometedora, se encuentran en una etapa experimental a nivel de laboratorio o a nivel de campo.

Por otra parte, la aplicación de estas técnicas con propósitos de restauración a sistemas contaminados, ya sea con solventes orgánicos o cualquier otro tipo de contaminante, necesariamente implica el uso de la modelación matemática del sistema como una forma de determinar: lugares de aplicación, tiempo de operación y costo aproximado del esquema. La modelación del problema de contaminación por tricloroetileno en fase disuelta, sin considerar una fase densa y una fase volátil hecha en el capítulo VI de este trabajo, muestra lo difícil que resulta restaurar un acuífero aun cuando se tenga toda la información necesaria disponible. En la mayoría de los problemas de contaminación reales, no se dispone de toda esta información y se requiere formular hipótesis o realizar pruebas de campo para estimar la extensión del área contaminada, medir parámetros como coeficientes de distribución y coeficiente de dispersividad con el fin de poder desarrollar un modelo conceptual de funcionamiento del sistema.

Los resultados obtenidos para los casos 1) evolución natural sin clausura de pozos y 2) evolución natural con clausura de pozos, no representa una buena opción dado que, el tiempo máximo de aprovechamiento del sistema se encuentra entre 16 y 18 años bajo este esquema de operación, aun cuando el llevar a cabo esto no implique gasto alguno. Las mismas simulaciones permiten identificar que el último de los pozos de suministro, se contamina aproximadamente a los 75 años.

Los resultados de las simulaciones para el caso 3), contención de la pluma por bombeo exclusivamente, muestran que ésta podría ser una opción viable, dado que permite continuar la explotación del sistema durante por lo menos 100 años, si se utiliza una batería de 12 pozos de extracción con un gasto de 250 ℓ/s cada uno y se ubican de acuerdo a la figura 6.9. El costo para este esquema considerando solo la instalación de los pozos, se estima en 186,000 dólares. La única condición que puede considerarse como una limitante para mantener este esquema de operación, es contar con un sitio donde se pueda descargar toda el agua extraída del sistema, de tal manera que esta no se convierta en una nueva fuente de contaminación para el propio acuífero.

La utilización de plantas de tratamiento para eliminar el contaminante del agua extraída del sistema, al menos en este caso no parece ser una buena opción dado que, la influencia de estos pozos en el funcionamiento global del sistema, tiene un efecto prácticamente local para volúmenes de inyección inferiores a 50 ℓ/s por pozo, y solo se manifiesta de manera obvia para volúmenes de inyección mayores o iguales a 100 ℓ/s . Si se considera que la perforación y equipamiento de un pozo, y la compra y operación de una planta de tratamiento para este tipo de contaminante representan un costo bastante elevado, y se requieren tratar grandes volúmenes de agua, la relación costo beneficio sería muy baja. Esta técnica podría funcionar de manera adecuada para fuentes y plumas pequeñas, no para las dimensiones que tiene la que se trata en este caso.

La eliminación de descargas residuales hacia el río, de acuerdo con las simulaciones realizadas en los casos 5), 6) y 7), tampoco parece ser una buena opción a corto y mediano plazo, ya que este hecho solo permite que se continúe con la explotación del sistema durante los siguientes 16.1 años sin rebasar la norma de potabilidad en al menos 50% de los pozos de suministro, y al igual que en los dos primeros casos, el conjunto completo de pozos de extracción queda contaminado en aproximadamente 75 años. Pasado este intervalo de tiempo, deberán transcurrir al menos 75 años (150 años en total) para que los primeros pozos de suministro empiecen a bombear agua con concentraciones inferiores al límite de

potabilidad. Las mismas simulaciones muestran que es necesario establecer un conjunto de pozos de extracción como el mostrado en la figura 6.9, para poder continuar con la explotación del acuífero, en caso contrario el sistema no podría aprovecharse durante los siguientes 180 años. El costo de esta opción se estimó en 310,000 dólares sin considerar gasto alguno para la eliminación de descargas residuales.

El entubamiento del río, de acuerdo con las simulaciones realizadas en los casos 8) y 9), representa la mejor opción. Esta opción por sí sola permite que el acuífero sea explotado durante los siguientes 50 años con un 87% de los pozos de suministro sin rebasar la norma de potabilidad del agua. Cuando se entuba el río y se aplica un esquema de contención de la pluma por bombeo exclusivamente, el sistema puede explotarse por al menos 100 años con un 100% de los pozos de suministro por debajo de la norma de potabilidad del agua $5 \mu\text{g} / \ell$. Sin embargo, existe una diferencia entre la contención de la pluma por bombeo que se aplica en este caso y los casos tratados antes. En este caso solo se requiere extraer un volumen de $50 \ell / \text{s}$ por pozo, en contraste con los casos anteriores en donde era necesario extraer un volumen de $250 \ell / \text{s}$ por pozo para contener la pluma. El costo asociado con este esquema se estimó en 3,486,000 dólares, 3,300,000 dólares por canalización y 186,000 dólares para perforación y equipamiento de pozos.

Un beneficio adicional del esquema anterior es que el entubamiento del río no requiere de un mantenimiento continuo. Los costos de operación solo estarán enfocados a los pozos de extracción, mientras que el ducto del río solo requerirá de un monitoreo y un mantenimiento eventual.

El análisis de todas las alternativas simuladas, sugiere que las únicas opciones viables para continuar con la explotación del acuífero las representan:

- Contención de la pluma por bombeo exclusivamente.
- Entubamiento del río con o sin contención de la pluma por bombeo.

Como se puede ver en los resultados obtenidos, ninguna de las dos soluciones encontradas remueve el contaminante del sistema, más bien lo deja en estado de suspensión en donde su presencia no afecta el funcionamiento de los pozos de suministro, pues remover el contaminante por completo resultaría aun más costoso que el propio esquema de contención.

De acuerdo con estas conclusiones, naturalmente tomadas con la debida prudencia que requiere toda estimación de esta índole, el entubamiento o canalización del río combinado con un sistema de bombeo, constituye una alternativa atractiva de remediación parcial para las características del acuífero y contaminante bajo estudio. Existen, no obstante, algunas objeciones que pueden aducirse cara a la correcta aplicación de éstas técnicas, y es que en ocasiones muestran escasa relación con las hipótesis de partida. Por ello, actualmente en los estudios de modelación se tiende a tener en consideración la información global, tanto física como numérica del proceso de contaminación, de manera que el conjunto de estas características contribuya a optimizar el resultado de las mismas.

En México, la remediación de acuíferos contaminados con solventes orgánicos con base en modelos matemáticos se encuentra en una etapa inicial, y de hecho, en la actualidad no se cuenta con una base de datos completa para poder realizar simulaciones de éste tipo. Esto hace que aún trabajos teóricos como el presente, intenten de alguna manera valorar la importancia que tiene el conservar un recurso natural como lo es el agua subterránea, y poner de manifiesto los alcances de un problema de contaminación con solventes orgánicos.

BIBLIOGRAFIA

- Adamson A.W., 1967, *Physical Chemistry of Surfaces, 2a. Ed.*, Interscience, New York.
- Allen, M., Herrera, I. and Pinder, G., 1987. *Computational Modelling in Science and Engineering.*, John Wiley and Sons.
- Alternatives for Ground Water Cleanup*, National Research Council, 1994., National Academy Press, Washington, D.C.
- Anderson, M.P., 1984. *Movement of contaminants in groundwater: groundwater transport advection and dispersion.* Groundwater Contamination. National Academy Press, Washington, D.C. p.37-45
- API (American Petroleum Institute), 1993. *Pump and Treat.* The Petroleum Industry Perspective, Washington, D.C.
- Bachmat, Y., 1967. *On the similitude of dispersion phenomena in homogeneous and isotropic porous media.* Water Resour. Res., Vol. 3, No. 4, pp 1079-1083.
- Bear, J., 1961. *On the tensor form of dispersion in porous media.* J. Geophys Res., Vol. 66 No. 4, pp 1185-1197.
- Bear, J. and Verruijt, A., 1987. *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, D. Reidel Publishing Company, Boston.
- Blowes, D.W. and Ptacek, C.J., 1992. *Geochemical remediation of groundwater by permeable reaction walls: Removal of chromate by reaction with iron-bearing solids.* *Subsurface on Restoration Conference*, Third International Conference on Groundwater Quality Research, Dallas, TX, June 21-24.
- Bredehoeft, J.D., and Pinder, G.F., 1973. *Mass transport in flowing groundwater.* Water Resour. Res., Vol. 9, No. 1, pp 194-210.

Burris, D.R. and Cherry, J.A., 1992. *Emerging plume management technologies: In situ Treatment zones*. Eighth Annual Air and Waste Management Meeting, Kansas City, MO, June 21-26.

Burnett, R.D. and Frind, E.O., 1987. *An alternating direction Galerkin technique for simulation of groundwater contaminant transport in three dimensions, 2, Dimensionality effects*. Water Resour. Res., 23(4), pp. 695-705.

Calabrese, E. J. and Kosteki, P. T., 1991. *Hydrocarbon Contaminated Soils and Groundwater*, V. 2, Lewis Publishers, Inc.

Canter, L.W. and Knox, R.C., 1986. *Ground water pollution control*, Lewis Publishers, Inc. Chelsea, MI, pp 526.

Celia M. A., Russell T. F., Herrera I. and Ewing R. E., 1990 *An Eulerian-Lagrange localized adjoint method for the advection-diffusion equation* Adv. Water Resources, Vol. 13, No. 4 pp 187-206.

Charbeneau, R.J., Bedient P.B. and Loehr, R.C., 1992. *Groundwater Remediation*, Technomic Publishing CO. INC., Lancaster, PA.

Chargoy, L. y Herrera, I., 1987. *Modelación Macroscópica Aplicada a Sistemas Geohidrológicos*, Comunicaciones Técnicas, I.G.F., UNAM, Noviembre, 1987.

Cheng, R.T., Casulli, V. and Milford, S.N., 1984. *Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates*. Water Resour. Res. V. 20 No.2, pp.944-952

Cherry, J.A., Gillham, R.W. and Baker, J.F., 1984. *Contaminants in groundwater: chemical processes*. In Groundwater Contamination. National Academy Press, Washington, D.C., pp 46-64.

Criterios Ecológicos de Calidad del Agua. Publicado en el Diario Oficial de la Federación, 13 de Diciembre de 1989. México D.F.

Comisión Nacional del Agua NOM-003-CNA-1996, publicada en el Diario Oficial de la Federación del día 12 de Junio de 1996.

Devlin, J.F. and Barker, J.F., 1993. *A semi passive nutrient injection system for in situ bioremediation*. ASCE International Symposium on Engineering Hidrology, San Francisco CA.

Dibble, J.T. and Bartha, R., 1979. *Effects of environmental parameters on the biodegradation of oil sludge*. Appl. Environ. Microbiol., 37: 729,739.

Dresen, M.D., Isherwood, W.F. and Ziagos, J.P., 1991. *Proposed Remedial Action Plan for the LLNL. Livermore site, Livermore, California*. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA.

El-Kadi, A.I., 1988. *Applying the USGS mass-trnsport model (MOC) to remedial actions by recovery wells*. Ground Water V.26, No.3, pp 281-288

Electric Power Research Institute, 1988. *Remedial Technologies for Leaking Underground Storage Tanks, Chelsea, MI*, Lewis Publishers.

Ehrenfeld, J. and Bass. J., 1984. *Evaluation of remedial action unit operations at Hazardous waste disposal sites*, Noyles Publications, Park Ridge, NJ, pp 434.

Feenstra, S., 1990. *Evaluation of multi-component DNAPL source by monitoring of dissolved-phase concentrations*. Conferene on Subsurface Contamination by Immiscible Fluids. International Association of Hydrogeologists, Calgary, Alberta, April 18-20, 1990.

Feenstra S. and Cherry J., 1988. *Subsurface Contamination by Dense Non-Aqueous Phase Liquid (DNAPL) Chemicals*. Presented at: The International Groundwater Symposium International Association of Hydrologists, Halifax, Nova Scotia, May 1-4, 1988.

Freeze, R.A., 1975. *A stochastic conceptual analisis of one-dimensional ground-water flow in non-uniform homogeneous media*. Water Resour. Res., Vol. 11, No. 5, pp 725-741.

Freeze, R.A. and Cherry, J.A., 1979. *Groundwater*, Prentice-Hall, Inc., A. Simon&Schuster Company, Englewood Cliffs, New Jersey.

- Freundlich, C.G.L., 1926, *Colloid and Capillary Chemistry*, Methuen, London.
- Garder, Jr. A.O., Peaceman, D.W. and Pozzi, Jr. A.L., 1964. *Numerical Calculation of multidimensional miscible displacement by the method of characteristics*. Soc.Pet.Eng. J. V.6, No.2, pp. 175-182.
- Gillham, R.W. and Cherry, J.A., 1982. *Contaminant Migration in Saturated Unconsolidated Geologic Deposits*. Geologic Society of America Special Paper 189, pp 31-61
- Gillham, R.W. and O'Hannesin, S.F., 1992. *Metal-catalysed abiotic degradation of halogenated organic compounds*. *Modern Trends in Hydrogeology*, International Assoc. of Hydrogeologists, Hamilton, Ontario, may 10-13.
- Greenkorn, R.A., and Kessler, D.P., 1969. *Dispersion in heterogeneous nonuniform anisotropic porous media*. Ind.Eng. Chem., Vol. 61, No. 9, pp 14-32.
- Grove, D.B., 1976. *Ion Exchange Reactions Important in Groundwater Quality Models*. Advances in Groundwater Hydrology.
- Grove, D.B. and Stollenwerk, K.G., 1984 *Computer model of one-dimensional equilibrium-controlled sorption processes*. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations.
- Ground Water Models, Scientific and Regulatory Applications,. 1990. *Water Science and Technology Board, Committee on Ground Water Modeling Assessment, Commission on Physical Sciences Mathematics and Resources*, National Research Council, National Academy Press, Washington, D.C.
- Harleman, D.R.E., and Rumer, R.R., 1962. *The Dynamics of Salt-Water Intrusion in Porous Media*. Rep. No. 55, Hydrodynamic Lab., MIT, Cambridge, MA.
- Harman J., Mackay D. and Cherry, J., 1993. *Final report to U.S. Air Force*. Waterloo, Ontario Canadá: Waterloo Centre for Ground Water Research.

Hendricks, D. W., 1972, *Sorption in flow through porous media*, in J. Bear (ed.), *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media*, Elsevier, Amsterdam, pp. 384-392.

Herrera, I. y Allen, M., 1986. *Modelación Computacional de Sistemas en Ciencias e Ingeniería*, Comunicaciones Técnicas, I.G.F. UNAM, Octubre, 1986.

Herrera, I., 1994. *Contaminación, Remediación y sus Modelos Matemáticos*, Comunicación interna, Instituto de Geofísica, UNAM.

Hoffman, F., 1993. *Ground-Water Remediation Using "Smart Pump and Treat"* Ground Water, Vol. 31, pp 99-106.

International Technology Corporation, 1989. Remedial Investigation: Former Firestone Facility. Salinas, Calif: John Steinbeck Library.

Isherwood, W.F., Rice, D.W. Ziagos, J. and Nichols, E., 1991. *"Smart" Pump and Treat*. Proceedings of the Environmental Remediation 91 Conference, Pasco, WA, September 1991. U.S. Department of Energy.

Istok, J., 1989. *Groundwater Modeling by the Finite Element Method*, American Geophysical Union, Washington, D.C.

Javandel, I., Doughty, C. and Tsang, C.F., 1984. *Groundwater Transport: Handbook of Mathematical Models*, American Geophysical Union, Washington, DC.

Cherry J. A., y Feenstra., S., 1990. *Dense organic solvents in groundwater: Conceptual models and implications.*, Dense Organic Solvents in Groundwater, Book Chapter 1.

Cherry, John A., Feenstra Stan y Mackay, D.M., 1992. *Developing a conceptual framework and rational goals for groundwater remediation at DNAPL sites*, For publication in proceedings of: Subsurface Restoration Conference Third International Conference on Ground Water Quality Research, Dallas, Texas, June 21-24.

Johnson P.C., Stanley, C.C., Kemblowski, M.W., Byers D.L. and Colthart, J.D., 1990. "A practical approach to the Design, Operation and Monitoring of In-Situ Soil Venting System", *Ground Water Monitoring Review*, 10:2:159-178.

Keely, J.F., 1984. *Optimizing Pumping Strategies for Contaminant Studies and Remedial Actions*. *Ground Water Monitoring Review*. V.4, No. 3, Summer 1984.

Konikow, L.F., and Bredehoeft, J.D., 1978. *Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water*. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Book 7, Chapter C2, 90 pp.

Kueper, B.H. and McWhorter, D.B., 1990. *The behaviour of dense immiscible liquids in fractured media*, *Water Resources Research*

Landau, L.D. and Lifshitz, E.M., 1979. *Fluid Mechanics*, Pergamon Press LTD, Oxford.

Langmuir, I., 1918. *The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum*, *J. American Chemical Soc* 40, 1362-1403.

Lapidus, L. and Amundson, N. R., 1952, *Mathematics of absorption in beds VI. The effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns*, *J. Phys. Chemical* 56, 984-988

Lapidus, L. and Pinder, G.F., 1982. *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*, ed. John Wiley&Sons, New York.

Levi, E., 1987. *Elementos de Mecánica del Medio Continuo*, Ed. Limusa, México.

Lindberg, R.D., and Runnells, D.D., 1984. *Ground water redox reactions: An analysis of equilibrium state applied to Eh measurements and geochemical modeling*. *Science* 225, pp 925-927.

Lindstrom, F.T., Boersma, L., and Stockard, D., 1971, *A theory on the mass transport of previously distributed chemicals in a water saturated sorbing porous medium*, *Soil Sci.* 112, 291-300.

Mazari-Hiriart Marisa y Mackay M. Douglas, 1993. *Contaminación Potencial de Agua Subterránea por Compuestos Orgánicos en la Ciudad de México*. IX Congreso Nacional. I Congreso Internacional de AIDIS de Norteamérica y del Caribe, México, D.F.

Mazari-Hiriart Marisa, Saval Susana, Iturbe Rosario y Noyola Adalberto, 1996. *Caracterización de Sitios de Canal en la Zona Industrial de la Subcuenca de Chalco*. X Congreso Nacional de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Sociedad Mexicana de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, A.C. Toluca, Estado de México.

Mackay, D.M. and Cherry, J.A., 1989. *Limitations of pump and treat remediation*. Env.Sci. Technol., 23(6): 630-637.

Mercado, A., 1967. *The spreading pattern of injected water in a permeable stratified aquifer*. In Symposium of Haifa, Artificial Recharge and Management of Aquifers. IASH Publication 72, International Association of Scientific Hydrology, Gentbrugge, Belgium: pp 23-36.

Mercer, J.W., Skipp, D.C. and Giffin, D., 1990. *Basics of Pump and Treat Ground Water Remediation Technology*, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, USA, EPA, Washington, D.C.

McDonald, J.M. and Harbaugh, A.W., 1988. *A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model*., U.S. Geological Survey National Center, Reston Virginia.

Mohsen, M., Roger, L. y Bryan, M., 1987. *Distribution coefficient of trichloroethylene in soil-water system*., Ground Water, V.25, No. 3, pp 275-281.

Morel, F.M., 1983., *Principles of Aquatic Chemistry*. Wiley, New York, pp. 446.

Neuman, S.P., 1981. *A Eulerian-Lagrangian Numerical Scheme for the Dispersion-Convection Equation using conjugate space-time grids*. J. of computational Physics, V.41, p.270-294.

Neuman, S.P., 1984. *Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion*. J. Numerical Methods in Engineering, V.20, p.321-337.

NOM-127-SSA1-1994. Normas Oficiales Mexicanas. Agua para uso y consumo humano, Subsecretaría de Regulación y Fomento Sanitario. Dirección General de Salud Ambiental.

Pankow, J.F. Johnson, R.L. and Cherry, J.A., 1992. *Air aparging in gate wells within cutoff walls and in trenches for the control of plumes of volatile organic pompounds (VOC's)*. Ground Water V.31 No.4, pp 654-663.

Pankow J. F. and Cherry J. A., 1996. *Dense Chlorinated Solvents and Other DNAPLs in Groundwater*. Waterloo Press, Ontario Canadá.

Pollock, D.W., 1988. *Semianalytical computation of path lines for finite-difference models*. Ground Water, 26(6), p. 743-750.

Pye, V.I. and Kelley, J., 1984. "*The Extent of Groundwater Contamination in the United States*", in Groundwater Contamination, National Academy Press, Washington, D.C.

Ramos A. y Rodriguez, R., 1997. *Unidad Teórica* (inédito), Posgrado en Ciencias de la Tierra, Instituto de Geofísica, UNAM, pp 8., México D.F.

Robertson, W.D.and Cherry, J.A., 1993. *In situ denitrification of septic system NO₃⁻ using reactive porous barriers: Field trials*. Ground Water. (in submittal).

Runnells, D.D., 1976. *Wastewaters in the vadose zone of arid regions: Geochemical Interactions*. Ground Water 14(6), 374-385.

Russell, T.F. and Wheeler. M.F., 1983. *Finite element and finite difference methods for continuous flows in porous media*. SIAM The Mathematics of Reservoir Simulation. R.E. Ewing (ed), Chapter II., pp 35-106.

Schwartz, F.W., 1977. *Macroscopic dispersion in porous media: the controlling factors*. Water Resour. Res., Vol. 13, No. 4, pp 743-752.

Schwille, F., 1988. *Dense Chlorinated Solvents in Porous and Fractured Media -Model Experiments-*. Translated by J.F. Pankow, Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan.

Semprini, L., Roberts, P., Hopkins, G. and McCarty, P.L., 1989. *Field studies and model simulations of halogenated aliphatic decomposition by methanotrophic bacteria*. Proceedings of the International Symposium on Processes Governing the Movement and Fate of Contaminants in the Subsurface Environment. Stanford University.

Shamir, U.Y., and Harleman, D.R.F., 1967. *Numerical solutions for dispersion in porous mediums*. Water Resour. Res., Vol. 3, No. 2, pp 557-581

Shields, M.S. and Reagin, M.J., 1992. *Selection of Pseudomonas cepacia strain constitutive for the degradation of trichloroethylene*. Appl. Environ. Microbiol. V.58, pp 3977-3983.

Skibitzke, H.E., and Robinson, G.M., 1963. *Dispersion in Ground Water flowing through Heterogeneous Materials*. U.S. Geological Survey Professional Paper 386-B.

Smedes, H.W., Spycher, N. and Allen, R.L., 1993. *Case history of one of the few successful Superfund remediation sites: a site at Salinas, California, USA*. Engineering Geology 34: 189-203.

Thomas J.M., Lee, M.D., Bedient, P.B., Borden, R.C. Carter L.W. and Ward, C.H., 1987. *"Leaking Underground Storage Tanks: Remediation with Emphasis In Situ Bioremediation"*, NCGWR, Robert S. Korr, Environmental Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Ada, OK., EPA.

U.S. Environmental Protection Agency, 1977 *"Waste Disposal Practices and Their Environmental Effects on Ground Water"* Report to Congress, Washington, D.C.

U.S. Environmental Protection Agency, 1986. *"RCRA Ground-Water Monitoring Technical Enforcement Guidance Document"*, Washington D.C.

U.S. Environmental Protection Agency (EPA), 1989. *Evaluation of Ground-Water Extraction Remedies*, Vol. 2: Case Studies. EPA /540/2-89/054b. Washington D.C. EPA.

U.S. Environmental Protection Agency, 1992. *Dense nonaqueous phase liquids: A workshop summary*. Dallas, Texas, April 16-18.

Van Genuchten, M. Th., 1974, *Mass transfer studies of sorbing porous medium*, Water Resour. Res. 16 239-240.

Verschuieren, Karel., 1983. *Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals*. New York: Van Nostrand Reinhold.

Vichnevetsky, R. and Shieh, Y. S., 1975. "Error Waves in Finite Element and Finite Difference Methods for Hyperbolic Equations", in *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*, ed. R. Vichnevetsky, AICA Bethlehem, Penn.

Voss, C.I., 1984. SUTRA: *A Finite Element Simulation Model for Saturated-Unsaturated, Fluid-Density-Dependent Ground Water Flow with Energy Transport or Chemical Reactive Single-Species Solute Transport*. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 84-4369.

Xu, Y. and Schwartz, F. W., 1992. *Immobilization of lead in groundwater with a reactive barrier system*. Subsurface Restoration Conference, Third International Conference on Groundwater Quality Research, Dallas, TX, Jun 21-24.

Yeh, G.T. 1990 *A Lagrangian-Eulerian method with zoomable hidden fine-mesh approach to solving advection-dispersion equation*, Water Resources Research V. 26, No.6, pp 1133-1144

Zheng, C., 1988. *New solution and model for evaluation of groundwater pollution control*. Ph.D.Dissertation, Univ. of Wisc.-Madison, 149 pp.

Zheng, C., 1990. MT3D: A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems. Report to the U.S. Environmental Protection Agency, Ada, OK, 170 pp.

Zheng, C., 1992. MT3D version 1.8 Documentation and User's Guide. S.S. Papadopoulos&Associates, Inc., Bethesda, MD.

Zheng C., G.D. Bennett, and C.B. Andrews, 1992. *Reply to the preceding discussion by Robert D. McCaleb of "Analysis of Ground-Water Remedial Alternatives at a Superfound Site."* Ground Water 30(3): 440-442.

Zheng C., 1993, *Extension of the method of characteristics for simulation of solute transport in three dimensions*, Ground Water, V.31, p 456-465

Zheng C. and Beennett, G.D., 1995. *Applied Contaminant Transport Modeling, Theory and Practice*, S.S. Papadopulos & Associates, Inc., Bethesda, Maryland.

APÉNDICE I

Teorema Consideremos una región $\Omega(t)$, dividida en dos subregiones $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$ por una superficie Σ . Supongamos que una función f y su derivada son continuas separadamente en $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$ pero no a través de Σ , demostrar que si

$$I(t) = \int_{\Omega(t)} f \, d\mathbf{x} \quad (\text{A1.1})$$

entonces

$$I'(t) = \frac{dI}{dt} = \int_{\Omega} f_t \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} f \, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} [f] \, \mathbf{v}_{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\mathbf{x} \quad (\text{A1.2})$$

DEMOSTRACION

En primer lugar, cuando f y su derivada son continuas en una región Ω se cumple la siguiente relación

$$I'(t) = \frac{dI}{dt} = \int_{\Omega} f_t \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} f \, \mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n} \, d\mathbf{x} \quad (\text{A1.3})$$

donde f_t es la derivada parcial de f con respecto al tiempo

$\partial\Omega$ es la frontera de Ω

\mathbf{v}_{Γ} es la velocidad con que se mueven los puntos de la frontera de Ω

Para obtener (A1.2) haremos una aplicación sucesiva de la relación (A1.3) en las regiones en donde f y su derivada son continuas. Para ello utilizaremos la siguiente notación.

$$\left. \begin{aligned} \Omega &= \Omega_+ \cup \Omega_- \\ \partial_+ \Omega &= \partial \Omega \cap \partial \Omega_+ \\ \partial_- \Omega &= \partial \Omega \cap \partial \Omega_- \\ \partial \Omega_+ &= \partial_+ \Omega \cup \Sigma \\ \partial \Omega_- &= \partial_- \Omega \cup \Sigma \\ \partial \Omega &= \partial_+ \Omega \cup \partial_- \Omega \end{aligned} \right\} \quad (A1.4)$$

Primero definimos las integrales en cada una de las subregiones $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$

$$I_+ = \int_{\Omega_+} f \, d\underline{x} \quad (A1.5)$$

$$I_- = \int_{\Omega_-} f \, d\underline{x} \quad (A1.6)$$

Ahora aplicando la ecuación (A1.3) separadamente a (A1.5) y (A1.6) se obtiene

$$I'_+(t) = \int_{\Omega_+} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial \Omega_+} f \, \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (A1.7)$$

$$I'_-(t) = \int_{\Omega_-} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial \Omega_-} f \, \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (A1.8)$$

Haciendo uso de las expresiones (A1.4), las relaciones (A1.7) y (A1.8) se pueden expresar de la siguiente manera.

$$I'_+(t) = \int_{\Omega_+} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial_+ \Omega} f \, \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} f_+ \, \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (A1.9)$$

$$I'_-(t) = \int_{\Omega_-} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial_- \Omega} f \, \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} f_- \, \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (A1.10)$$

donde \underline{v}_Γ es la velocidad de los puntos sobre las superficies $\partial_+\Omega$ y $\partial_-\Omega$
 \underline{v}_Σ es la velocidad de los puntos sobre la superficie Σ

y además se tiene que

$$f_+ = \lim_{\underline{x} \rightarrow \underline{x}_\Sigma} f(\underline{x}, t) \quad \forall \underline{x}_\Sigma \in \Sigma \quad \forall \underline{x} \in \Omega_+ \quad (\text{A1.11})$$

$$f_- = \lim_{\underline{x} \rightarrow \underline{x}_\Sigma} f(\underline{x}, t) \quad \forall \underline{x}_\Sigma \in \Sigma \quad \forall \underline{x} \in \Omega_- \quad (\text{A1.12})$$

El signo (-) en (A1.9) se debe a que el vector normal \underline{n} en $\partial\Omega_+$ tiene la dirección opuesta en $\partial\Omega_-$, esto es, \underline{n} apunta hacia afuera en $\partial\Omega_-$ sobre la superficie Σ , y el mismo vector tiene una dirección hacia adentro en $\partial\Omega_+$ sobre la superficie Σ .

Sumando las ecuaciones (A1.9) y (A1.10) se obtiene

$$\dot{I}(t) = \dot{I}_+(t) + \dot{I}_-(t) = \int_{\Omega_+ \cup \Omega_-} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial\Omega_+ \cup \partial\Omega_-} f \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} (f_+ - f_-) \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A1.13})$$

La relación anterior se puede escribir como

$$\dot{I}(t) = \dot{I}_+(t) + \dot{I}_-(t) = \int_{\Omega} f_t \, d\underline{x} + \int_{\partial\Omega} f \underline{v}_\Gamma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [f] \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A1.14})$$

donde $[f] = f_+ - f_-$ corresponde al salto de la función f a través de la superficie Σ .

Esta última relación es igual a la ecuación (A1.2), en virtud de lo cual la demostración queda completa.

APÉNDICE II

Teorema Consideremos una función vectorial \underline{U} definida en una región Ω con las siguientes características. \underline{U} es continua en toda la región Ω excepto sobre una superficie Σ a través de la cual \underline{U} tiene una discontinuidad de salto. Demostrar que el Teorema de la Divergencia para el caso de funciones con discontinuidades de salto está dado por la siguiente expresión

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} [\underline{U}] \cdot \underline{n} \, d\mathbf{x} \quad (\text{A2.1})$$

DEMOSTRACION

Consideremos que \underline{U} es una función continua definida en una región Ω . El teorema de la divergencia establece que

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\mathbf{x} \quad (\text{A2.2})$$

donde $\partial\Omega$ es la frontera de la región Ω

En el caso que nos ocupa, \underline{U} es continua en todo Ω excepto en una superficie Σ a través de la cual \underline{U} tiene una discontinuidad de salto. Consideremos que la superficie Σ divide a la región Ω en dos subregiones Ω_+ y Ω_- . Como \underline{U} es continua separadamente en Ω_+ y Ω_- , podemos aplicar la relación (A2.2) sin ningún problema, para ello haremos las siguientes consideraciones.

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_+ \cup \Omega_- \\ \partial_+ \Omega &= \partial\Omega \cap \partial\Omega_+ \\ \partial_- \Omega &= \partial\Omega \cap \partial\Omega_- \\ \partial\Omega_+ &= \partial_+ \Omega \cup \Sigma \\ \partial\Omega_- &= \partial_- \Omega \cup \Sigma \\ \partial\Omega &= \partial_+ \Omega \cup \partial_- \Omega \end{aligned} \quad (\text{A2.3})$$

Ahora aplicamos la relación (A2.2) separadamente en Ω_+ y Ω_- con lo que obtenemos

$$\int_{\Omega_+} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega_+} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.4})$$

$$\int_{\Omega_-} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega_-} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.5})$$

Si ahora hacemos uso de las relaciones (A2.3), las ecuaciones (A2.4) y (A2.5) se pueden expresar como

$$\int_{\Omega_+} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial_+ \Omega \cup \Sigma} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} = \int_{\partial_+ \Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} \underline{U}_+ \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.6})$$

$$\int_{\Omega_-} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial_- \Omega \cup \Sigma} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} = \int_{\partial_- \Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} \underline{U}_- \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.7})$$

$$\text{donde} \quad \underline{U}_+ = \lim_{\underline{x} \rightarrow \underline{x}_\Sigma} \underline{U} \quad \forall \underline{x}_\Sigma \in \Sigma \text{ y } \forall \underline{x} \in \Omega_+ \quad (\text{A2.8})$$

$$\underline{U}_- = \lim_{\underline{x} \rightarrow \underline{x}_\Sigma} \underline{U} \quad \forall \underline{x}_\Sigma \in \Sigma \text{ y } \forall \underline{x} \in \Omega_- \quad (\text{A2.9})$$

Sumando las ecuaciones (A2.6) y (A2.7) obtenemos lo siguiente

$$\int_{\Omega_+ \cup \Omega_-} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial_+ \Omega \cup \partial_- \Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} (\underline{U}_+ - \underline{U}_-) \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.10})$$

Si volvemos a usar las relaciones (A2.3), la ecuación (A2.10) queda finalmente como

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\underline{U}] \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (\text{A2.11})$$

donde $[\underline{U}] = (\underline{U}_+ - \underline{U}_-)$ corresponde al salto de la función a través de la superficie de discontinuidad Σ .

La relación (A2.11) es la igualdad que se deseaba encontrar.