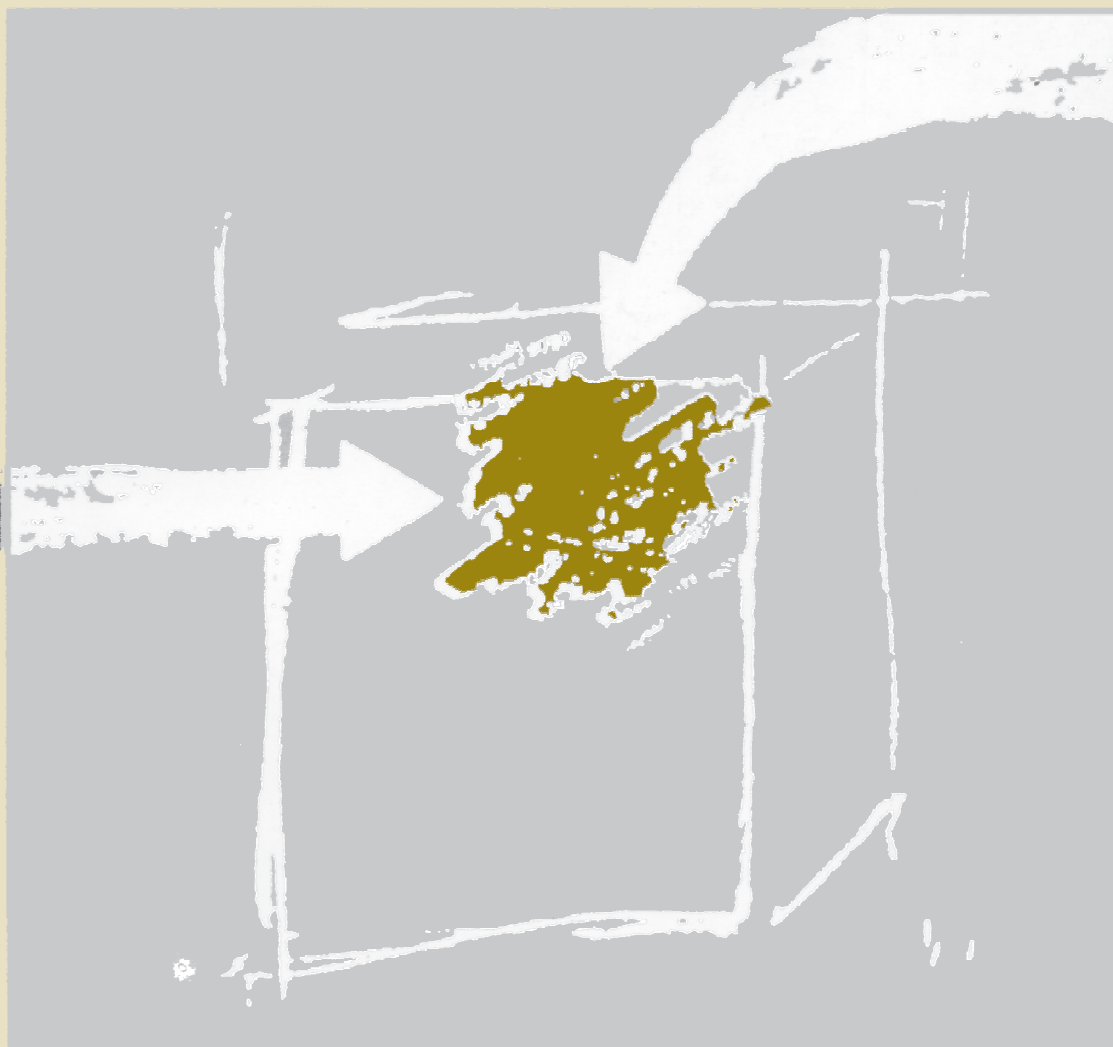


# ANÁLISIS DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN MEDIOS POROSOS. SOLUCIONES ANALÍTICAS



MIGUEL GARCÍA-GUTIÉRREZ  
TIZIANA MISSANA



GOBIERNO  
DE ESPAÑA

MINISTERIO  
DE CIENCIA, INNOVACIÓN  
Y UNIVERSIDADES

**Ciemat**

Centro de Investigaciones  
Energéticas, Medioambientales  
y Tecnológicas



# **ANÁLISIS DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN MEDIOS POROSOS. SOLUCIONES ANALÍTICAS**

**MIGUEL GARCÍA-GUTIÉRREZ**

**TIZIANA MISSANA**

Es propiedad:

EDITORIAL CIEMAT  
Avda. Complutense, 40  
28040-MADRID  
2018

Catálogo general de publicaciones oficiales  
<http://www.060.es>

Depósito Legal: M-41774-2018  
ISBN: 978-84-7834-811-4  
NIPO: 058-18-041-7

El CIEMAT no comparte necesariamente las opiniones y los juicios expuestos en este documento, cuya responsabilidad corresponde únicamente a los autores.

Publicación incluida en el programa editorial del suprimido Ministerio de Economía, Industria y Competitividad y editada por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (de acuerdo con la reestructuración ministerial establecida por Real Decreto 355/2018, de 6 de junio

# **Análisis del transporte de contaminantes en medios porosos. Soluciones analíticas.**

M. García-Gutiérrez, T. Missana



Fisicoquímica de Actínidos y Productos de Fisión

---



# ÍNDICE

1	Introducción .....	1
2	Flujo en medios porosos. Ley de Darcy.....	3
3	Advección .....	5
4	Dispersión.....	7
5	Difusión .....	9
6	Reacciones químicas .....	10
6.1	Sorción en equilibrio.....	10
6.2	Sorción en no equilibrio.....	12
6.3	Desintegración radiactiva y biodegradación .....	13
7	Ecuación del Transporte de Contaminantes .....	14
7.1	Condiciones iniciales y de contorno .....	17
7.1.1	Condiciones Iniciales .....	18
7.1.2	Condiciones de Contorno.....	18
7.2	Función de error .....	20
7.3	Principio de superposición. ....	21
8	Soluciones analíticas. Transporte 1-D. ....	23
8.1	Inyección continua de contaminante. ....	23
8.1.1	Condición de contorno de Tipo 1 o Dirichlet. ....	23
8.1.2	Condición de contorno de Tipo 2 o Newman. ....	35
8.1.3	Condición de contorno de Tipo 3 o Cauchy. ....	36
8.2	Inyección instantánea de contaminante. Pulso de contaminante.....	39
8.2.1	Contaminante conservativo .....	40
8.2.2	Contaminante con sorción .....	42

8.2.3	Contaminante radiactivo.....	43
8.2.4	Contaminante con sorción y radiactivo .....	44
9	Soluciones analíticas. Transporte 2-D. ....	50
9.1	Inyección puntual continua en un acuífero 2D con flujo uniforme .....	50
9.2	Inyección puntual instantánea de contaminante. Pulso de contaminante. ....	52
9.3	Inyección lineal continua. Condición de contorno de Tipo 1. ....	55
10	Soluciones analíticas. Transporte 3-D. ....	58
10.1	Fuentes continuas de contaminante. Fuente plana finita. ....	58
10.1.1	Dominio (a).....	59
10.1.2	Dominio (b).....	61
10.1.3	Dominio (c).....	63
10.2	Fuente puntual instantánea. Pulso de contaminante. ....	69
11	Referencias.....	73



## 1 INTRODUCCIÓN

El agua subterránea es un recurso muy importante en la mayoría del mundo. Analizar las posibles fuentes de contaminación y los procesos de transporte de los contaminantes en los sistemas acuíferos, en general medios porosos, resulta muy útil para intentar corregir o evitar la destrucción de este recurso.

Cuando un contaminante entra en el agua subterránea, normalmente en disolución, se pueden producir dos situaciones; que no exista interacción del contaminante con el medio geológico, es decir, que se trate de un soluto conservativo que se moverá por advección y estará afectado por la dispersión y difusión; o que exista interacción, como adsorción, precipitación/disolución, reacciones químicas, etc. en este caso se trata de solutos reactivos y será necesario incluir también estos procesos en el estudio de su transporte.

Hay tres aspectos muy importantes en las fuentes de contaminación: su tipo, por ejemplo que sea puntual o continuo; su historia o cómo cambia la producción del contaminante con el tiempo; y el tipo de contaminante, que determinará la importancia de la contaminación. Una fuente puntual es pequeña, puede ser un depósito o una laguna con un contaminante claramente identificable. Una fuente no puntual o difusa, se presenta sobre grandes extensiones de terreno. Un derrame es un ejemplo de una fuente no continua, mientras que un estanque o una balsa pueden verter, por ejemplo a través de fisuras, de una forma continua. Los contaminantes más numerosos son los orgánicos, pero son también muy importantes los inorgánicos, como metales pesados o elementos radiactivos. También hay que considerar los nutrientes y los contaminantes de origen microbiológico. La Figura 1 presenta un esquema de diferentes situaciones en las que se puede producir la contaminación de un acuífero.

Para estudiar el transporte de contaminantes en un medio poroso saturado hay que conocer cómo se mueve el agua en ese medio. Hay que entender la ley de Darcy que explica el flujo en los medios porosos, hay que saber qué es el gradiente hidráulico y conocer los procesos de advección, dispersión y difusión que nos definirán la ecuación de transporte de solutos. La primera parte de este documento contiene esta información.

La ecuación del transporte de contaminantes es una ecuación diferencial, que puede resolverse mediante métodos analíticos o numéricos. Las soluciones analíticas son soluciones exactas, aunque se basan en condiciones de contorno que hay que valorar en un contexto realista, mientras que las numéricas son soluciones aproximadas. En éste documento únicamente se van a considerar las soluciones analíticas.



Figura 1. Usos del suelo que normalmente general amenazas de contaminación del agua subterránea. ([http://www.eurosur.org/medio\\_ambiente/bif74.htm](http://www.eurosur.org/medio_ambiente/bif74.htm); Rodríguez Olivares, 2009)

Los métodos analíticos requieren imponer condiciones iniciales y de contorno para resolver la ecuación diferencial. Por ello, las soluciones analíticas están limitadas a sistemas con geometrías regulares, con propiedades uniformes u homogéneas del material y generalmente requieren que el problema sea lineal. Las soluciones analíticas se presentan en forma de expresiones algebraicas y se aplican extensamente en los estudios del transporte de contaminantes en aguas subterráneas y en el análisis de ensayos de laboratorio. También se utilizan para comprobar la validez de los métodos numéricos, muy útiles a la hora de estudiar el transporte de contaminantes a través de acuíferos en situaciones ambientales reales.

A lo largo del documento se explicará la ley de Darcy, así como los conceptos de advección, dispersión y difusión, y se consideraran también la adsorción y la desintegración radiactiva. Todos ellos son términos que conforman la ecuación de transporte de los contaminantes. Se presentaran soluciones analíticas a la ecuación de transporte de solutos para diferentes configuraciones.

Existen muchas fuentes disponibles para encontrar soluciones analíticas a la ecuación de transporte, pero la mayoría se presentan como un tratado matemático sin ejemplos de aplicación a casos reales. Aquí trataremos de presentar las soluciones y su aplicación a situaciones reales, principalmente en estudios de laboratorio, donde presentan mayor utilidad.

El lector interesado podrá encontrar muchas más soluciones analíticas en los trabajos de van Genuchten y Alves (1982), Javandel et al., (1984), Wexler (1992) y Aral (2001). También existen aplicaciones web donde se pueden analizar distintas soluciones analíticas, como la que mantiene la Universidad de Illinois (Valocchi y Werth, 2004) "Interactive models for Groundwater Flow and Solute Transport" ([http://hydrolab.illinois.edu/gw\\_applets](http://hydrolab.illinois.edu/gw_applets)) o programas públicos como STANMOD (STudio of ANalytical MODels) del Departamento de Agricultura de los Estados Unidos, U.S. Salinity Laboratory, <https://www.ars.usda.gov> con los que el lector podrá estudiar la influencia de cada uno de los parámetros en el transporte de solutos. Este documento contiene un gran número de ejemplos para facilitar la comprensión y uso de muchas de las soluciones presentadas.

## 2 FLUJO EN MEDIOS POROSOS. LEY DE DARCY

El flujo de agua en los medios porosos se basa en la ley de Darcy, que se puede explicar experimentalmente utilizando un permeámetro, Figura 2. Un permeámetro es un tubo de sección constante por el que se hace circular agua conectando a uno de sus extremos un depósito elevado de nivel constante. En el otro extremo se regula el caudal de salida mediante un grifo de forma que también sea constante. En dos puntos del depósito se conectan dos tubos para medir la altura de la columna de agua entre ellos (Sánchez San Román, 2017).

Darcy demostró que el caudal que le atraviesa es linealmente proporcional a la sección del mismo y al gradiente hidráulico.

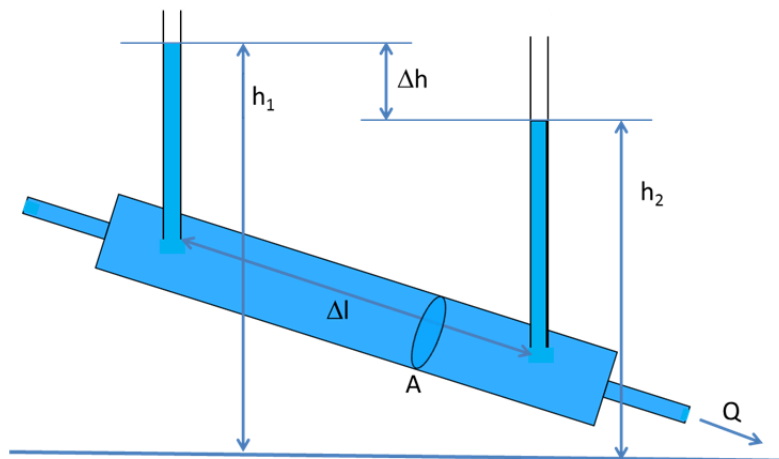


Figura 2. Esquema de un permeámetro para definir la ley de Darcy.

El agua fluye en el tubo con un caudal conocido  $Q$  ( $L^3/T$ ) y la elevación del nivel de agua en los manómetros  $h_1$  y  $h_2$  (L) separados una distancia  $\Delta l$  (L) se mide en relación a un plano de referencia local. Darcy realizó una serie de experimentos en los cuales cambió el caudal  $Q$  o el tipo de medio (filtros de arena), y derivó la siguiente relación, conocida como ley de Darcy:

$$q = \frac{Q}{A} = K \frac{(h_1 - h_2)}{\Delta l} \quad (2.1)$$

donde  $K$  (L/T) es una constante de proporcionalidad llamada conductividad hidráulica y el término  $(h_1 - h_2)/\Delta l$  es el gradiente hidráulico. El término  $Q/A$  es el flujo volumétrico por sección de área del cilindro  $A$  ( $L^2$ ), y representa la velocidad de Darcy ( $q$ ) o descarga específica. Es decir, la velocidad de flujo es proporcional al gradiente hidráulico. Si denominamos  $i$  al gradiente hidráulico, entonces tenemos:

$$i = \frac{(h_1 - h_2)}{\Delta l} = -\frac{dh}{dl} \quad (2.2)$$

$$q = K \cdot i \quad (2.3)$$

$$Q = K \cdot i \cdot A$$

La velocidad de Darcy asume que el flujo se produce a través de toda la sección del tubo, pero este sólo fluye a través de los poros. La velocidad en los poros, o velocidad lineal promedio,  $v$ , se define como:

$$v = \frac{q}{n_e} \quad (2.4)$$

donde  $n_e$  es la porosidad efectiva. La velocidad lineal promedio es la verdadera velocidad del agua en un medio poroso.

Cuando un sistema de flujo no varía con el tiempo se dice que está en régimen permanente, estacionario o en equilibrio. Cuando el flujo varía con el tiempo, estamos en régimen no permanente, transitorio o variable.

Existen limitaciones a la Ley de Darcy puesto que la constante de proporcionalidad  $K$  no es propia y característica del medio poroso, sino que también depende del fluido (en concreto de su peso específico y viscosidad dinámica). En algunas circunstancias la relación entre el caudal y el gradiente hidráulico no es lineal. Esto puede suceder cuando el valor de  $K$  es muy bajo o cuando las velocidades del flujo son muy altas. El número de Reynolds define la validez de la Ley de Darcy. Valores altos indican régimen turbulento y valores bajos régimen laminar. El número de Reynolds se define por:

$$R_e = \frac{\rho \cdot v \cdot d_m}{\mu} = \frac{v \cdot d_m}{\nu} \quad (2.5)$$

donde  $\rho$  es la densidad del fluido [ $M/L^3$ ],  $v$  es la velocidad de flujo [ $L/T$ ],  $d_m$  es el diámetro medio de los granos [ $L$ ],  $\mu$  es la viscosidad dinámica del fluido [ $M/T \cdot L$ ] y  $\nu$  la viscosidad cinemática del fluido [ $L^2/T$ ]. En general podemos decir que la ley de Darcy es válida para un número de Reynolds entre 1 y 10. En el flujo subterráneo las velocidades son lentas y prácticamente siempre la relación es lineal.

### 3 ADVECCIÓN

El término advección describe el transporte de un soluto asociado al movimiento del agua, debido al gradiente hidráulico. Si sólo existiese este proceso, el contaminante viajaría a la misma velocidad que el agua y la extensión ocupada por el contaminante sería constante. Es lo que se denomina frente abrupto o flujo pistón. La Figura 3 muestra un esquema del movimiento de un soluto si únicamente existiese el proceso de advección.

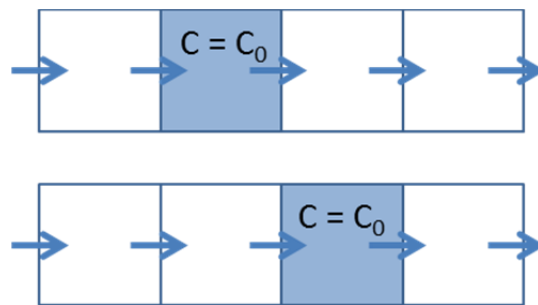


Figura 3. Transporte de un contaminante por advección.  
(Adaptado de Widdowson, 1999)

La cantidad de soluto que está siendo transportado es una función de su concentración en el agua subterránea y de la cantidad de agua subterránea que fluye. Para un flujo perpendicular a una sección transversal del medio poroso, la cantidad de agua que fluye es igual a la velocidad promedio lineal multiplicada por la porosidad efectiva. La velocidad promedio lineal,  $v$ , es la velocidad a la cual el agua subterránea se mueve a través del medio.

$$v = \frac{K \Delta h}{n_e \Delta l} \quad (3.1)$$

En un medio poroso, el flujo de masa debido a la advección,  $J$ , a través de una sección unidad perpendicular al flujo, es igual a la cantidad de agua que fluye multiplicada por la concentración de sólidos disueltos:

$$J = v \cdot n_e \cdot C \quad (3.2)$$

En la mayoría de los problemas de transporte de contaminantes, a escala de campo, el término de advección domina a los otros términos. La difusión es relevante únicamente cuando la velocidad de flujo es muy baja. Para medir este grado de dominio se usa el número adimensional de Peclet, definido por:

$$P_e = \frac{v \cdot L}{D} \quad (3.3)$$

donde:

$v$  = velocidad del agua, [ $LT^{-1}$ ]

$L$  = longitud de la columna, [L]

$D$  = coeficiente de dispersión, [ $L^2T^{-1}$ ]

En problemas dominados por la advección, el número de Peclet alcanza valores altos, de forma que si el problema es de advección pura tiende a infinito.

### EJEMPLO

Calcular el flujo de masa por advección de una sustancia conservativa con una concentración de 0,5 g/L, contenida en un medio poroso con una conductividad hidráulica  $K = 12$  m/día, porosidad eficaz  $n_e = 0,25$  y gradiente hidráulico de 0,05.

### Solución:

Calculamos la velocidad de Darcy:

$$q = K \frac{(h_1 - h_2)}{\Delta l} = 12 \frac{m}{día} \cdot 0,05 = 0,6 \frac{m}{día}$$

y la velocidad lineal media es:

$$v = \frac{q}{n_e} = \frac{0,6}{0,25} = 2,4 \text{ m/día}$$

y por tanto el flujo másico será:

$$J = v \cdot n_e \cdot C = 2,4 \frac{m}{día} \cdot 0,25 \cdot 500 \frac{g}{m^3} = 300 \frac{g}{m^2 \cdot día}$$

flujo de masa por  $m^2$  de sección.

## 4 DISPERSIÓN

La **dispersión mecánica** es el resultado de desviaciones microscópicas en la velocidad del agua provocada por el movimiento del fluido a través del medio poroso. Es decir, el agua subterránea se mueve a velocidades que son mayores y también menores que la velocidad promedio lineal. Existen tres causas básicas para este fenómeno: el distinto tamaño de los poros, la diferente longitud de recorrido y la fricción en los poros. La dispersión mecánica produce una dilución del contaminante a lo largo del frente de avance. Esta dispersión se produce a lo largo del sentido de flujo (longitudinal) y lateralmente (transversal), por la bifurcación de los caminos. En sistemas 3D existe también una dispersión vertical.

La capacidad del medio poroso para dispersar mecánicamente un fluido que circula por él se refleja en un coeficiente denominado dispersividad dinámica  $\alpha$  [L], en el que influyen la porosidad, la tortuosidad, la forma de los granos, etc. La dispersión explica que la mancha de un contaminante se expanda con su avance.

La dispersión mecánica,  $D_m$  [L<sup>2</sup>/T] es igual al producto del coeficiente de dispersividad por la velocidad lineal media:

$$D_m = \alpha \cdot v \quad (4.1)$$

La Figura 4 esquematiza el resultado de la dispersión mecánica. Se distingue un coeficiente de dispersividad longitudinal  $\alpha_L$  y otro transversal  $\alpha_T$ :

$$D_{mL} = \alpha_L \cdot v \quad (4.2)$$

$$D_{mT} = \alpha_T \cdot v$$

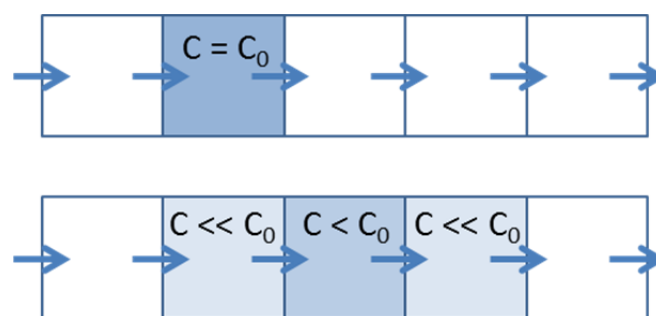


Figura 4. Transporte de un contaminante por dispersión.  
(Adaptado de Widdowson, 1999)

Se conoce como **dispersión hidrodinámica** en un medio poroso a la extensión del contaminante en una región grande causada por la dispersión mecánica y por la difusión. Estos dos procesos no se pueden separar en un flujo de agua subterránea.

La dispersión hidrodinámica se desglosa en longitudinal,  $D_L$  paralela a la dirección del flujo, y transversal,  $D_T$  perpendicular a la dirección de flujo:

$$D_L = \alpha_L \cdot v + D^* \quad (4.3)$$

$$D_T = \alpha_T \cdot v + D^*$$

donde  $D^*$  [ $L^2/T$ ] es el coeficiente de difusión efectivo. Generalmente la difusión molecular es secundaria o despreciable, comparada con la dispersión mecánica, siendo únicamente importante cuando la velocidad del agua es muy baja.

En la mayoría de los casos, la dispersión mecánica es el mecanismo dominante en la dispersión hidrodinámica ( $P_e > 6$ ), únicamente a velocidades extremadamente bajas ( $P_e < 4$ ) la difusión molecular es importante (Anderson, 2008).

Si el contaminante entra en el flujo subterráneo de forma continua, el resultado es una mancha alargada en el sentido del flujo que se denomina pluma de contaminación.

La Figura 5 muestra un esquema del efecto de la dispersión en sistemas 1D, 2D y 3D.

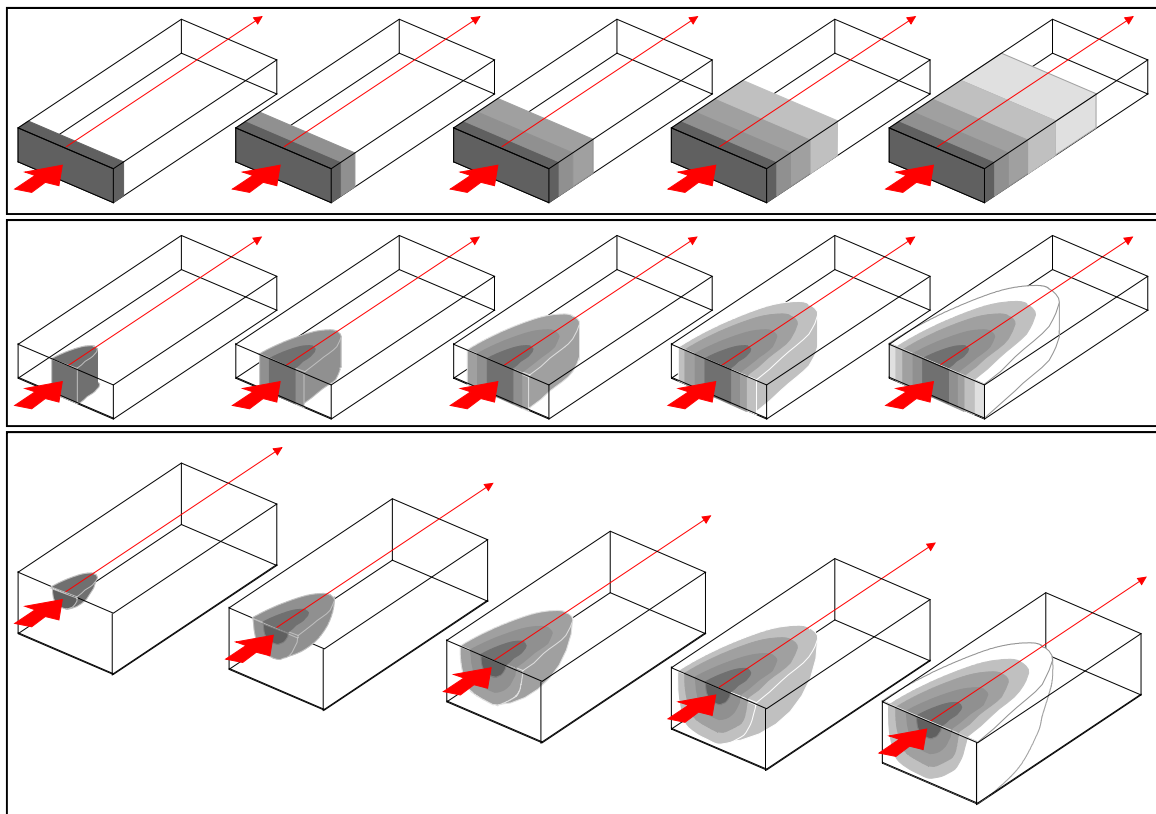


Figura 5. Efecto de la dispersión en sistemas 1D, 2D y 3D.  
(L-C. Chuang, 1998).



## 5 DIFUSIÓN

La difusión es el proceso por el cual, partículas de tamaño atómico o molecular se mueven desde regiones de alta concentración hacia regiones de baja concentración debido a un gradiente químico. El transporte de masa se debe al movimiento browniano de átomos y moléculas. La masa o flujo de partículas,  $J_x$  [M/L<sup>2</sup>T] por unidad de área de sección, es directamente proporcional al gradiente de concentración, que para un sistema unidimensional se expresa como:

$$J_x = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.1)$$

La ecuación (5.1) es conocida como la 1ª ley de Fick. El coeficiente de difusión  $D$  [L<sup>2</sup>/T] mide la rapidez con que átomos y moléculas se difunden, y es la constante de proporcionalidad entre el gradiente de concentración y el flujo;  $C$ , es la concentración de soluto en el agua de los poros [M/L<sup>3</sup>], bajo condiciones de saturación, que depende del tiempo  $t$  y la distancia  $x$ .

Esta ecuación recuerda a la ley de Darcy, allí el caudal por unidad de superficie era proporcional al gradiente hidráulico y la constante de proporcionalidad era la conductividad hidráulica. Aquí el flujo de masa es proporcional al gradiente de concentraciones y la constante de proporcionalidad es el coeficiente de difusión. Igualmente, el signo negativo indica que el sentido del flujo es hacia la disminución de la concentración. Como el incremento  $dC$  es negativo, el signo menos hace que el resultado de la fórmula sea positivo.

El coeficiente de difusión molecular es el obtenido para los iones comunes en el agua libre, y oscila entre  $1 \cdot 10^{-9}$  y  $9 \cdot 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s (Li y Gregory, 1973), dependiendo del tamaño de las partículas, y por ejemplo, los compuestos orgánicos presentan valores más bajos. Si el proceso se desarrolla en un medio poroso, la facilidad de movimiento disminuye y hay que considerar las características del medio poroso, como son la tortuosidad y la constrictividad. Hablamos entonces de coeficiente de difusión efectivo. Si además, debemos incluir la sorción, tendremos el coeficiente de difusión aparente.

La 1ª ley de Fick expresa un flujo permanente mientras se mantengan constantes las variables de las que depende. Si tenemos un punto con una concentración constante de un contaminante y queremos conocer cómo va variando con el tiempo la concentración del contaminante en otro punto a  $x$  metros de distancia, aplicaremos la 2ª ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5.2)$$

La difusión es un proceso lento, por tanto sólo será dominante en aquellos medios donde sea la principal causa de movimiento del soluto, por ejemplo en las formaciones arcillosas.

## 6 REACCIONES QUÍMICAS

Se consideran como reacciones químicas la sorción y las reacciones de primer orden como la desintegración radiactiva, hidrólisis o procesos de biodegradación.

### 6.1 SORCIÓN EN EQUILIBRIO

La sorción de los contaminantes disueltos es un fenómeno complejo causado por muchos mecanismos, que incluyen fuerzas de van der Waals, de Coulomb, enlaces de hidrógeno, ligandos de intercambio o quimisorción, fuerzas dipolo-dipolo, y fuerzas hidrofóbicas. Cuando la superficie de la matriz de un sólido es menos polar que la molécula de agua, las moléculas contaminantes no-polares se reparten entre el agua y la matriz sólida del medio.

La adsorción es la retención de una sustancia en la superficie de un sólido, mientras que la absorción implica la penetración de la sustancia en el interior del sólido. El término sorción engloba a los dos anteriores, y se refiere al proceso de transferencia de masa entre el contaminante disuelto en el agua (fase líquida) y el contaminante adsorbido sobre el medio poroso (fase sólida).

Generalmente se asume que existen condiciones de equilibrio entre las concentraciones en las fases sólida y acuosa, y que la reacción de sorción es muy rápida, en relación a la velocidad del agua, como para poder ser considerada instantánea.

Se habla de quimisorción cuando el soluto se incorpora a la superficie del sólido mediante una reacción química. Por ejemplo, los minerales arcillosos presentan cargas negativas libres en superficie y los iones positivos en disolución son atraídos por ellas. Si un ion así adherido es desplazado por otro se habla de intercambio iónico.

La relación funcional entre las concentraciones adsorbida y acuosa de un elemento a temperatura constante, se denomina isoterma. Las isotermas de sorción se incorporan a la ecuación de transporte a través del factor de retardo.

La adsorción de un contaminante sobre el medio poroso se considera reversible, provoca provisionalmente su retención, incorporándose posteriormente de nuevo al flujo. Por lo tanto, se define un nuevo concepto, el factor de retardo,  $R_f$  [-], que es la relación entre la velocidad del agua,  $V_a$  [L/T] y la del contaminante,  $V_c$  [L/T].

$$R_f = \frac{V_a}{V_c} \quad (6.1)$$

Por tanto, el retardo es la reducción en la velocidad de una pluma o frente de contaminación debido a la sorción u otros mecanismos.

Aquí consideramos tres tipos de isotermas de **sorción en el equilibrio**: lineal, Freundlich y Langmuir.

- La isoterma de sorción lineal asume que la concentración adsorbida  $S$  [M/M] es directamente proporcional a la concentración acuosa  $C$  [M/L<sup>3</sup>].

$$S = K_d \cdot C \quad (6.2)$$

donde  $K_d$  es el coeficiente de distribución [ $L^3/M$ ]. El factor de retardo se relaciona con el coeficiente de distribución mediante:

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b}{n} \cdot K_d \quad (6.3)$$

donde  $n$  es la porosidad y  $\rho_b$  es la densidad aparente o densidad de una unidad de volumen comprendiendo minerales y poros.

- b. La isoterma de Freundlich es una isoterma no lineal que puede expresarse de la siguiente forma:

$$S = K_f \cdot C^N \quad (6.4)$$

donde  $K_f$  es la constante de Freundlich [ $L^3/M$ ] y  $N$  el exponente de Freundlich, adimensional.

Ambos coeficientes,  $N$  y  $K_f$ , son empíricos. Cuando el exponente  $N$  es igual a 1, la isoterma de Freundlich es equivalente a la isoterma lineal. El factor de retardo para la isoterma de Freundlich está definido como:

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b}{n} \cdot N \cdot K_f C^{N-1} \quad (6.5)$$

- c. La isoterma de Langmuir es otra isoterma no lineal, descrita por la ecuación:

$$S = \frac{K_l \cdot b \cdot C}{1 + K_l \cdot C} \quad (6.6)$$

donde  $K_l$  es la constante de Langmuir [ $L^3/M$ ], y  $b$  la concentración total de sitios de sorción disponibles [ $M/M$ ].

El factor de retardo definido para la isoterma de Langmuir es entonces:

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b}{n} \left[ \frac{K_l \cdot b}{(1 + K_l \cdot C)^2} \right] \quad (6.7)$$

La isoterma lineal y la de Freundlich presentan un inconveniente teórico, la cantidad adsorbida no tiene límite, aumenta indefinidamente al aumentar la concentración, lo que no es real, ya que cada sólido presenta un número finito de sitios de adsorción. La isoterma de Langmuir soslaya ese problema, ya que en este caso la curva tiene una asíntota superior, estabilizándose en un valor máximo.

La Figura 5 muestra la forma típica de una isoterma de adsorción lineal, de Freundlich y de Langmuir, para  $K_d = K_f = K_l = 2$  mL/g,  $N = 0.7$  y  $b = 3$ .

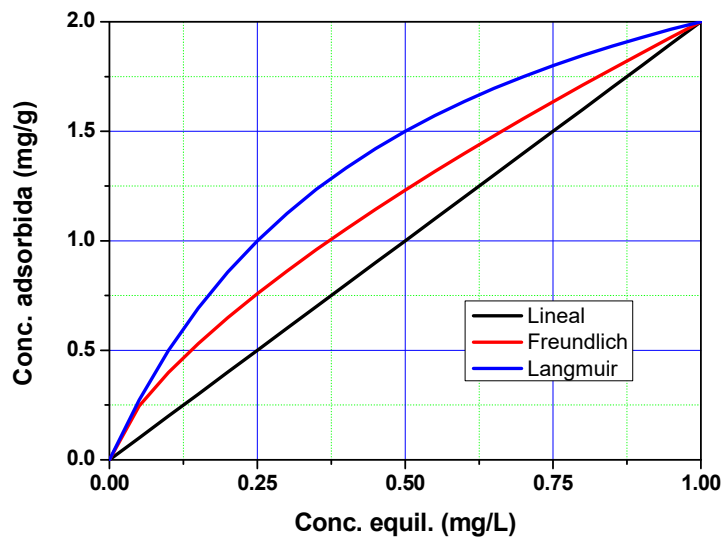


Figura 5. Isothermas de adsorción lineal, Freundlich y Langmuir.

## 6.2 SORCIÓN EN NO EQUILIBRIO

Cuando el supuesto de equilibrio local no es válido, se asume que el proceso de sorción puede representarse típicamente mediante una ecuación de transferencia de masas con una reacción cinética reversible de primer orden:

$$\rho_b \frac{\partial S}{\partial t} = \beta \left( C - \frac{S}{K_d} \right) \quad (6.8)$$

donde  $\beta [T^{-1}]$  es el factor de transferencia de masa entre las fases disueltas y adsorbidas, y  $K_d$  es el coeficiente de distribución de la sorción lineal.

La ecuación (6.8) necesita resolverse simultáneamente con la de transporte para obtener soluciones al transporte de solutos afectados por sorción en no equilibrio. Cuando el factor de transferencia  $\beta$  aumenta (es decir el proceso de sorción aumenta rápidamente) el no equilibrio se aproxima a la sorción lineal en equilibrio. Para valores muy pequeños de  $\beta$ , el intercambio entre las fases sólida y líquida es tan lento que la sorción es esencialmente despreciable.

En general se habla de no equilibrio químico para hacer la distinción entre dos tipos de sitios de adsorción: los sitios de tipo 1 donde la adsorción alcanza el equilibrio instantáneamente, y los sitios de tipo 2 donde la adsorción sigue una cinética de primer orden y por tanto es dependiente del tiempo. Y se habla de no equilibrio físico cuando la fase líquida del medio poroso puede ser dividida en una región de agua móvil y una región de agua inmóvil. El intercambio de soluto entre las dos regiones se modela como un proceso de primer orden (Toride et al., 1999).

### 6.3 DESINTEGRACIÓN RADIACTIVA Y BIODEGRADACIÓN

Un proceso químico de primer orden, como la desintegración radiactiva o la biodegradación biológica, envuelve una conversión unimolecular irreversible de soluto A en soluto B. La cantidad de reacción viene dada por:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (6.9)$$

donde k es la constante de la velocidad de reacción de primer orden. En este documento vamos a considerar únicamente la desintegración radiactiva, por lo que nos referiremos a la constante como constante de desintegración  $\lambda$  [ $T^{-1}$ ].

La constante de desintegración se define como:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \quad (6.10)$$

donde  $T_{1/2}$  es el periodo de semidesintegración, es decir el tiempo necesario para que la concentración del radioisótopo disminuya a la mitad.

Para la desintegración radiactiva, la reacción sucede en la misma forma en las dos fases. Para biodegradación, sin embargo, se ha observado que ciertas reacciones suceden únicamente en la fase disuelta, por ello se pueden necesitar dos constantes.

## 7 ECUACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

Hay dos procesos físicos que gobiernan el movimiento de solutos en el agua subterránea; la advección que describe el transporte de solutos debido al flujo de agua, y la dispersión hidrodinámica, que describe la extensión longitudinal y transversal a la dirección del flujo resultante de la mezcla de dispersión mecánica y difusión molecular. A la ecuación de advección-dispersión se le puede unir un término fuente/sumidero y un término de reacción química, que fundamentalmente es de dos tipos, la sorción (o retardo) y las reacciones irreversibles de primer orden (desintegración radiactiva, hidrólisis, y algunas formas de biodegradación).

La ecuación general del transporte de contaminantes conservativos está basada en los trabajos de Freeze y Cherry (1979), Bear (1972) y Ogata y Banks (1961), asumiendo que el medio poroso es homogéneo, isótropo, está saturado y se cumple la ley de Darcy.

La derivación de la ecuación de transporte se basa en la conservación de la masa de soluto que entra y sale de un volumen de control infinitesimal del medio poroso. En una dimensión el flujo total es la suma del flujo advectivo, del difusivo y del dispersivo:

$$J = J_A + J_D + J_M \quad (7.1)$$

Que podemos escribir como:

$$J = v \cdot n_e \cdot C - n_e \cdot D^* \frac{\partial C}{\partial x} - n_e \cdot D_M \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.2)$$

La suma del término de dispersión mecánica y del difusivo, es el término de dispersión hidrodinámica:

$$J = v \cdot n_e \cdot C - n_e \cdot D_H \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.3)$$

La ecuación (7.3) se usa para obtener una ecuación diferencial que describe el transporte de un soluto conservativo, es decir que no interacciona con el medio poroso. Así obtenemos la ecuación de advección-dispersión que gobierna el transporte de solutos a través de un medio homogéneo e isótropo en 1D:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.4)$$

donde  $C$  es la concentración del contaminante [ $M/L^3$ ],  $t$  el tiempo [ $T$ ],  $v_x$  la velocidad promedio lineal del agua subterránea [ $L/T$ ],  $x$  la distancia a lo largo de la línea de flujo [ $L$ ] y  $D_L$  el coeficiente de dispersión hidrodinámico longitudinal [ $L^2/T$ ].

La ecuación de transporte para el caso bidimensional considera un coeficiente de dispersión en la dirección del flujo longitudinal,  $D_L$ , y uno en la dirección transversal,  $D_T$ , quedando la ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.5)$$

Para el caso de flujo en tres dimensiones, existen dos coeficientes de dispersión normales a la dirección del flujo, uno en dirección horizontal  $D_{TH}$  y otro en dirección vertical,  $D_{TV}$ , y la ecuación de transporte queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{TH} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{TV} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.6)$$

En forma general podemos añadir a la ecuación un término fuente, si hay un aporte y un término sumidero si se pierde masa:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \pm Q_{fuente/sumidero} \quad (7.7)$$

El término fuente se incluye cuando hay un aporte nuevo de contaminante por adición externa o por producción a partir de uno existente. El término sumidero se incluye para describir los diversos mecanismos por los que se puede perder masa, como son la sorción, la degradación abiótica, la volatilización, por reacciones de oxidación-reducción, o por precipitación química, si existe desintegración radiactiva, si hay biodegradación, etc.

Las fuentes o sumideros pueden ser áreas o puntos, entre las primeras tenemos las zonas de recarga y evapotranspiración, y entre las segundas los pozos, canales y ríos.

En el caso de fuentes es necesario especificar la concentración, mientras que para un sumidero la concentración es la del acuífero, menos en el caso de evapotranspiración que se considera sólo de agua pura.

Si hay sorción, la masa total del contaminante está repartida entre la cantidad adsorbida sobre el medio sólido, en función de su densidad aparente y la que está presente en solución, en función del contenido volumétrico en agua del medio:  $\rho_b S + \theta C$ .

Podemos entonces escribir la ecuación general de transporte 1D como:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial S}{\partial t} = \theta D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \theta v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.8)$$

Que podemos transformar a:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial S}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} = \theta D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \theta v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.9)$$

Dividiendo por el contenido en agua y reordenando:

$$\left(1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial S}{\partial C}\right) \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.10)$$

Si asumimos que la adsorción se puede modelar como un proceso de equilibrio lineal  $S=K_d \cdot C$  y recordando la definición del factor de retardo, ecuación (6.3), nos queda la siguiente ecuación de estado:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7.11)$$

El factor de retardo,  $R_f$ , podemos pasarlo al segundo término y vemos que lo que produce es una disminución en la magnitud del transporte dispersivo y en la velocidad.

Si el soluto también está sujeto a sorción lineal y biodegradación o desintegración de primer orden, la ecuación de transporte, en 1D por simplicidad, se escribe como:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - R_f k C \quad (7.12)$$

donde  $k$  es la constante de la velocidad de reacción de primer orden. Nosotros sólo vamos a considerar como reacción de primer orden la desintegración radiactiva y por tanto sustituimos la  $k$  por  $\lambda$ , que indica la constante de desintegración del elemento radiactivo. Para un caso general podemos decir que la ecuación de transporte de solutos está formada por el término de dispersión y el de advección, un posible término de sorción, y otro de desintegración.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{Dispersión}} - \underbrace{v_x \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{Advección}} - \underbrace{\frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t}}_{\text{Sorción}} - \underbrace{\lambda C}_{\text{Desintegración}} \quad (7.13)$$

De forma general en tres dimensiones la ecuación queda de la forma siguiente:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - R_f \lambda C \quad (7.14)$$

donde  $x, y, z$  son las coordenadas espaciales en la dirección longitudinal, lateral y vertical, respectivamente [L];  $C$  es la concentración disuelta del contaminante [ $M/L^3$ ];  $D_x, D_y, D_z$  son los coeficientes de dispersión hidrodinámicos en cada dirección [ $L^2/T$ ];  $v_x$  es la velocidad lineal media del agua en la dirección longitudinal [ $L/T$ ];  $R_f$  es el factor de retardo [-];  $t$  es el tiempo [T];  $\lambda$  es el coeficiente de desintegración de primer orden [ $1/T$ ].

La ecuación (7.14) se puede escribir también de la siguiente forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_x}{R_f} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_y}{R_f} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{D_z}{R_f} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{v_x}{R_f} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (7.15)$$

Tenemos los términos de dispersión y velocidad divididos por el factor de retardo, es decir, que el efecto de la sorción es retardar la velocidad a la cual se mueven los compuestos que se adsorben, así como disminuir la expansión de los mismos por dispersión.

La ecuación de transporte describe el cambio en la concentración de soluto en su movimiento en el agua subterránea. Para obtener una solución única de una ecuación diferencial, como es la de transporte, es necesario especificar qué condiciones iniciales y de contorno se aplican a dicho problema. Las condiciones iniciales describen los valores de la variable en consideración, en nuestro caso la concentración, en el tiempo inicial de análisis. Las condiciones de contorno especifican la interacción entre el área de estudio y su ambiente exterior.



La Figura 6 muestra el efecto de la advección, dispersión, sorción y degradación en el transporte de solutos. Así, podemos ver que si únicamente hay advección ( $D = 0$ ;  $R_f = 1$ ) el contaminante viaja con el agua (efecto de la advección). Si hay dispersión ( $D \neq 0$ ), pero no sorción ( $R_f = 1$ ), por ejemplo un contaminante conservativo. El centro de masas del contaminante viaja a velocidad  $v$ , pero existe una expansión del contaminante debido a la dispersión (efecto de advección y dispersión). Si hay dispersión ( $D \neq 0$ ) y también sorción, contaminante no conservativo ( $R_f > 1$ , o  $K_d > 0$ ), el centro de masas viaja a velocidad  $v/R_f$  (efecto de la advección, dispersión y adsorción). Si hay dispersión ( $D \neq 0$ ) y sorción ( $R_f > 1$ , o  $K_d > 0$ ) y degradación o desintegración radiactiva, por ejemplo un contaminante no conservativo y radiactivo. El centro de masas viaja a velocidad  $v/R_f$  y la masa se reduce en función de la constante de desintegración.

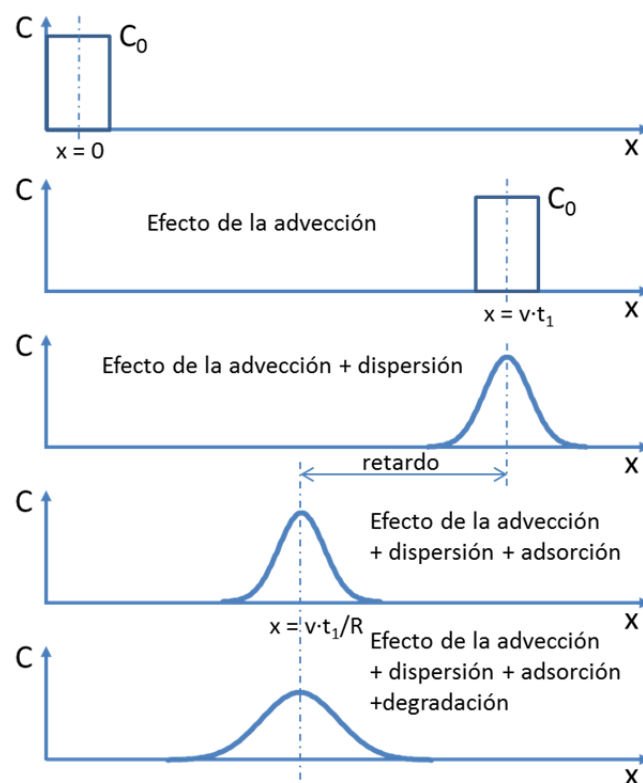


Figura 6. Descripción esquemática de los efectos de advección, dispersión, adsorción y degradación en el transporte (Adaptado de Kinzelbach, 1986).

## 7.1 CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

Para obtener una solución única a la ecuación diferencial de advección-dispersión es necesario especificar las condiciones iniciales y de contorno que se aplican. Las condiciones iniciales describen el valor de la variable en consideración, en nuestro caso la concentración, en un tiempo inicial generalmente igual a cero. Las condiciones de contorno especifican la interacción entre el área bajo investigación y su ambiente exterior. Las condiciones de contorno describen las condiciones a la entrada y la salida del sistema de flujo y también a lo largo del contorno lateral en los sistemas 2D y 3D.

La ecuación diferencial del transporte de solutos es de primer orden en el tiempo, requiere una condición inicial para todos los valores de  $x$ ,  $y$  y de segundo orden en espacio, lo que implica dos condiciones de contorno, una para cada extremo del dominio.

### 7.1.1 CONDICIONES INICIALES

Las condiciones iniciales describen matemáticamente la distribución de la concentración de un soluto en un tiempo inicial especificado, p.ej. tiempo  $t = 0$ . La forma general de las condiciones iniciales se escribe como:

$$C(x,y,z,0) = C_0(x,y,z) \text{ en el dominio de interés completo } \Omega.$$

donde  $C_0(x,y,z)$  es una distribución de concentraciones conocida. Si se simula transferencia de masas para sorción en no equilibrio, es necesario también definir la concentración inicial para las fases móvil e inmóvil.

Generalmente se requieren condiciones iniciales para los problemas de transporte de solutos, a menos que se desee la solución de régimen estacionario, p.ej.  $\partial C/\partial t = 0$ .

En general, la condición inicial es uniforme para las soluciones analíticas.

### 7.1.2 CONDICIONES DE CONTORNO

Las condiciones de contorno son necesarias tanto para especificar la concentración de soluto, el flujo de soluto, o alguna combinación en el límite exterior o interior del dominio.

La solución de la ecuación de transporte también requiere especificar las condiciones de contorno. Aquí consideraremos tres tipos generales de condiciones de contorno:

- a) Concentración fija conocida a lo largo del contorno de entrada. Primer Tipo o de Dirichlet.

$$C(x=0, t) = C_0$$

$$C(0, t) = C_0 e^{-\lambda t}$$

donde  $\lambda$  es la constante de desintegración ( $T^{-1}$ ). En problemas multidimensionales la concentración en el contorno puede ser una función del espacio:  $C(0,y,t) = f(y)$ .

La Figura 7 esquematiza como una condición de Dirichlet representa un cambio brusco en la concentración del contaminante.

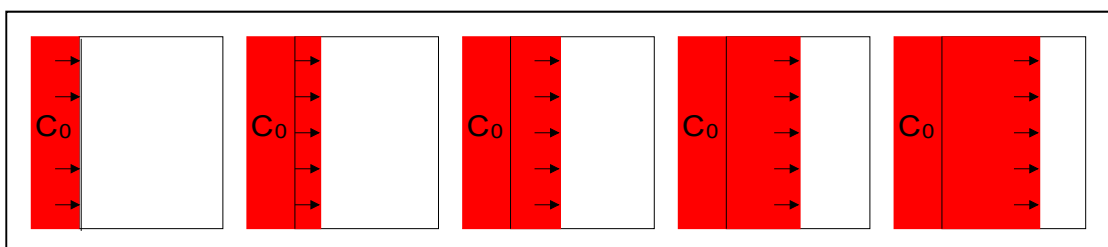


Figura 7. Avance de la concentración para una condición de contorno de Primer Tipo. (L-C. Chuang, 1998)

- b) Gradiente fijo de concentración conocido a través del contorno. Segundo Tipo o de Neumann.

$$\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=L} = f(y, t)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y}\bigg|_{y=0} = 0$$

Corresponde a la incorporación gradual de contaminante al flujo de agua subterránea, Figura 8. La tasa de inyección es constante y la masa de soluto que entra al acuífero es proporcional a la duración de la inyección. El contaminante puede dispersarse hacia aguas arriba y aguas abajo, (Apey Freire, 2009).

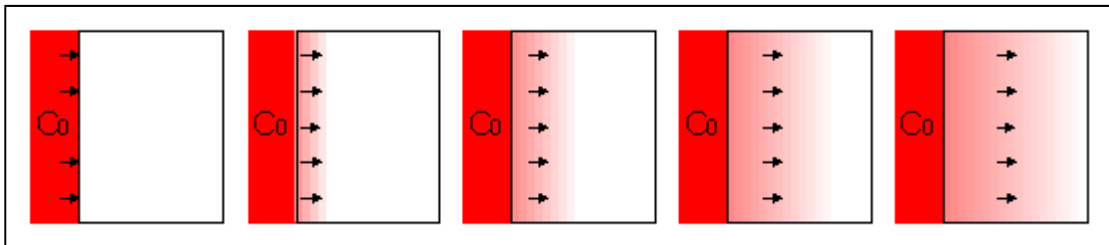


Figura 8. Avance de la concentración para una condición de contorno de Segundo Tipo. (L-C. Chuang, 1998)

- c) Mezcla o flujo variable, es una combinación de (a) y (b). Tercer Tipo o de Cauchy.

$$vC_0 = vC - \frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=0}$$

Representa la incorporación paulatina de masa en el acuífero. El valor de la concentración y el gradiente en concentración son conocidos. Esta condición de contorno es la que mejor describe las concentraciones de entrada en un sistema de flujo uniforme, donde un soluto bien mezclado entra en el sistema por advección a través del contorno y es transportado desde el contorno por advección y dispersión, Figura 9.

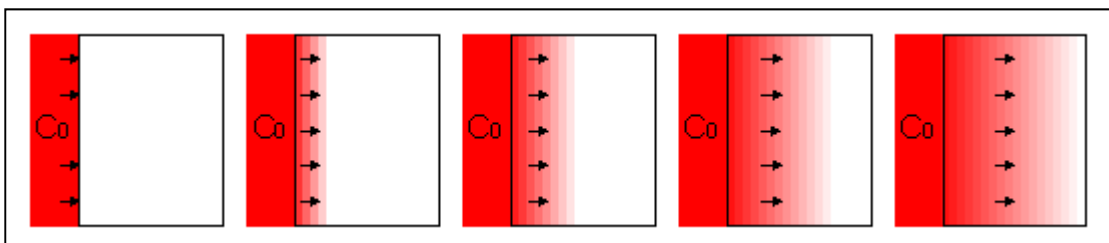


Figura 9. Avance de la concentración para una condición de contorno de Tercer Tipo. (L-C. Chuang, 1998)

Para flujo 1D necesitamos especificar las condiciones relativas a la posición,  $x$ , y el tiempo,  $t$ . Por convención esto se muestra en la forma:  $C(x,t) = C(t)$ , donde  $C(t)$  es una función conocida. Por ejemplo podemos escribir:

$C(0,t) = C_0, \quad t \geq 0$  que especifica que para todo tiempo  $t$  igual o mayor de cero en  $x = 0$  la concentración se mantiene a  $C_0$ . Es una fuente continua con concentración fija en  $x = 0$  (Primer Tipo).

$C(x,0) = 0, \quad x \geq 0$  es una condición inicial que dice que a  $t = 0$ , la concentración es cero dentro del dominio del flujo, que es donde  $x$  es mayor o igual a 0. Tan pronto inicia el flujo, el soluto a concentración  $C_0$  atravesará el contorno en  $x=0$ .

$C(\infty,t) = 0, \quad t \geq 0$  muestra que el sistema de flujo es infinitamente largo y que no hay materia a lo largo del tiempo, la concentración permanecerá como cero al final del sistema (condición de contorno de Primer Tipo en  $x = \infty$ ).

Podemos también especificar una condición inicial tal que dentro del dominio la concentración de soluto sea  $C_i$ , se escribiría:  $C(x,0) = C_i, \quad x \geq 0$ .

También es una condición de Primer Tipo la inyección de un pulso de concentración constante durante un periodo de tiempo seguido por otro periodo con concentración constante diferente:

$$C(0,t) = C_0, \quad 0 < t \leq t_0$$

$$C(0,t) = 0, \quad t > t_0$$

Una condición de contorno de gradiente fijo, Segundo Tipo, se escribe:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = f(t) \quad \text{o} \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=\infty} = f(t)$$

donde  $f(t)$  es alguna función conocida. Una condición de este tipo muy común es  $\partial C / \partial t = 0$  o sin gradiente.

Un contorno de flujo variable, Tercer Tipo, se expresa como:

$$v_x C(t) = v_x C - D \frac{\partial C}{\partial x}$$

donde  $C(t)$  es una función de concentración conocida. Una condición de contorno común de Tercer Tipo es un flujo constante con una concentración de entrada constante, que se expresa como:

$$C_0 = \left( vC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}$$

## 7.2 FUNCIÓN DE ERROR

Muchas de las soluciones analíticas a la ecuación de transporte contienen la función de error o la función de error complementaria. Se trata de una función matemática relacionada con

la distribución normal o de Gauss. El perfil de un frente de difusión tiene la forma de la función de error complementaria.

La función de error es una función trascendental que aparece en probabilidad, estadística, y en la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Se define como:

$$\operatorname{erf}(\beta) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\beta} e^{-t^2} dt$$

Y tiene las siguientes propiedades:

- La función de error es impar por lo que:  $\operatorname{erf}(-\beta) = -\operatorname{erf}(\beta)$ .
- La función de error complementaria se define como:  $\operatorname{erfc}(\beta) = 1 - \operatorname{erf}(\beta)$ .
- Para valores negativos del argumento tenemos:  $\operatorname{erfc}(-\beta) = 1 + \operatorname{erf}(\beta)$ .
- $\operatorname{erfc}(0) = 1$

La Figura 10 muestra la gráfica de la función erf y erfc. Se puede observar que el rango de la función erf es desde -1 hasta 1, mientras que el rango de la función erfc va desde 0 hasta 2.

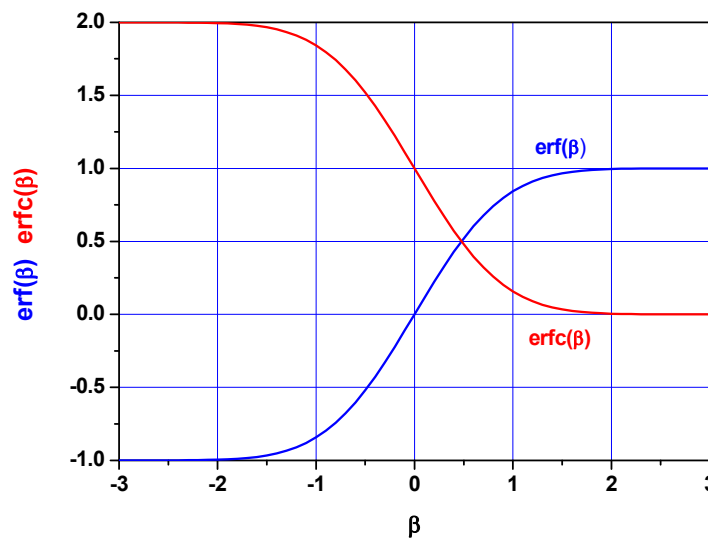


Figura 10. Gráfica de las funciones erf y erfc.

### 7.3 PRINCIPIO DE SUPERPOSICIÓN.

La ecuación de transporte de solutos es una ecuación diferencial parcial lineal, por lo que se puede aplicar el principio de superposición para calcular la concentración de un sistema si la concentración de entrada varía con el tiempo. La forma general de la solución se puede expresar como:

$$C = C_0 \cdot A(x,y,z,t) + (C_1 - C_0) \cdot A(x,y,z,t-t_1)$$

donde  $C_0$  es la concentración de soluto inicial en el contorno.  $A(x,y,z,t)$  es la forma general de la solución analítica donde la concentración es función del espacio y el tiempo.  $C_1$  es la

concentración de soluto en el contorno después de  $t = t_1$ , y  $t_1$  es el tiempo para el cual la concentración de soluto cambia en el contorno (Aral, 2001).

Es decir, para sistemas lineales, la solución a un problema con varios inputs es igual a la suma de las soluciones de los problemas individuales.

## 8 SOLUCIONES ANALÍTICAS. TRANSPORTE 1-D.

La mayoría de las soluciones analíticas de la ecuación de transporte de solutos en forma 1D se desarrollaron para estudiar la difusión y dispersión en suelos o columnas en el laboratorio. Pero hay situaciones de campo que pueden ser idealizadas a sistemas 1D. Por ejemplo, imaginemos un flujo vertical producido por la rotura de un tanque séptico a través de una zona insaturada, que llega a un acuífero. Mediante un transporte 1D se puede simular el transporte de los contaminantes en el centro ignorando la dispersión horizontal. Otra posible situación, que también se puede simplificar a un caso 1D, es el caso de un flujo horizontal desde el río que está contaminado, hacia otro río que no lo está.

Un sistema 1D puede ser finito, semi-infinito o infinito. Para sistemas finitos o semi-infinitos el agua conteniendo una especie contaminante entra en el sistema en el origen,  $x = 0$ . El agua y el soluto salen del sistema,  $x = L$  al final de la columna, o al llegar a un río, o al nivel freático. En un sistema finito, el contorno de salida puede afectar a la concentración dentro del área de interés. Si el contorno de salida está suficientemente lejos no le afectará, como sería en un sistema semi-infinito o infinito.

A continuación vamos a detallar soluciones analíticas 1D en función del tipo de condición de contorno y de la forma de entrada del contaminante; inicialmente se presentará para un contaminante conservativo, para posteriormente ampliarla a un contaminante que se adsorbe en el medio y a un contaminante radiactivo. Se presentan también, por su utilidad, las soluciones adimensionales de algunas de las situaciones y cómo se trata el caso de superposición para un medio con una contaminación previa.

La mayoría de las soluciones para un medio semi-infinito, están incluidas en el código CXTFIT (Parker y van Genuchten, 1984; Toride et al., 1999) e incluidas posteriormente en el software bajo Windows STANMOD (Simunek et al., 2000). En 2013, van Genuchten et al., presentan, en dos partes, una serie de soluciones analíticas en 1D, 2D y 3D para la ecuación de transporte de solutos en equilibrio, con y sin término de producción y desintegración para una gran cantidad de casos.

### 8.1 INYECCIÓN CONTINUA DE CONTAMINANTE.

#### 8.1.1 CONDICIÓN DE CONTORNO DE TIPO 1 O DIRICHLET.

Para estudiar el transporte de solutos en el laboratorio, se usan columnas. Imaginemos que tenemos una columna como la representada en la Figura 11: a través de la columna rellena con el material de estudio se hace circular agua con un flujo constante o de régimen estacionario. Inicialmente la columna está libre de trazador. En un momento determinado se sustituye el agua por una solución con un trazador con concentración  $C_0$ . El trazador irá progresivamente avanzando a lo largo de la columna. La condición de contorno de Tipo 1 representa un cambio repentino en la concentración del contaminante.

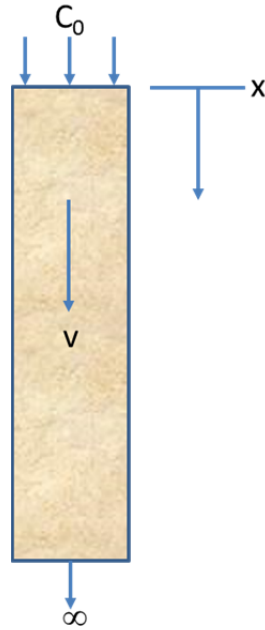


Figura 11. Esquema de una columna de laboratorio para el estudio del transporte de contaminantes.

### 8.1.1.1 Contaminante conservativo en un medio semi-infinito

La ecuación de estado de la que partimos es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8.1)$$

Con la siguiente condición inicial y de contorno:

Condición inicial  $C(x, 0) = 0$  para  $x \geq 0$

Condiciones de contorno  $C(0, t) = C_0$  para  $t \geq 0$

$C(\infty, t) = 0$  para  $t \geq 0$

Asumimos que el flujo es en la dirección de  $x$  y la velocidad es constante, así como el coeficiente de dispersión.

Para un trazador conservativo y no radiactivo ( $\lambda = 0$ ) la solución analítica es la obtenida por Ogata y Banks (1961):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \quad (8.2)$$

En muchas situaciones prácticas el segundo término de la ecuación anterior es despreciable, así ocurre, por ejemplo cuando el trazador ha viajado una distancia significativa de la fuente, el numerador  $x + vt$  se hace muy grande y la función de error complementaria de un valor grande es cero, o cuando ha transcurrido mucho tiempo, simplificándose la expresión a:



$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \quad (8.3)$$

Que es la solución reducida para régimen permanente o estacionario.

Si representamos  $C/C_0$  a lo largo de la columna en función del tiempo que dura la inyección, es decir todos los demás parámetros fijos, se obtiene el tipo de gráficas mostrado en la Figura 12.

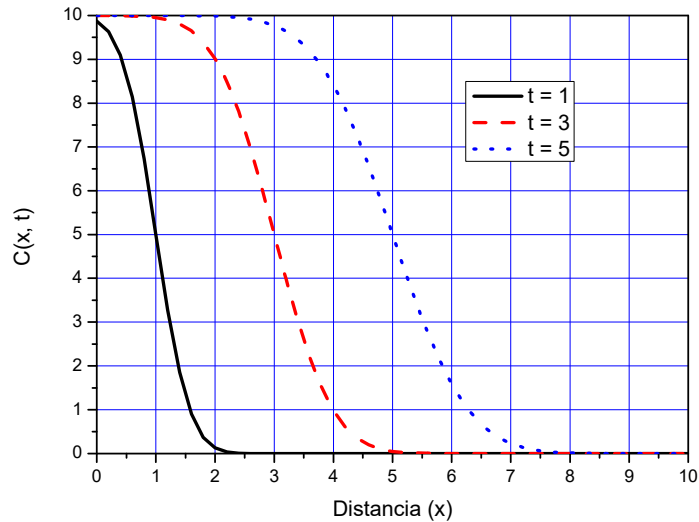


Figura 12. Efecto del tiempo sobre el frente de contaminación para una fuente continua

Si para el caso anterior de  $t = 3$  variamos el valor del coeficiente de dispersión, cambia la forma del frente, obteniéndose, por ejemplo las gráficas mostradas en la Figura 13.

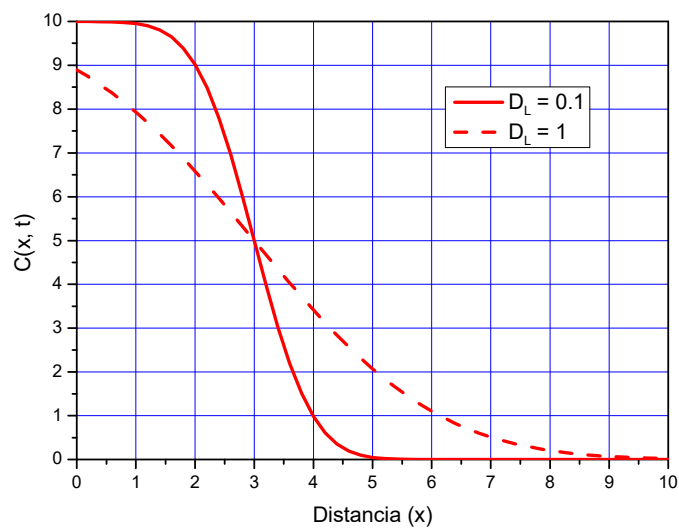


Figura 13. Efecto del coeficiente de dispersión sobre el frente de contaminación para una fuente continua

Si nuestra columna tiene una longitud  $x = L$ , puede ser útil expresar la ecuación (8.2) en forma adimensionales de la siguiente forma:

$$C_R(Pe, t_R) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} (1 - t_R) \right] + \exp(Pe) \cdot \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} (1 + t_R) \right] \right] \quad (8.4)$$

donde:

$$t_R = \frac{v_x \cdot t}{L}$$

$$C_R = \frac{C}{C_0}$$

$$Pe = \frac{v_x \cdot L}{D_x}$$

Con  $t_R$  y  $C_R$  un tiempo y una concentración adimensional y  $Pe$  el número de Peclet.

Se puede escribir la ecuación adimensional también en forma reducida (válida para  $Pe > 100$ ):

$$C_R(Pe, t_R) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} \cdot (1 - t_R) \right] \quad (8.5)$$

### EJEMPLO

Consideremos una columna de laboratorio suficientemente larga en la cual se inyecta un trazador conservativo. La velocidad lineal del agua en la columna es de 3 cm/min, el coeficiente de dispersividad  $\alpha_L$  es de 5 cm, y el coeficiente de difusión del trazador es  $D^* = 2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{min}$ . Calcular  $C/C_0$  para una distancia de 150 cm al cabo de 30 y 60 minutos. Después de 50 minutos calcular  $C/C_0$  a los 100 y 200 cm del punto de inyección.

### Solución

Podemos aplicar la ecuación de Ogata&Banks:

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

Calculamos el coeficiente de dispersión,  $D_L$ :

$$D_L = D^* + \alpha_L \cdot v = 0,0002 \text{ cm}^2/\text{min} + 5 \text{ cm} \cdot 3 \text{ cm}/\text{min} = 15,0002 \text{ cm}^2/\text{min}$$

Para  $t = 30$  minutos en  $x = 150$  cm tenemos:

$$\frac{x - v \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} = \frac{150 \text{ cm} - \frac{3 \text{ cm}}{\text{min}} \cdot 30 \text{ min}}{2 \cdot \sqrt{\frac{15,0002 \text{ cm}^2}{\text{min}} \cdot 30 \text{ min}}} = 1,4142$$

$$\frac{x + v \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} = \frac{150 \text{ cm} + \frac{3 \text{ cm}}{\text{min}} \cdot 30 \text{ min}}{2 \cdot \sqrt{\frac{15,0002 \text{ cm}^2}{\text{min}} \cdot 30 \text{ min}}} = 5,6568$$

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc}(1,4142) + \exp\left(\frac{\frac{3 \text{ cm}}{\text{min}} \cdot 150 \text{ cm}}{15,0002 \text{ cm}^2/\text{min}}\right) \cdot \operatorname{erfc}(5,6568) \right]$$

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = \frac{1}{2} [0,0455 + 1,068 \cdot 10^{13} \cdot 1,245 \cdot 10^{-15}] = 0,0294$$

Para 60 minutos el resultado es:

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = 0,7996$$

Similarmente, para t = 50 minutos a los 100 cm, C/C<sub>0</sub> es 0,9279 y a los 200 cm es 0,1173.

Las gráficas de la Figura 14 muestran la evolución de la concentración relativa en función de la distancia y el tiempo, respectivamente. Están marcados los valores para los puntos de interés.

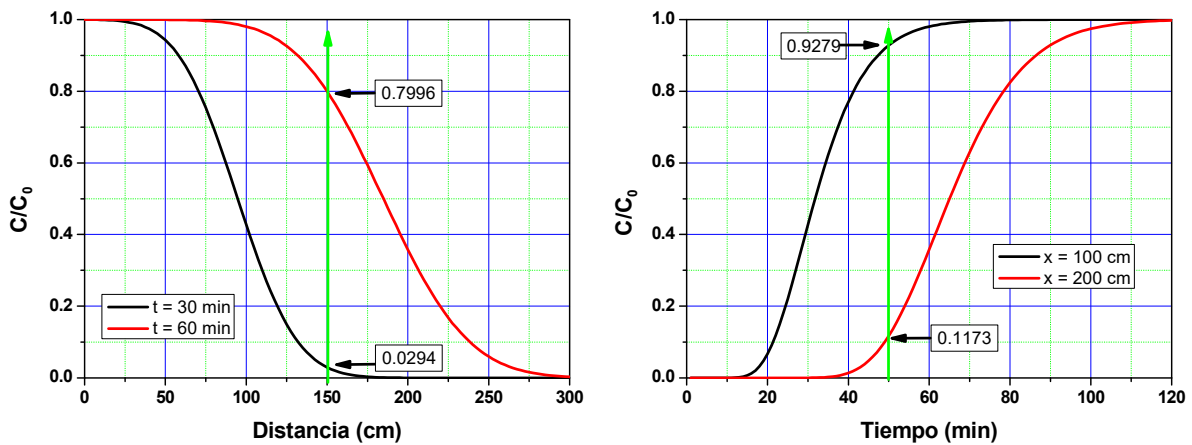


Figura 14. Perfil de concentración y curva de recuperación de una fuente continua de contaminante.

### 8.1.1.2 Contaminante con sorción.

Si hay sorción y asumimos que la adsorción se puede modelar como un proceso de equilibrio lineal  $S=K_d \cdot C$  y recordando la definición del factor de retardo, tenemos la siguiente ecuación de estado:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8.6)$$

El factor de retardo,  $R_f$ , podemos pasarlo al segundo término, dividiendo los coeficientes  $D_L$  y  $v_x$  por  $R_f$  y vemos que lo que produce es una disminución en la magnitud del transporte dispersivo y en la velocidad. Cuando consideremos la adsorción siempre podemos trabajar con el coeficiente de dispersión retardado  $D' = D_L/R_f$  y la velocidad retardada,  $v' = v_x/R_f$ . La solución analítica, para la misma condición inicial y de contorno anterior, queda como:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - \frac{v_x t}{R_f}}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + \frac{v_x t}{R_f}}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) \right] \quad (8.7)$$

Que también podremos acabar simplificando a:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{R_f x - v_x t}{2 \sqrt{R_f D_L t}} \right) \quad (8.8)$$

El efecto del retardo para una fuente continua es el retraso de la curva de recuperación o breakthrough, como se puede observar en la Figura 15.

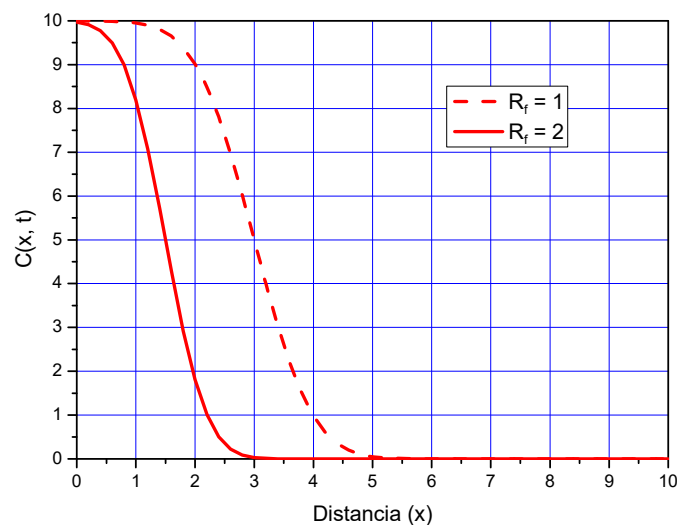


Figura 15. Efecto del factor de retardo sobre el frente de contaminación para una fuente continua

### EJEMPLO

Consideremos el ejemplo anterior pero inyectando un trazador que se adsorbe, y presenta un coeficiente de distribución,  $K_d = 0,2 \text{ mL/g}$ . La porosidad del material de la columna es de 0,25 y su densidad aparente de  $1,65 \text{ g/cm}^3$ . Representar gráficamente el avance del frente de contaminación después de 60 minutos con y sin adsorción. Representar la curva de recuperación del trazador a los 100cm del punto de inyección con y sin adsorción.

### Solución

Calculamos el factor de retardo,  $R_f$ :

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b}{n} \cdot K_d = 1 + \frac{1,65 \text{ g/cm}^3}{0,2} \cdot \frac{0,2 \text{ mL}}{\text{g}} = 2,65$$

Los casos sin adsorción se han obtenido en el ejemplo anterior, para el caso de adsorción utilizamos la ecuación (8.7). Se obtienen las siguientes gráficas, Figura 16:

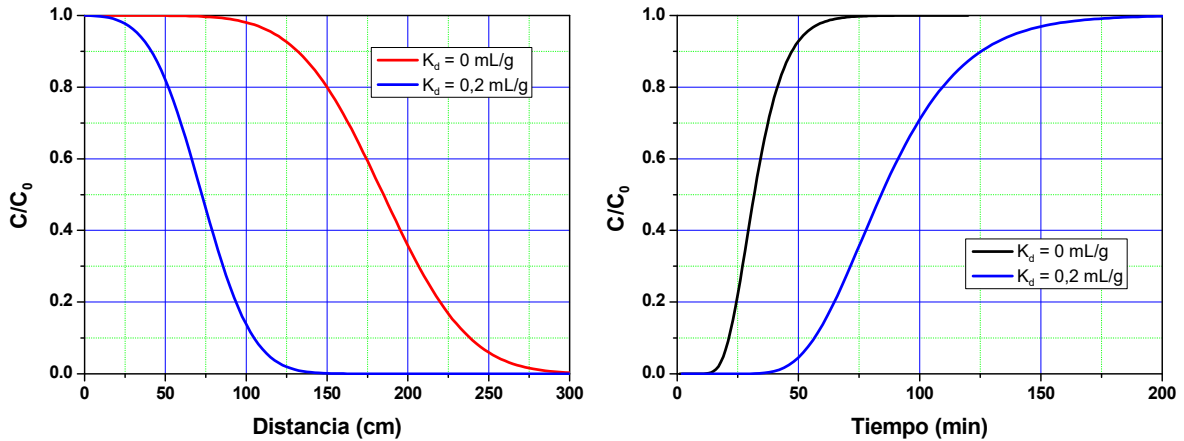


Figura 16. Efecto del coeficiente de distribución sobre el perfil de concentración y la curva de recuperación para una fuente continua.

Después de 60 minutos, el frente sin adsorción ha avanzado hasta los 300 cm mientras que si el contaminante presenta un  $K_d = 0,2 \text{ mL/g}$  sólo ha llegado hasta los 150 cm (gráfica de la izquierda, Figura 16). A los 100 cm del punto de inyección un contaminante conservativo presenta un valor de  $C/C_0 = 1$  a los 75 minutos aproximadamente, mientras que necesita más de 200 si se adsorbe con un  $K_d = 0,2 \text{ mL/g}$ . (gráfica de la derecha, Figura 16).

### 8.1.1.3 Contaminante con sorción y radiactivo

Si además de sorción el contaminante es radiactivo, hay que incluir el término de desintegración en la ecuación general de estado:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda R_f C \quad (8.9)$$

La ecuación analítica que nos queda es, van Genuchten y Alves (1982):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \exp\left(\frac{x(v_x - U)}{2D_L}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{U}{R_f}t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}t}}\right) + \exp\left(\frac{x(v_x + U)}{2D_L}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + \frac{U}{R_f}t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}t}}\right) \right] \quad (8.10)$$

donde:  $U = \sqrt{v_x^2 + 4\lambda D_L}$

Que para tiempos grandes o régimen estacionario también se puede simplificar a:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \exp\left(\frac{x(v_x - U)}{2D_L}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{U}{R_f}t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}t}}\right) \right] \quad (8.11)$$

### EJEMPLO

Sigamos con el ejemplo anterior pero ahora inyectando un trazador que se adsorbe, y además es radiactivo, con un periodo de semidesintegración de 50 minutos (su concentración se reduce a la mitad después de 50 minutos). Representar gráficamente el avance del frente de contaminación después de 60 minutos considerando que no tenga adsorción, que presente adsorción y que además de adsorción se desintegre. Representar la curva de recuperación del trazador a los 100 cm del punto de inyección para los mismos casos.

### Solución

Puesto que el periodo de semidesintegración es  $T_{1/2} = 50$  minutos, la constante de desintegración es:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{0,693}{50 \text{ min}} = 0,01386 \text{ min}^{-1}$$

Los casos sin y con adsorción se han obtenido en los ejemplos anteriores, para el caso de desintegración utilizamos la ecuación (8.10). Se obtienen las siguientes gráficas, Figura 17:

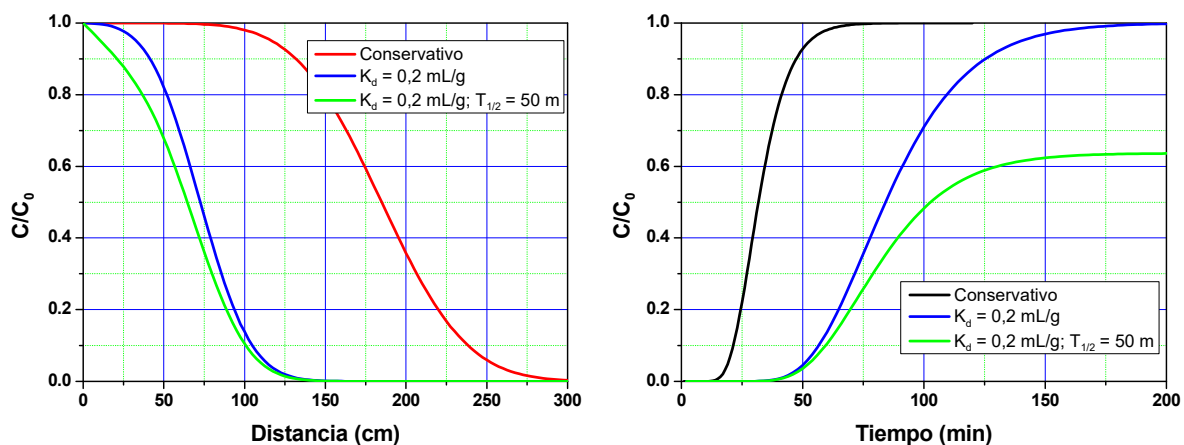


Figura 17. Efecto del coeficiente de distribución y la desintegración para una fuente continua.

Después de 60 minutos, el frente del trazador conservativo ha avanzado hasta los 300 cm, si el trazador presenta un  $K_d = 0,2 \text{ mL/g}$  sólo ha llegado hasta los 150 cm, y si además de adsorberse se desintegra se pierde concentración (gráfica de la izquierda). A los 100 cm del punto de inyección un contaminante conservativo presenta un valor de  $C/C_0 = 1$  a los 75 minutos aproximadamente, mientras que necesita más de 200 si se adsorbe con un  $K_d = 0,2$

mL/g si el contaminante se desintegra nunca alcanzará el valor de  $C/C_0 = 1$  (gráfica de la derecha). Es un ejemplo algo forzado pues es necesario suponer que el trazador entra siempre con una actividad fija y es una vez dentro de la columna cuando se desintegra, pero nos sirve para ver su efecto.

### EJEMPLO

Un contaminante entra continuamente en el punto  $x = 0$  de una columna de sección  $1 \text{ cm}^2$ , con una concentración de  $10 \text{ g/cm}^3$ . La dispersividad longitudinal es  $1 \text{ cm}$ . El flujo de agua es de  $0,35 \text{ cm}^3/\text{min}$ , la porosidad es  $0,35$  y el coeficiente de difusión es  $1 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{min}$ . Calcular la concentración del contaminante en la dirección del flujo a los  $100$  minutos y la curva de recuperación en  $x = 25 \text{ cm}$  para un contaminante que no se desintegra y para un contaminante con una constante de desintegración  $\lambda = 0,01 \text{ min}^{-1}$ .

### Solución

$$v_x = \frac{Q}{n \cdot A} = \frac{0,35 \text{ cm}^3/\text{min}}{0,35 \cdot 1 \text{ cm}^2} = 1,0 \text{ cm/min}$$

$$D_L = \alpha_L v_x + D^* = (1 \text{ cm} \cdot 1 \text{ cm/min}) + 1 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{min} = 1 \text{ cm}^2/\text{min}$$

Aplicando la última ecuación (8.11) se obtienen los resultados mostrados en las Figuras 18 y 19.

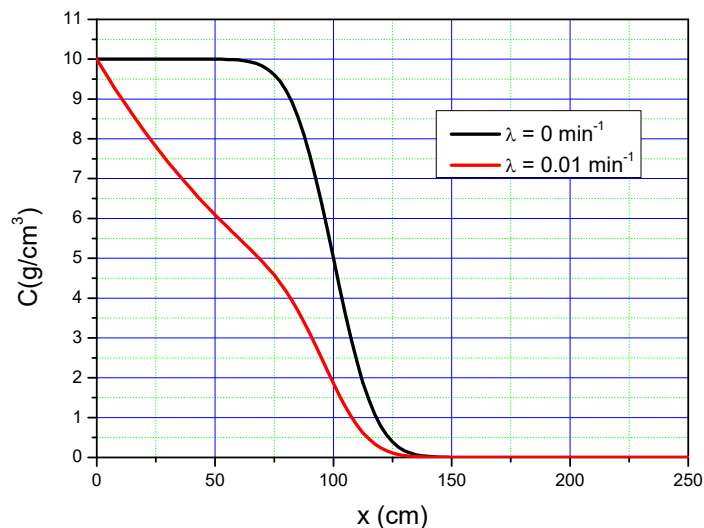


Figura 18. Perfil de concentración en la dirección del flujo para una fuente continua.

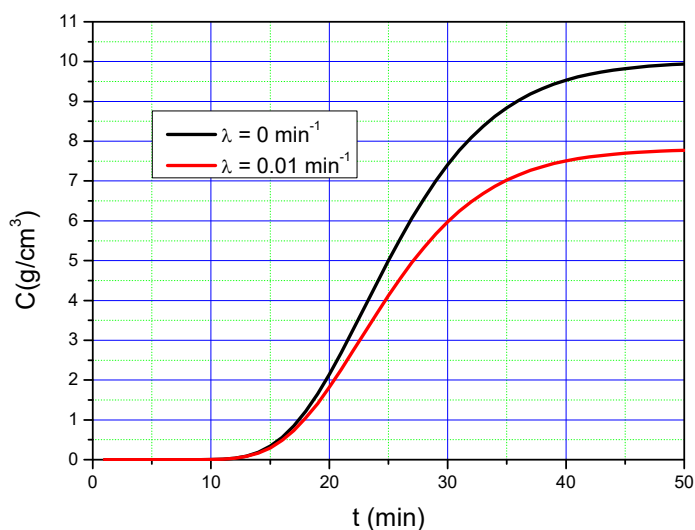


Figura 19. Curva de recuperación a  $x = 25$  cm para una fuente continua.

#### 8.1.1.4 Pulso de duración finita, con sorción y concentración base.

Supongamos una situación como la representada en la Figura 20. Tenemos una concentración de fondo o de base,  $C_i$ , y en un momento determinado  $t=0$  se realiza una inyección del contaminante, hasta concentración  $C_f$ , con una duración de  $t=t_p$ .

La ecuación de estado para un contaminante que se adsorbe sobre el medio es la ecuación (8.6) cuya solución analítica viene dada por la ecuación (8.7).

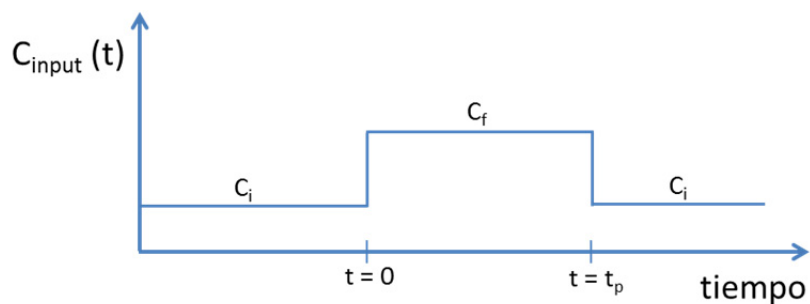


Figura 20. Pulso de contaminante

Condición inicial  $C(x, 0) = C_i \quad t < 0$

Condiciones de contorno  $C(0, t) = C_f \quad \text{para } 0 < t \leq t_p$

$C(\infty, t) = C_i \quad \text{para } t > t_p$

La solución se deriva aplicando el principio de superposición a la solución de una inyección continua:



$$C(x, t) = C_i + (C_f - C_i) \cdot A(x, t) \quad \text{para } 0 < t \leq t_p \quad (8.12)$$

$$C(x, t) = C_i + (C_f - C_i) \cdot [A(x, t) - A(x, t - t_p)] \quad \text{para } t > t_p$$

con:

$$A(x, t) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - \frac{v_x}{R_f} t}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + \frac{v_x}{R_f} t}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) \right] \quad (8.13)$$

En general, si tenemos múltiples pulsos de contaminante en el tiempo en los que la concentración del contaminante varía, Figura 21, la solución analítica es:

$$C(x, t) = \sum_{j=1}^i (C_{j,0} - C_{j-1,0}) A(x, t - T_{i-1}) \quad (8.14)$$

donde  $C_{i,0}$  es la concentración de la fuente en el intervalo  $i$  ( $i=1,2,\dots$ ) y  $A$  es la solución analítica del problema,  $T_i$  es la duración del intervalo de tiempo  $i$ , y  $t$  es el tiempo. Se asume que  $T_0 = 0$  y  $C_{0,0} = 0$ .

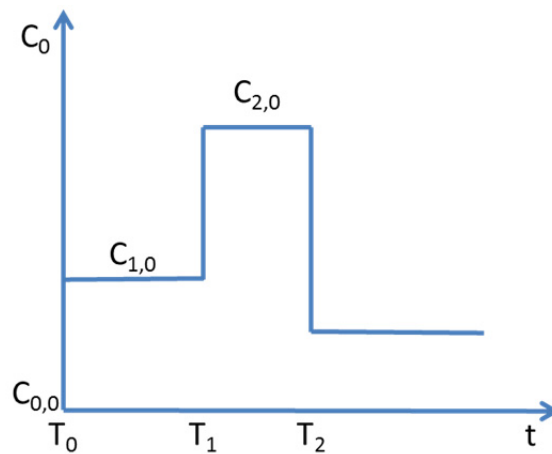


Figura 21. Esquema de múltiples pulsos de contaminación en el tiempo.

Si tenemos un pulso único la solución se escribe:

$$C(x, t) = \begin{cases} C_0 A(x, t), & t > T_1 \\ C_0 [A(x, t) - A(x, t - T_1)], & t > T_1 \end{cases} \quad (8.15)$$

La ecuación (8.15) indica que la solución analítica para un pulso simple para tiempos posteriores a la duración de la fuente, es la superposición de dos fuentes continuas con fuerzas opuestas.

## EJEMPLO

Con los datos del ejemplo anterior, calcular la curva de recuperación en  $x = 25$  cm si la fuente de contaminación sólo dura 30 minutos y el contaminante presenta una constante de desintegración  $\lambda = 0,01 \text{ min}^{-1}$ .

## Solución

La solución analítica la podemos escribir como:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \exp\left(\frac{x(v_x - U)}{2D_L}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{U}{R_f}t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}t}}\right) \right] \text{ para } t < T_1$$

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \exp\left(\frac{x(v_x - U)}{2D_L}\right) \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{U}{R_f}t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}t}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{U}{R_f}(t - T_1)}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f}(t - T_1)}}\right) \right] \text{ para } t > T_1$$

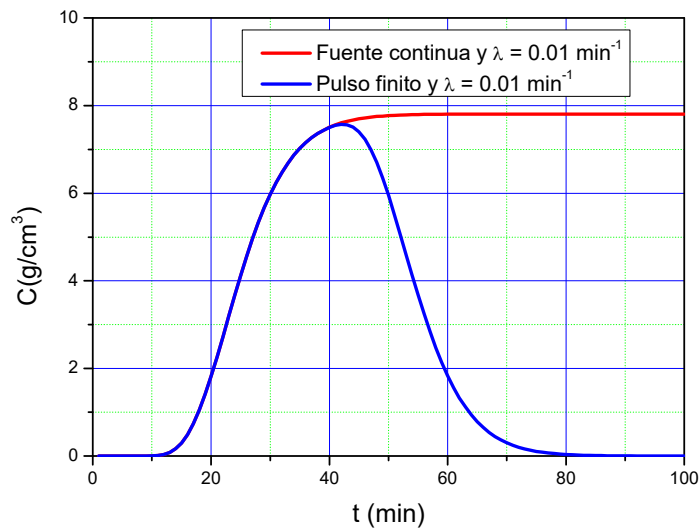


Figura 22. Curva de recuperación en  $x = 25$  para un pulso de duración finita.

### 8.1.1.5 Contaminante radiactivo y en medio finito.

La ecuación de estado de la que partimos es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (8.16)$$

Con la siguiente condición inicial y de contorno:

Condición inicial	$C(x, 0) = 0$	para $0 < x < L$
Condiciones de contorno	$C(0, t) = C_0$	para $t \geq 0$
	$C(L, t) = 0$	para $t \geq 0$

Asumimos que el flujo es en la dirección de  $x$  y la velocidad es constante, así como el coeficiente de dispersión.

La solución analítica para el caso de un medio finito es muy compleja, pero para tiempos largos, tenemos la solución de régimen estacionario siguiente (van Genuchten y Alves, 1982):

$$C(x, t) = C_0 \exp \frac{\left[ \frac{(v_x - U)x}{2D_L} \right] + \frac{(U - v_x)}{(U + v_x)} \exp \left[ \frac{(v_x + U)x}{2D_L} - \frac{UL}{D_L} \right]}{\left[ 1 + \frac{(U - v_x)}{(U + v_x)} \exp \left( \frac{-UL}{D_L} \right) \right]} \quad (8.17)$$

donde  $U = \sqrt{v_x^2 + 4\lambda D_L}$

Similarmente, la solución para el caso de adsorción lineal se obtiene dividiendo los coeficientes  $D_L$  y  $v_x$  por el factor de retardo,  $R_f$ . Teniendo en cuenta que ahora:

$$U = \sqrt{\frac{v_x^2}{R_f} + \frac{4\lambda D_L}{R_f}}$$

Si existe variaciones temporales en la concentración de la fuente se aplica el principio de superposición.

En general, aplicar la solución analítica para un medio semi-infinito es una buena aproximación para una columna de laboratorio.

### 8.1.2 CONDICIÓN DE CONTORNO DE TIPO 2 O NEWMAN.

Corresponde a la incorporación gradual del contaminante al flujo de agua. La tasa de inyección es constante y la masa de soluto que entra al acuífero es proporcional a la duración de la inyección. El contaminante puede dispersarse hacia aguas arriba y aguas abajo.

En la naturaleza no hay muchas situaciones donde pueda haber un cambio repentino en la calidad del agua que entra al acuífero. Una condición mucho más realista es que pueda haber una fuga de agua contaminada en el agua subterránea que fluye en el acuífero. En el caso 1-D, esto puede ser un canal que descarga agua contaminada en el acuífero como una fuente longitudinal.

La ecuación de estado es:

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

Con la siguiente condición inicial y de contorno (Widdowson, 1999):

Condición inicial  $C(x, 0) = 0$  para  $-\infty < x < +\infty$

Condiciones de contorno  $C_0 n_e v_x t = \int_{-\infty}^{\infty} n_e C(x, t) dx$  para  $t > 0$

$C(\infty, t) = 0$  para  $t \geq 0$

La solución analítica es (Sauty, 1980):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) - \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \quad (8.18)$$

La condición de contorno establece que la masa inyectada sobre el dominio  $-\infty < x < +\infty$  es proporcional a la longitud de tiempo de la inyección.

En forma adimensional, para una longitud de referencia  $x = L$ , se escribe como:

$$C_R(Pe, t_R) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} (1 - t_R) \right] - \exp(Pe) \cdot \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} (1 + t_R) \right] \right] \quad (8.19)$$

Las ecuaciones de Ogata&Banks y Sauty se diferencian sólo en el signo del segundo término, uno suma y otro sustrae. En forma simplificada son ambas iguales:

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

Y también la ecuación adimensional de la forma reducida:

$$C_R(Pe, t_R) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} \cdot (1 - t_R) \right]$$

Similarmente se puede obtener para el caso de contaminante que se adsorbe y para contaminante radiactivo.

### 8.1.3 CONDICIÓN DE CONTORNO DE TIPO 3 O CAUCHY.

La solución representa la incorporación paulatina de masa en el acuífero. El valor de la concentración y el gradiente de concentración son conocidos. Una de las condiciones de contorno establece que la concentración debe tener un valor finito a medida que la distancia de observación aumenta.

#### 8.1.3.1 Contaminante conservativo en un medio semi-infinito

La ecuación de estado es:

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

Con la siguiente condición inicial y de contorno:

Condición inicial  $C(x, 0) = 0$  para  $-\infty < x < +\infty$

Condición de contorno  $vC_0 = vC - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0}$  para  $x = 0$

$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \infty} = \text{finito}$  para  $x \rightarrow \infty$

La condición de contorno de Tipo 3 especifica que cuando  $x$  se aproxima a infinito, el gradiente de concentración puede ser todavía finito. Bajo estas condiciones la solución para un soluto conservativo y no radiactivo es (van Genuchten, 1981):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \left( \frac{v_x^2 t}{\pi D_L} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{(x - v_x t)^2}{4D_L t} \right] - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{v_x x}{D_L} + \frac{v_x^2 t}{D_L} \right) \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \quad (8.20)$$

Esta ecuación también se puede simplificar a la solución aproximada cuando aumenta el tiempo (solución de régimen estacionario):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right]$$

### 8.1.3.2 Contaminante con sorción

Si hay sorción y asumimos que se puede modelar como un proceso de equilibrio lineal  $S=Kd \cdot C$ , la solución analítica queda como (Lindstrom et al. 1967):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - \frac{v_x}{R_f} t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) + \left( \frac{v_x^2 t}{\pi \cdot R_f \cdot D_L} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{\left( x - \frac{v_x}{R_f} t \right)^2}{4\frac{D_L}{R_f} t} \right] - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{v_x x}{D_L} + \frac{v_x^2 t}{R_f D_L} \right) \exp \left( \frac{v_x x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - \frac{v_x}{R_f} t}{2\sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) \right] \quad (8.21)$$

Que en forma reducida vuelve a quedar como:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{R_f x - v_x t}{2\sqrt{R_f D_L t}} \right) \right]$$

En forma adimensional, para una longitud de referencia  $x = L$ , la ecuación se escribe como:

$$C_R(Pe, t_R) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} \cdot (1 - t_R) \right] + \left( \frac{t_R \cdot Pe}{\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \cdot (1 - t_R) \right) \right] \quad (8.22)$$

$$- \frac{1}{4} (1 + Pe + t_R \cdot Pe) \cdot \exp(Pe) \cdot \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4 \cdot t_R} \right)^{1/2} \cdot (1 + t_R) \right]$$

### 8.1.3.3 Contaminante con sorción y radiactivo

La ecuación de estado es:

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot R_f \cdot C$$

Condición inicial  $C(x,0) = 0$

Condiciones de contorno  $\left( -D \frac{\partial C}{\partial x} + v_x C \right) \Big|_{x=0} = v_x C_0 \exp(-\lambda t)$

$C(\infty, t) = 0$

Si además de sorción hay biodegradación o desintegración radiactiva, van Genuchten y Alves (1982) presentan la siguiente solución analítica:

$$C(x, t) = C_0 \left[ \frac{v_x^2}{2D_L \lambda} \exp \left( \frac{xv_x}{D_L} - \frac{\lambda t}{R_f} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x + \frac{v_x}{R_f} t}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) + \frac{U}{v_x + U} \exp \left( \frac{x(v_x - U)}{2D_L} \right) \right. \quad (8.23)$$

$$\left. \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - \frac{U}{R_f} t}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) + \frac{U}{v_x - U} \exp \left( \frac{x(v_x + U)}{2D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x + \frac{U}{R_f} t}{2 \sqrt{\frac{D_L}{R_f} t}} \right) \right]$$

con:  $U = \sqrt{v_x^2 + 4\lambda D_L}$

Cuando  $\lambda = 0$  la solución anterior se reduce a la ecuación (8.21).

### 8.1.3.4 Contaminante radiactivo en un medio finito.

La ecuación de estado de la que partimos es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C$$

con la condición inicial y de contorno:

Condición inicial  $C(x,0) = 0$  para  $0 < x < L$

Condiciones de contorno  $\left(-D \frac{\partial C}{\partial x} + v_x C\right)\Big|_{x=0} = v_x C_0$  para  $x = 0$

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x \rightarrow L} = 0$$

Asumimos que el flujo es en la dirección de  $x$  y la velocidad es constante, así como el coeficiente de dispersión.

La solución analítica para el caso de un medio finito es muy compleja, pero para tiempos largos, tenemos la solución de régimen estacionario siguiente (van Genuchten y Alves, 1982):

$$C(x, t) = C_0 \left[ \frac{\exp\left[\frac{(v_x - U)x}{2D_L}\right] + \frac{(U - v_x)}{(U + v_x)} \exp\left[\frac{(v_x + U)x}{2D_L} - \frac{UL}{D_L}\right]}{\left[\frac{(U + v_x)}{2v_x} - \frac{(U - v_x)^2}{2v_x(U + v_x)}\right] \exp\left(-\frac{UL}{D_L}\right)} \right] \quad (8.24)$$

donde  $U = \sqrt{v_x^2 + 4\lambda D_L}$

Similarmente, la solución para el caso de adsorción lineal se obtiene dividiendo los coeficientes  $D_L$  y  $v_x$  por el factor de retardo,  $R_f$ . Si existe variaciones temporales en la concentración de la fuente se aplica el principio de superposición.

## 8.2 INYECCIÓN INSTANTÁNEA DE CONTAMINANTE. PULSO DE CONTAMINANTE

Al inyectar un trazador de forma instantánea en un medio caracterizado por un flujo unidireccional uniforme, éste avanzará gradualmente y estará influenciado por el proceso de dispersión hidrodinámico.

Supongamos que tenemos una columna muy larga (la suponemos infinita) y con una sección de área  $A$ , rellena con material poroso, con porosidad  $n$ , Figura 23. Si hacemos pasar agua con un flujo constante en la dirección longitudinal de la columna y en un tiempo  $t = 0$  añadimos muy rápidamente una masa  $M$  de un trazador conservativo en el punto  $x=0$ , y suponemos que esa masa está distribuida en toda la sección de la columna con una anchura despreciable,  $\delta(x)$ . En este caso, la concentración inicial del trazador en la columna se puede describir por:

$$c(x, t = 0) = \frac{M}{n \cdot A} \delta(x)$$

donde  $C$  es la concentración del trazador y  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac.

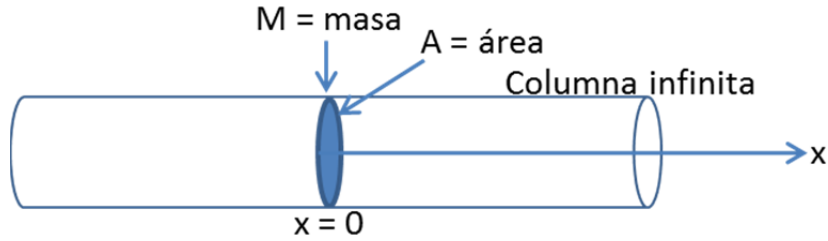


Figura 23. Esquema de una inyección instantánea en una columna infinita.

### 8.2.1 CONTAMINANTE CONSERVATIVO

Si consideramos un contaminante conservativo, la ecuación de estado es:

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

Con las condiciones inicial y de contorno siguientes:

Condición inicial  $C(x,0) = C_0 \cdot \delta(x)$  donde  $\delta(x)$  es el operador delta de Dirac

Condiciones de contorno  $C(-\infty, t) = 0 \quad t > 0$

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

La solución analítica a este problema es (Kreft y Zuber, 1978; Sauty, 1980):

$$C(x, t) = \frac{M}{n \cdot A} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left(\frac{-(x - vt)^2}{4D_L t}\right) \quad (8.25)$$

donde  $M$  es la masa inyectada por unidad de área [ $M/L^2$ ]. La masa inyectada también podemos expresarla como el producto de la concentración por el volumen:  $M = C_0 \cdot \text{Vol}$ .

La solución nos da la concentración del trazador en la columna para cada tiempo y posición.

La Figura 24 muestra el efecto del tiempo en el perfil de concentración del contaminante. El área bajo la curva es la misma, puesto que la masa inyectada es igual. A la misma velocidad, cuando el tiempo es el doble, se recorre el doble de distancia. A mayor tiempo el efecto de la dispersión se hace mayor y la curva se ensancha.



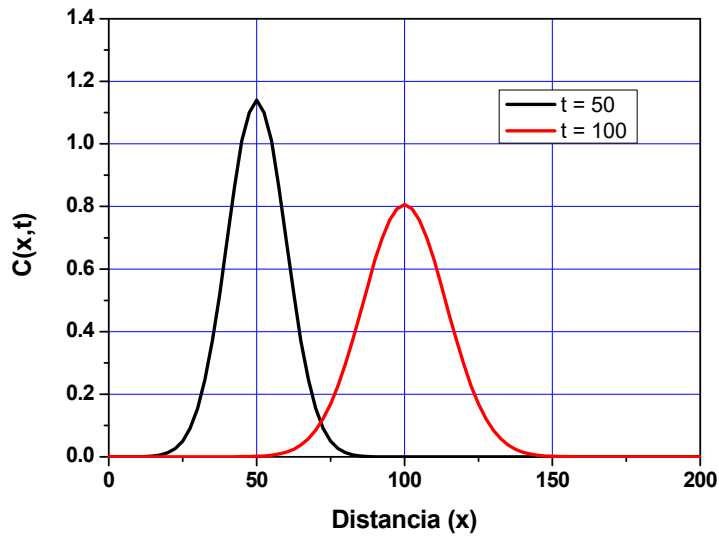


Figura 24. Efecto del tiempo transcurrido sobre el perfil de concentración de una fuente puntual.

Se observa, que para un tiempo  $t$ , el perfil de concentración como función de  $x$  es una gaussiana con media en  $\mu_x = v \cdot t$  y desviación estándar  $\sigma_x = \sqrt{2D_L t}$ . Por tanto, la concentración máxima ocurrirá a  $x = \mu_x = v \cdot t$ , es decir:

$$C_{m\acute{a}x}(x, t) = \frac{M}{2nA\sqrt{\pi D_L t}} \quad (8.26)$$

En forma adimensional (Sauty, 1980) la solución es:

$$C_R(t_R, Pe) = \frac{E}{\sqrt{t_R}} \exp\left(-\frac{Pe}{4t_R} (1 - t_R)^2\right) \quad (8.27)$$

con:

$$E = \sqrt{t_{Rm\acute{a}x}} \cdot \exp\left(\frac{Pe}{4t_{Rm\acute{a}x}} (1 - t_{Rm\acute{a}x})^2\right) \quad (8.28)$$

donde  $t_{Rm\acute{a}x} = \sqrt{1 + Pe^{-2}} - Pe^{-1}$  tiempo adimensional en el que se encuentra la concentración máxima.  $C_R = C/C_{m\acute{a}x}$ .

La ecuación (8.25) corresponde a una ecuación de Gauss, donde la distribución de concentración espacial de concentración,  $C(x)$ , es simétrica. Sin embargo, la distribución temporal de concentración (al representar la concentración relativa vs el tiempo adimensional para distintos valores del número de Peclet) presenta una rama descendente más extensa que la ascendente.

La función de distribución normal, distribución de Gauss es:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (8.29)$$

donde  $\mu$  es la media.  $\sigma$  la desviación típica o estándar y  $\sigma^2$  la varianza. La Figura 25 muestra la gráfica de una gaussiana.

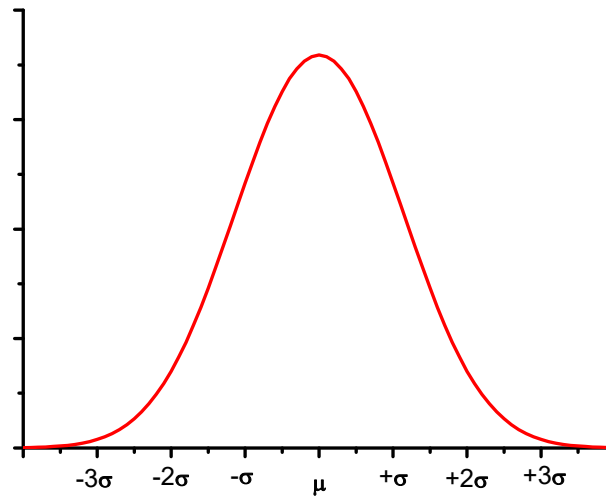


Figura 25. Distribución normal o de Gauss.

La similitud entre ambas ecuaciones, (8.25) y (8.29), nos permite ver la dispersión-difusión como procesos estadísticos-probabilísticos. Así, el 68,26 % de la masa total se encuentra a una distancia inferior o igual a  $\pm\sigma$  de la posición media ( $x = 0$ ); el 95,45 % de la masa se encuentra dentro de  $\pm 2\sigma$  de la posición media, y el 99.73% dentro de  $\pm 3\sigma$ .

### 8.2.2 CONTAMINANTE CON SORCIÓN

Si hay sorción y asumimos que se puede modelar como un proceso de equilibrio lineal  $S=K_d \cdot C$ , la solución analítica queda como (Schwartz & Zhang, 2003):

$$C(x, t) = \frac{M}{2n \cdot A \cdot R_f \sqrt{\pi \frac{D_L}{R_f} t}} \exp \left[ -\frac{\left( x - \frac{v_x}{R_f} t \right)^2}{4 \frac{D_L}{R_f} \cdot t} \right] \quad (8.30)$$

La Figura 26 muestra, para el mismo ejemplo de la Figura 24, el efecto de la adsorción (considerando un factor de retardo,  $R_f = 3.357$ ). Las curvas de recuperación se retrasan debido a la adsorción del trazador. Así, la curva para  $t = 100$ , que presenta el pico de concentración en  $x = 100$ , al presentar un  $R_f = 3.357$  se retrasa 3.357 veces, hasta  $x = 29.8$ . Ahora observamos que aunque hemos inyectado la misma masa, el área bajo las curvas no es igual. Bajo la curva del compuesto con adsorción el área ha disminuido un factor igual al factor de retardo. No ha desaparecido masa, sino que está adsorbida sobre el material sólido (Goltz y Huang, 2017; Kreft y Zuber, 1978), por ello en la ecuación (8.30) se ha dividido por el  $R_f$ .

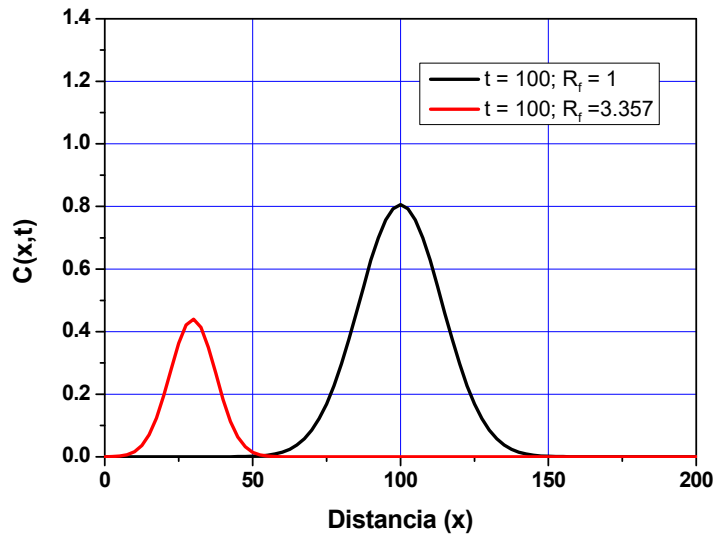


Figura 26. Efecto del factor de retardo para una fuente puntual.

### 8.2.3 CONTAMINANTE RADIOACTIVO

Si el contaminante se degrada por medio de un mecanismo de primer orden, o es un contaminante radiactivo, entonces la ecuación de transporte queda:

$$C(x, t) = \frac{M}{n \cdot A \sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left(\frac{-(x - vt)^2}{4D_L t}\right) \exp(-\lambda t) \quad (8.31)$$

La Figura 27 muestra el efecto de la desintegración para el mismo ejemplo de la Figura 24, pero considerando ahora que el contaminante es radiactivo, con un periodo de semidesintegración  $T_{1/2} = 50$  días. El área bajo la curva disminuye, pues el contaminante va decayendo, transformándose en otro elemento que puede ser contaminante o no.

La concentración máxima del contaminante se encuentra cuando el término  $x-vt$  es igual a cero, es decir, cuando ha transcurrido el tiempo suficiente para que llegue a la posición  $x$  con la velocidad  $v$ . Ahora la ecuación queda:

$$C_{m\acute{a}x}(x_{m\acute{a}x}, t) = \frac{M}{n \cdot A \sqrt{4\pi D_L t}} \exp(-\lambda t) \quad (8.32)$$

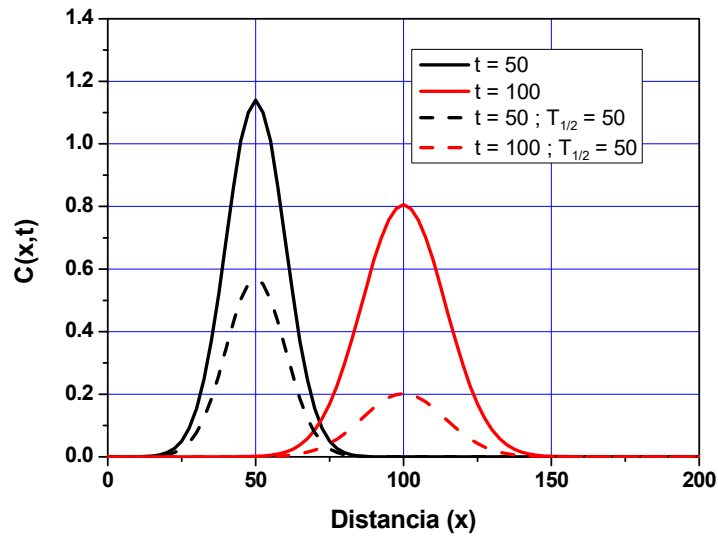


Figura 27. Efecto de la desintegración para una fuente puntual.

#### 8.2.4 CONTAMINANTE CON SORCIÓN Y RADIATIVO

Si hay sorción, que se puede modelar como un proceso de equilibrio lineal  $S=K_d \cdot C$ , y el contaminante es radiactivo (o se degrada por medio de un mecanismo de primer orden), entonces la solución analítica a la ecuación de transporte queda:

$$C(x, t) = \frac{M}{2n \cdot A \cdot R_f \sqrt{\pi \frac{D_L}{R_f} t}} \exp \left[ -\frac{\left(x - \frac{v_x}{R_f} t\right)^2}{4 \frac{D_L}{R_f} \cdot t} - \lambda t \right] \quad (8.33)$$

#### EJEMPLO

Se dispone de una columna muy larga con sección de  $A = 50 \text{ cm}^2$ , por la que hace pasar agua a una velocidad  $v = 2 \text{ cm/d}$  (que es realista para el agua subterránea), y que tiene un coeficiente de dispersión  $D_L = 10 \text{ cm}^2/\text{d}$  y una porosidad de  $n = 0.4$ . Añadimos un trazador conservativo muy rápidamente en mitad de la columna en una sección de anchura despreciable. La masa de trazador añadida es  $M = 1500 \text{ mg}$ . (Basado en un ejemplo de J.A. Cunningham, 2005).

(a) Dibujar conjuntamente el perfil de concentración del trazador ( $C$  vs.  $x$ ) para el tiempo  $t_1 = 50$  días y  $t_2 = 200$  días. Para cada curva, determinar  $C_{\text{máx}}$  y el valor de  $x$  al que se obtiene.

(b) Para cada curva, calcular la desviación estándar de la distribución espacial,  $\sigma_x$ , dibujando el valor de  $x$  que corresponde a las distancias de  $\pm\sigma_x$  y  $\pm 2\sigma_x$  desde la posición del pico.

(c) ¿Cómo afecta el tiempo transcurrido a la concentración del pico?, ¿y cómo a su localización?

### Solución:

a) Se trata de un pulso instantáneo, la solución viene dada por la ecuación:

$$C(x, t) = \frac{M}{n \cdot A \sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{4D_L t}\right)$$

que nos da la concentración de trazador en la columna para cada tiempo y posición. La Figura 28 muestra los perfiles de concentración que se obtienen, y se puede observar la concentración máxima y su localización.

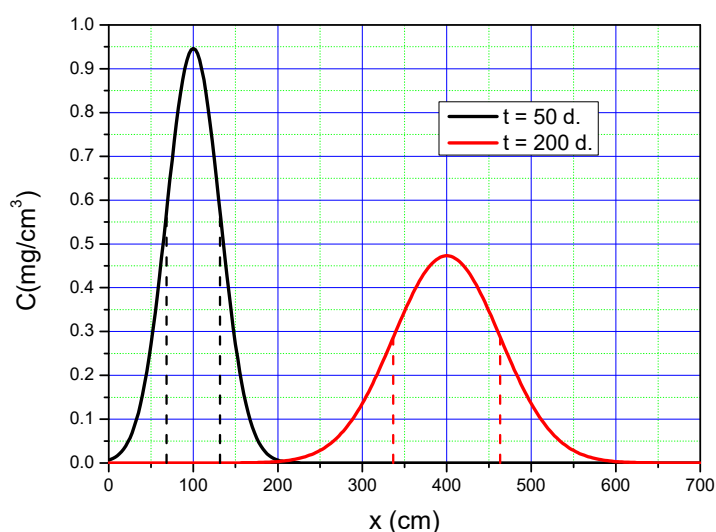


Figura 28. Perfiles de concentración a los 50 y 200 días.

La  $C_{\text{máx}}$  al cabo de 50 días es  $0.946 \text{ mg/cm}^3$  y está localizada a  $100 \text{ cm}$  ( $x = v \cdot t$ ).

La  $C_{\text{máx}}$  al cabo de 200 días es  $0.473 \text{ mg/cm}^3$  y está localizada a  $400 \text{ cm}$ .

La concentración máxima se puede obtener también por la fórmula:

$$C_{\text{máx}}(x, t) = \frac{M}{nA\sqrt{4\pi D_L t}} = \frac{1500 \text{ mg}}{0.4 \cdot 50 \text{ cm}^2 \sqrt{4\pi \cdot 10 \frac{\text{cm}^2}{\text{día}} \cdot 50 \text{ días}}} = 0.946 \text{ mg/cm}^3$$

b) La desviación estándar  $\sigma_x$

$$\sigma_x = \sqrt{2D_L t}$$

Al cabo de 50 días  $\sigma_x = 31,6 \text{ cm}$ , y  $2\sigma_x = 63,2 \text{ cm}$  para 200 días  $\sigma_x = 63,2 \text{ cm}$  y  $2\sigma_x = 126,4 \text{ cm}$ . En la Figura 28 está marcado únicamente el  $\sigma_x$ .

La desviación estándar es una medida de la expansión de la pluma.

c) La  $C_{\text{máx}}$  varía con la inversa de la raíz cuadrada del tiempo:

$$C_{m\acute{a}x.} \sim \frac{1}{\sqrt{t}}$$

La localización,  $x_{m\acute{a}x}$  varía linealmente con el tiempo:

$$x_{m\acute{a}x.} = v \cdot t$$

Al pasar de 50 a 200 días, cuatro veces más, la máxima concentración decrece a la mitad (de 0,95 a 0,47 mg/cm<sup>3</sup>) y la pluma se mueve hacia gradientes más bajos por un factor de 4 (de 100 a 400 cm).

Ahora supongamos que en vez del trazador conservativo, se inyecta <sup>89</sup>Sr, que experimenta una desintegración radiactiva de primer orden. El periodo de semidesintegración del <sup>89</sup>Sr es de 50 días, lo que significa que tiene una constante de desintegración de primer orden  $\lambda = 0.014 \text{ d}^{-1}$ .

$$A = A_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{0,693}{50} = 0,014 \text{ d}^{-1}$$

Supongamos que inyecta 1500 mg de <sup>89</sup>Sr y que todas las demás condiciones son las mismas ya dadas.

(a) Para el <sup>89</sup>Sr, dibuje de nuevo el perfil de concentración (C vs. x) para los tiempos  $t_1 = 50$  días y  $t_2 = 200$  días. Compare con el trazador conservativo. ¿Cómo afecta la desintegración de primer orden a la concentración en el pico,  $C_{m\acute{a}x}$ ?

(b) ¿Qué fracción de la masa original permanece en el tiempo  $t_1 = 50$  días y al tiempo  $t_2 = 200$  días?

### Solución

a) Entonces la solución a la ecuación de transporte se modifica a:

$$C(x, t) = \frac{M}{n \cdot A \sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left(\frac{-(x - vt)^2}{4D_L t}\right) \exp(-\lambda t)$$

La Figura 29 muestra los perfiles de concentración del trazador considerándolo conservativo y radiactivo.

La  $C_{m\acute{a}x}$  se reduce por un factor de  $e^{-\lambda t}$ .

$$C_{m\acute{a}x}(x, t) = \frac{M}{nA\sqrt{4\pi D_L t}} \exp(-\lambda t)$$

La  $C_{m\acute{a}x}$  al cabo de 50 días es ahora 0,47 mg/cm<sup>3</sup> y a los 200 días de 0,029 mg/cm<sup>3</sup>. Sin embargo la expansión no está afectada por el proceso de desintegración radiactiva. Todas las concentraciones decrecen justamente un factor de  $e^{-\lambda t}$ .

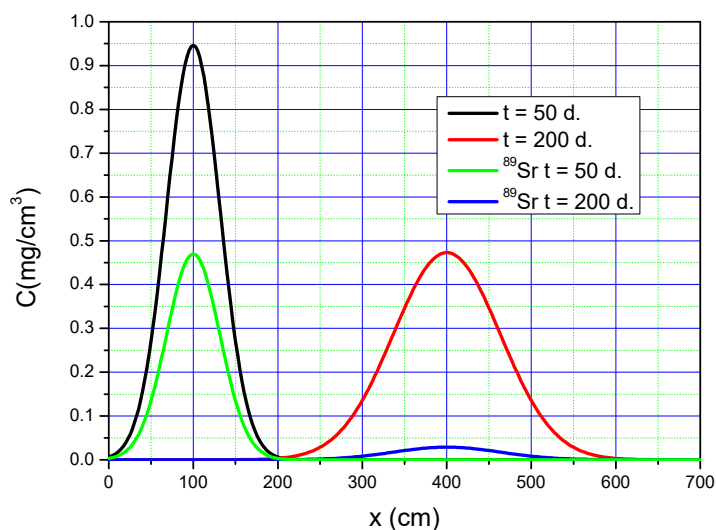


Figura 29. Perfiles de concentración a los 50 y 200 días con y sin radiactividad.

b) Al tiempo  $t_1$ :  $e^{-\lambda t} = 0,50$  queda el 50% de la masa original.

Al tiempo  $t_2$ :  $e^{-\lambda t} = 0,061$  queda el 6% de la masa original.

Podría pensarse que este problema no es realista, porque no es posible inyectar la masa de trazador en un espesor  $\Delta x$  despreciable. Supongamos que, en cambio, se inyecta la masa  $M$  durante un intervalo de tiempo  $\Delta t$ , un pulso. Entonces la concentración en la columna viene dada por la siguiente ecuación:

$$C(x, t) = \frac{1}{2} C_0 \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{0.5v\Delta t_{pulso} - (x - vt)}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{0.5v\Delta t_{pulso} + (x - vt)}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \exp(-\lambda t)$$

donde  $C_0$  es la concentración inicial que resulta de la adición del pulso.

Suponga que inyecta 1500 mg de trazador conservativo durante el tiempo  $-7,5 \text{ días} < t < 7,5 \text{ días}$ , es decir  $\Delta t_{pulso} = 15 \text{ días}$ .

(a) ¿Cuál es la concentración inicial,  $C_0$ , que resulta de la adición del pulso?

(b) Dibuje la distribución espacial del trazador, es decir ( $C$  vs.  $x$ ) para los tiempos  $t_1 = 50 \text{ días}$  y  $t_2 = 200 \text{ días}$  tiempos. Compare la altura de los picos y la amplitud de estos con los calculados anteriormente.

(c) Se inyecta 1500 mg de  $^{89}\text{Sr}$  durante el periodo de tiempo  $-7,5 \text{ días} < t < 7,5 \text{ días}$ . Dibuje la distribución espacial del  $^{89}\text{Sr}$  para los tiempos  $t_1 = 50 \text{ días}$  y  $t_2 = 200 \text{ días}$ . Compare los resultados obtenidos para los mismos tiempos en el problema anterior.

### Solución

a) El volumen sobre el que se inyecta es:  $\text{Vol} = Q \cdot \Delta t_{pulso}$ , como el caudal  $Q = q \cdot A$  y también tenemos que  $q = n \cdot v$ , el volumen se calcula:

$$Vol = n \cdot v \cdot A \cdot \Delta t_{pulso} = 0,4 \cdot 2 \frac{cm}{día} \cdot 50cm^2 \cdot 15días = 600cm^2$$

Por tanto:

$$C_0 = \frac{M}{Vol} = 2,5mg/cm^3$$

Aplicando la ecuación anterior se obtiene la Figura 30.

b) La  $C_{máx.}$  al cabo de 50 días es  $0.912 \text{ mg/cm}^3$  y está localizada a  $100 \text{ cm}$  ( $x = v \cdot t$ ).

La  $C_{máx.}$  al cabo de 200 días es  $0.469 \text{ mg/cm}^3$  y está localizada a  $400, \text{cm}$ .

No hay un cambio muy significativo entre el pulso y la inyección instantánea. Además, al ir aumentando el tiempo la diferencia se hace cada vez menor. Si superponemos las gráficas se observa que la expansión de la pluma es prácticamente indistinguible entre el pulso finito y el pulso instantáneo. Por tanto, el uso de la aproximación para la inyección instantánea es adecuado y se hace despreciable para tiempos largos.

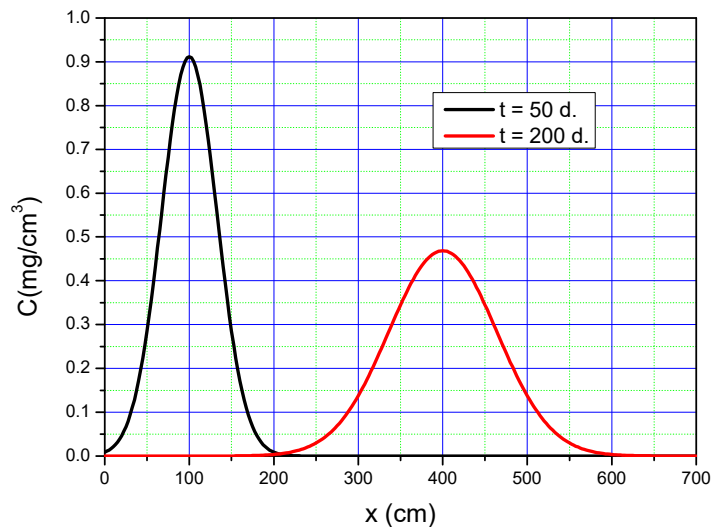


Figura 30. Perfiles de concentración a los 50 y 200 días para el pulso de inyección.

c) La Figura 31 muestra los perfiles de concentración del  $^{89}\text{Sr}$  radiactivo para el caso de la inyección instantánea y el pulso. El resultado es esencialmente indistinguible, únicamente se puede apreciar para el caso de los 50 días.



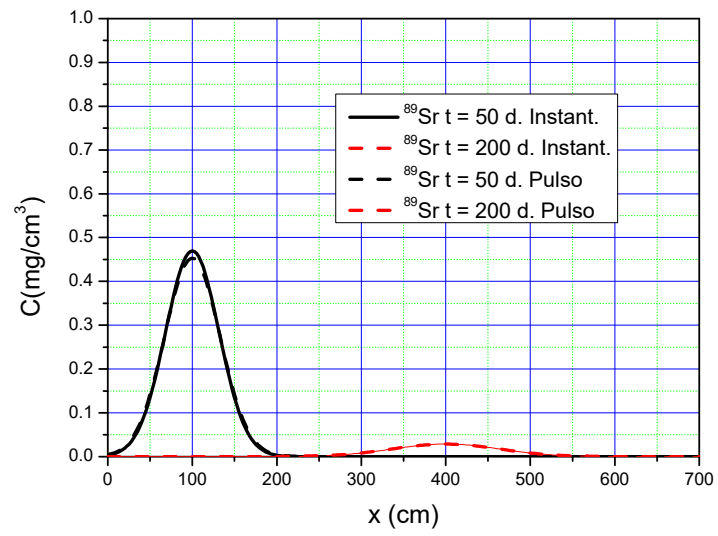


Figura 31. Perfiles de concentración a los 50 y 200 días para  $^{89}\text{Sr}$  considerando la inyección instantánea y el pulso.

## 9 SOLUCIONES ANALÍTICAS. TRANSPORTE 2-D.

El transporte 2D es interesante para el caso de acuíferos muy estrechos, donde el contaminante esté bien mezclado en todo su espesor y el gradiente de concentración vertical pueda considerarse despreciable.

### 9.1 INYECCIÓN PUNTUAL CONTINUA EN UN ACUÍFERO 2D CON FLUJO UNIFORME

Una fuente puntual inyectada en forma continua en un medio 2D producirá una pluma de contaminación como la mostrada en la Figura 32. El contaminante se extiende a lo largo del eje de flujo debido a la dispersión longitudinal, y normal al eje debido a la dispersión transversal, Figura 33. Este es el tipo de contaminación que se produce cuando se usa un pozo de inyección, que sería una fuente puntual.

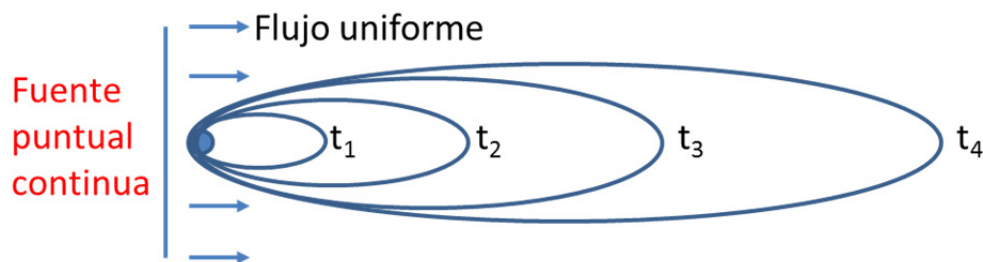


Figura 32. Movimiento de una pluma de contaminación proveniente de una fuente puntual continua (Modificado de Freeze & Cherry, 1979).

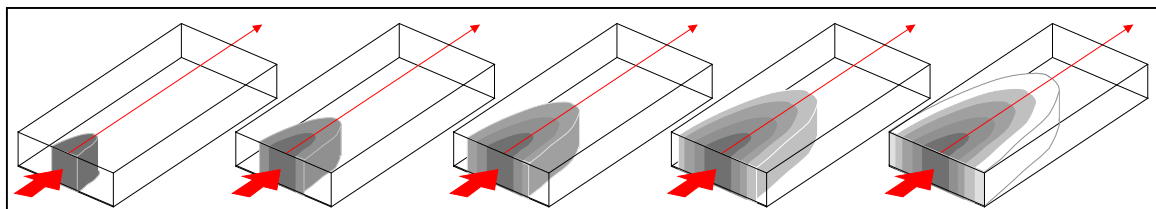


Figura 33. Esquema del movimiento dispersivo en 2D (L-C. Chuang, 1998)

La ecuación general de estado para el transporte en 2D es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (9.1)$$

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

Condición inicial  $C(x,y,0) = 0 \quad -\infty < x < +\infty \quad -\infty < y < +\infty$

$$\text{Condiciones de contorno} \quad \left(-D_L \frac{\partial C}{\partial x} + v_x C\right)\Big|_{x=0,y=0} = C_0 \cdot Q \quad t > 0$$

$$C(\pm\infty, y, t) = 0 \quad t > 0$$

$$C(x, \pm\infty, t) = 0 \quad t > 0$$

Este problema fue resuelto por Bear (1972) para **condiciones estacionarias** (el tiempo se aproxima a infinito), es decir, cuando el crecimiento de la pluma se ha estabilizado. Esta solución tiene la siguiente expresión:

$$C(x, y) = \frac{C_0 \cdot (Q/b)}{2\pi\sqrt{D_L D_T}} \exp\left(\frac{v_x x}{2D_L}\right) K_0(B) \quad (9.2)$$

con B:

$$B = \sqrt{\frac{v_x^2 x^2}{4D_L^2} + \frac{v_x^2 y^2}{4D_L D_T}} \quad (9.3)$$

donde  $K_0(B)$  es la función de Bessel modificada de segundo tipo y orden cero (los valores se encuentran tabulados). Esta ecuación no se puede utilizar cuando  $D_L$  se aproxima a cero, pues implicaría que la concentración se aproxima a infinito. Ante esta imposibilidad física, para valores pequeños de  $D_L$  se debe usar como aproximación la ecuación en 1D (8.18) de Sauty (1980) para tiempos grandes (Fetter, 1992).

La Figura 34 muestra un ejemplo del resultado que produce una fuente puntual continua.

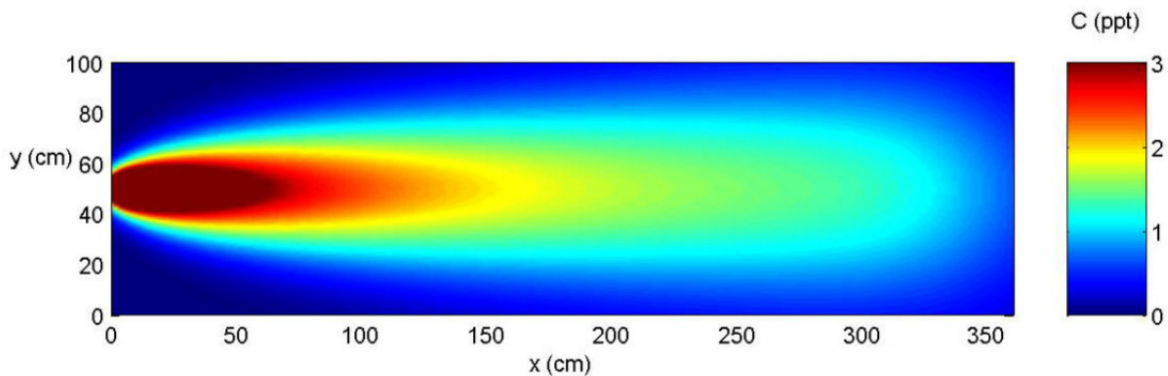


Figura 34. Pluma de contaminación producida por una inyección puntual continua en un sistema 2D. Contorno de concentración para una pluma gaussiana originada a  $x=0$ ,  $y=50$  y  $z=0$  cm. Los perfiles de concentración son gaussianas. (Anderson, 2008).

La ecuación anterior se puede también resolver para **régimen transitorio**, y la solución aportada por Y. Emsellem (1975) (Espinoza, 2004) es:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 \cdot (Q/b)}{4\pi\sqrt{D_L D_T}} \exp\left(\frac{v_x x}{2D_L}\right) [W(0, B) - W(t_D, B)] \quad (9.4)$$

Donde  $W(t_D, B)$  es la función de pozo derivada por Hantush (1956), con

$$t_D = \frac{v_x^2 t}{D_L}$$

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

## 9.2 INYECCIÓN PUNTUAL INSTANTÁNEA DE CONTAMINANTE. PULSO DE CONTAMINANTE.

Si inyectamos un pulso instantáneo de un contaminante en un sistema 2D, el contaminante avanzará en el sentido del flujo y se irá expandiendo según su coeficiente de dispersión longitudinal y transversal al eje de flujo. La Figura 35 muestra un esquema del movimiento de un contaminante inyectado mediante una fuente puntual instantánea.

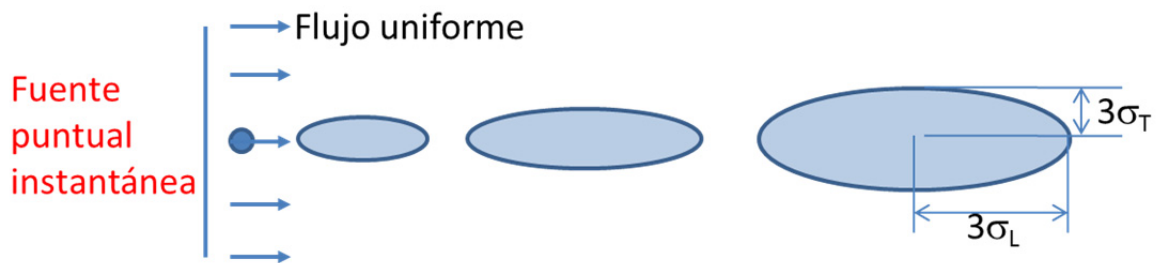


Figura 35. Movimiento de una pluma de contaminación proveniente de una fuente puntual instantánea. (Modificado de Freeze & Cherry, 1979).

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

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

Condición inicial  $C(x, y, 0) = 0 \quad -\infty < x < +\infty \quad -\infty < y < +\infty$

Condiciones de contorno  $C(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x - x_0, y - y_0)$

$$C(\pm\infty, y, t) = 0 \quad t > 0$$

$$C(x, \pm\infty, t) = 0 \quad t > 0$$

Este problema fue resuelto por De Josselin De Jong (1958). Si el trazador con concentración  $C_0$  se inyecta en el punto  $(x_0, y_0)$  en un flujo bidimensional de área  $A$ , la concentración en el punto  $(x, y)$  en el tiempo  $t$  después de la inyección es:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 \cdot A}{4\pi t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{[(x - v_x t) - x_0]^2}{4D_L \cdot t} - \frac{(y - y_0)^2}{4D_T \cdot t} \right] \quad (9.5)$$

Si el punto de inyección es el origen de coordenadas, la ecuación (9.5) se reduce a:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 \cdot A}{4\pi t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{(x - v_x t)^2}{4D_L t} - \frac{y^2}{4D_T t} \right] \quad (9.6)$$

La concentración máxima se encuentra en el centro de la pluma o centro de masa. Si el flujo es en la dirección  $x$ , la inyección está localizada en  $x_0 = 0$  e  $y_0 = 0$ , el centro de masa de una sustancia conservativa en el momento  $t$  estará localizada en  $x = vt$  y  $y=0$ , con lo que la ecuación anterior queda:

$$C_{m\acute{a}x} = \frac{C_0 \cdot A}{4\pi t \sqrt{D_L D_T}} \quad (9.7)$$

Si inyectamos una masa  $M$  de un contaminante en un acuífero horizontal confinado de anchura  $b$ , la ecuación que nos permite predecir la situación de la pluma de contaminación es:

$$C(x, y, t) = \frac{M/b}{4\pi t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{(x - v_x t)^2}{4D_L t} - \frac{y^2}{4D_T t} \right] \quad (9.8)$$

La forma física es una gaussiana, lo cual se hace evidente cuando la expresamos de la siguiente forma:

$$C(x, y, t) = \frac{M}{b} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x}} \exp \left[ -\frac{(x - m)^2}{2\sigma_x^2} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y}} \exp \left[ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right] \quad (9.9)$$

con:

$$m = v \cdot t$$

$$\sigma_x = \sqrt{2D_L t}$$

$$\sigma_y = \sqrt{2D_T t}$$

La representación de la pluma de contaminación se muestra en la Figura 36. El centro de masa se encontrará en el punto  $x = v \cdot t$ .

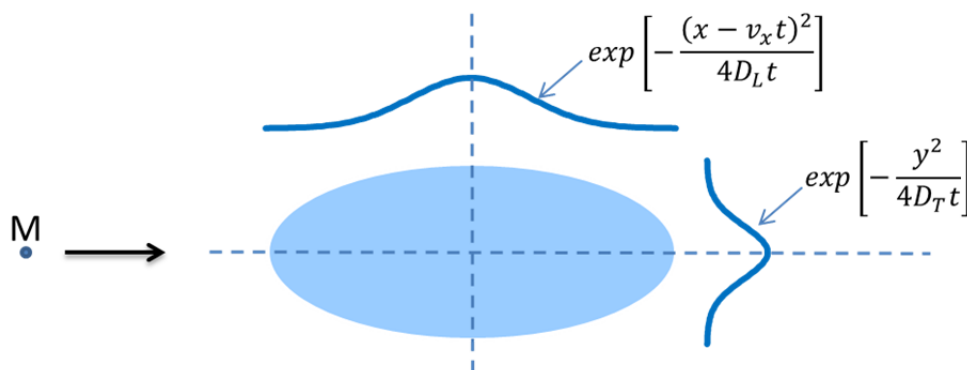


Figura 36. Distribuciones gaussianas en la pluma de contaminación.

Como siempre, si hay sorción debemos dividir  $v$ ,  $D_L$  y  $D_T$  por el factor de retardo  $R_f$ , y el centro de masa estará en  $x = v \cdot t / R_f$ .

Si además hay desintegración la solución es:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 \cdot A}{4\pi t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{(x - v_x t)^2}{4D_L t} - \frac{y^2}{4D_T t} - \lambda t \right] \quad (9.10)$$

Existe otra solución, obtenida por Hunt (1978) y Bear (1979):

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi n_e t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{[(x - v_x t) - x_0]^2}{4D_L \cdot t} - \frac{(y - y_0)^2}{4D_T \cdot t} \right] \quad (9.11)$$

La Figura 37 muestra la distribución gaussiana de concentraciones que se produce en función del tiempo transcurrido desde la inyección, la media en  $x = vt$  e  $y = 0$ , y las desviaciones estándar  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  definida por la raíz cuadrada de  $2D_x t$  o  $2D_y t$  respectivamente. La Figura 37 muestra la posición del centro de masa para tres tiempos. El 99,7% de la masa total, para cada tiempo, está contenida dentro de la elipse definida por la media y tres veces la desviación estándar a lo largo de los ejes  $x$  e  $y$ . La Figura 38 muestra la pluma que se obtiene en una modelización de una fuente puntual instantánea.

$$\sigma_x = \sqrt{2D_L t}$$

$$\sigma_y = \sqrt{2D_T t}$$

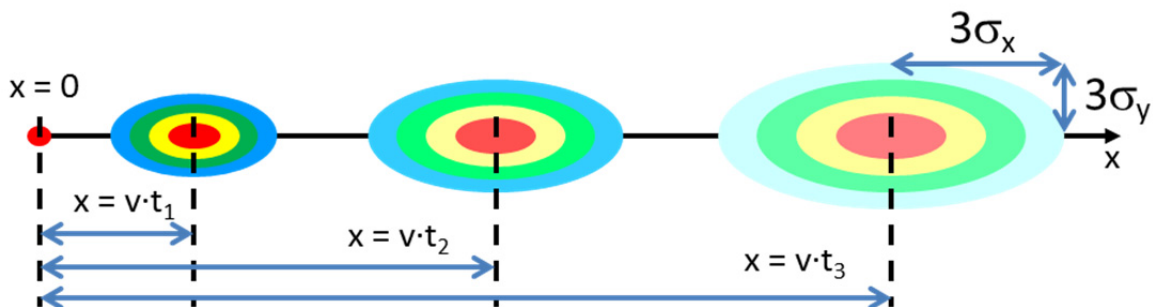


Figura 37. Pluma de distribución gaussiana producida por una fuente puntual instantánea.

Para un tiempo  $t$ , la concentración máxima aparece a  $x_{m\acute{a}x} = vt$  y  $y_{m\acute{a}x} = 0$  y la máxima concentración es igual a:

$$C_{max} = C(x_{max}, y_{max}, t) = \frac{M/b}{4\pi n_e t \sqrt{D_x D_y}} \quad (9.12)$$

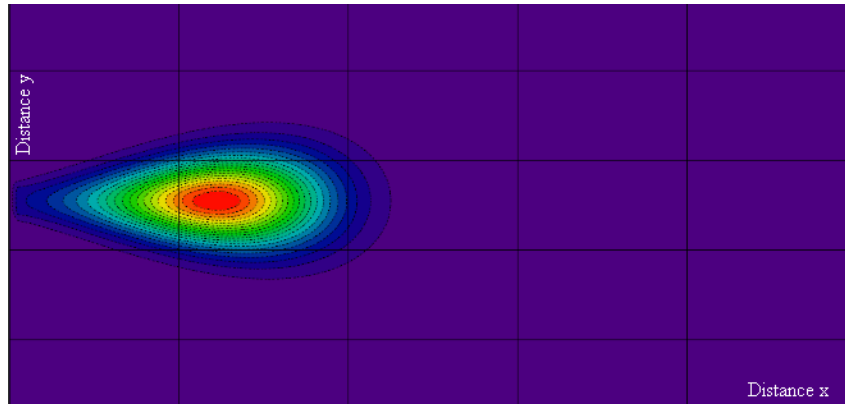


Figura 38. Pluma de contaminación producida por una fuente puntual instantánea (Baresel y Molin, 2006).

### 9.3 INYECCIÓN LINEAL CONTINUA. CONDICIÓN DE CONTORNO DE TIPO 1.

Supongamos un acuífero homogéneo como un plano 2D que se extiende hacia el infinito en la dirección  $x$ , con velocidad del agua uniforme en  $x$ . Y una fuente de contaminación lineal de longitud finita centrada en el origen  $y$  que se extiende desde  $-Y/2$  hasta  $Y/2$  en la dirección transversal y concentración  $C_0$ , como la representada en la Figura 39. Si asumimos que el contaminante se puede adsorber mediante una adsorción lineal en equilibrio y es radiactivo, para un acuífero donde previamente no hay contaminación, la ecuación de estado es:

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

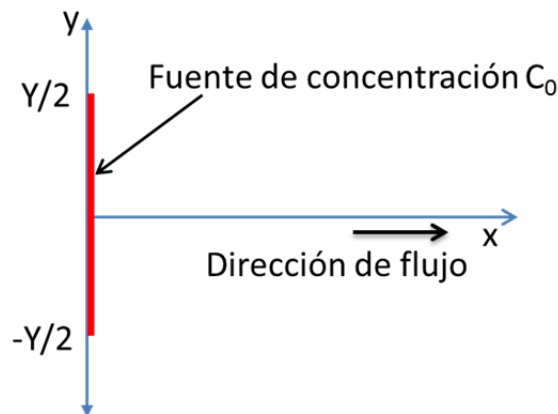


Figura 39. Esquema de una fuente lineal en un acuífero 2D.

Cleary y Ungs (1978) y Wexler (1992) obtuvieron una solución analítica exacta para el problema anterior, que incluye una integral que debe evaluarse numéricamente. Domenico y Robbins (1985), Domenico (1987) y Wiedemeier et al., (1999) desarrollaron una aproximación, basada en sus estudios 3D que veremos en detalle en el apartado de transporte 3D, que únicamente no es válida para tiempos cortos y cerca de la fuente, esta solución es:

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{C_0}{4} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x}} \right] \right\} \\
& \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t / R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x) / v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t / R_f}} \right) \\
& \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) \right]
\end{aligned} \tag{9.13}$$

Si suponemos una fuente lineal con  $Y = 1$  de un contaminante conservativo, con dispersividad longitudinal  $\alpha_x = 0.1$  y transversal  $\alpha_y = 0.01$ , podemos obtener un resultado como el mostrado en la Figura 40. El perfil de concentración del contaminante en el eje  $y$  para  $x = 0.375$  y  $x = 1.125$  se presenta en la Figura 41. Si para ese mismo ejemplo suponemos que el contaminante se adsorbe presentando un  $R_f = 2$ , el resultado será el mostrado en la Figura 42.

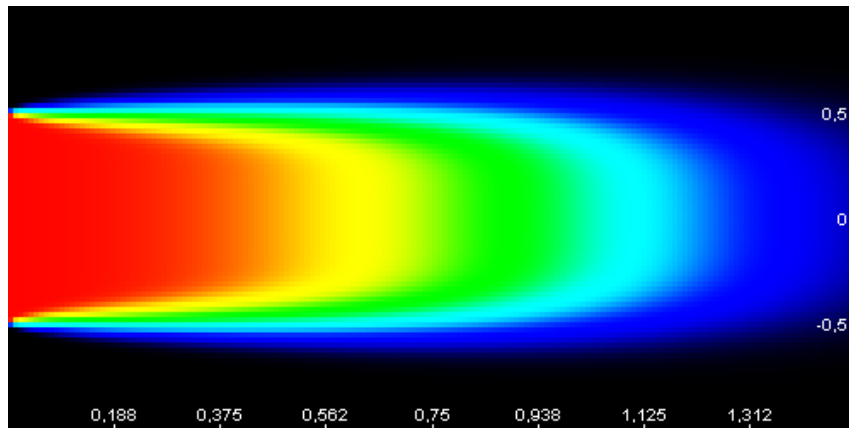


Figura 40. Pluma de contaminación 2D de una fuente lineal de anchura  $Y = 1$ .

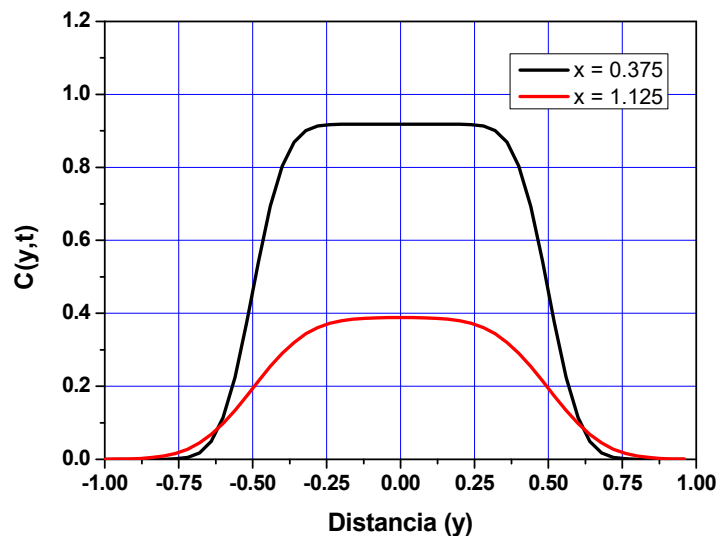


Figura 41. Perfil de contaminación en el eje  $y$  en los puntos  $x = 0.375$  y  $x = 1.125$ .



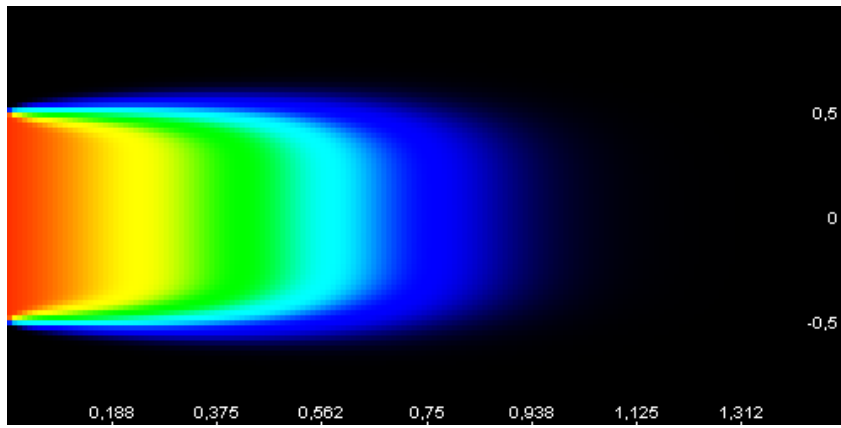


Figura 42. Pluma de contaminación del ejemplo anterior con  $Re = 2$ .

## 10 SOLUCIONES ANALÍTICAS. TRANSPORTE 3-D.

Las soluciones analíticas para transporte multidimensional dependen de la naturaleza de la fuente, que de nuevo distinguiremos entre fuente continua y fuente puntual instantánea, y de la geometría de la fuente que puede ser puntual, lineal o planar. En la solución deben incorporarse las dispersiones longitudinal y transversal (Paladino et al., 2018). La Figura 43 muestra el esquema del movimiento dispersivo para una fuente puntual en 3D.

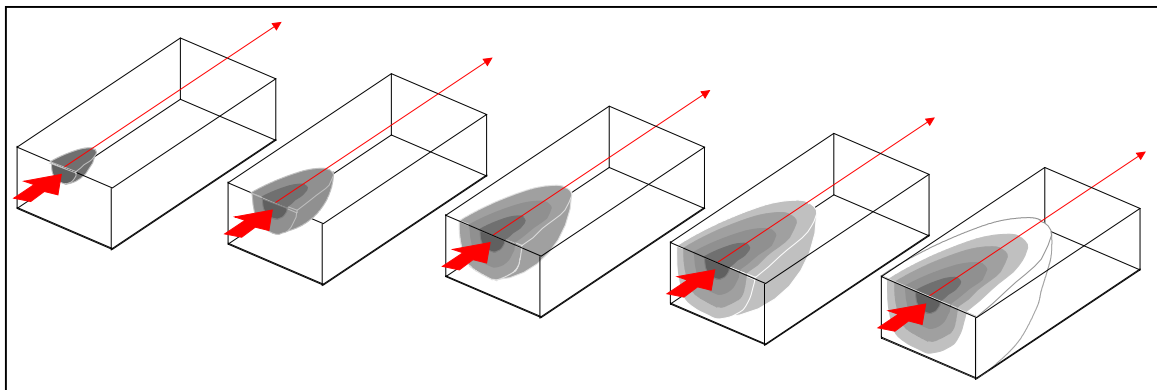


Figura 43. Esquema del movimiento dispersivo en 3D (L-C. Chuang, 1998).

### 10.1 FUENTES CONTINUAS DE CONTAMINANTE. FUENTE PLANA FINITA.

Podemos suponer tres dominios diferentes, Figura 44. Los dominios (a) y (b) son problemas 3D, mientras que el dominio (c) se reduce a un problema 2D. Las siguientes soluciones, obtenidas por Domenico y Robbins (1985) y Domenico (1987) son aproximaciones, pues la solución exacta es mucho más compleja.

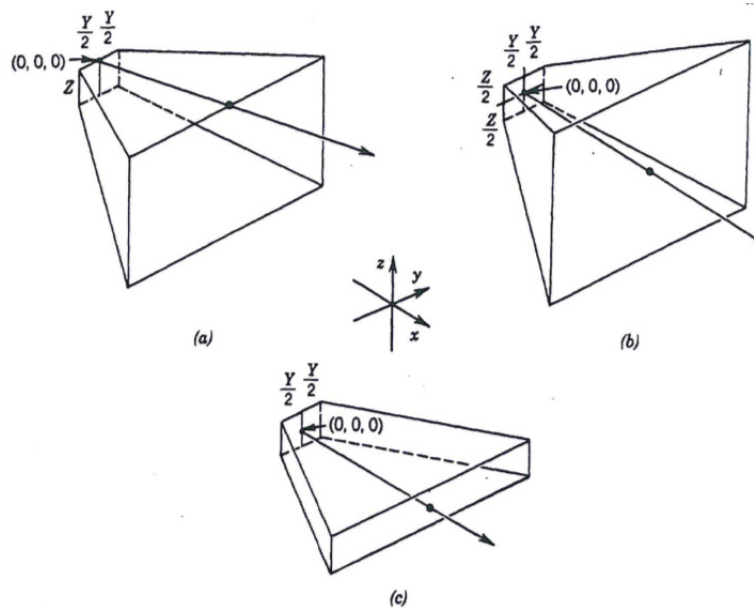


Figura 44. Geometrías de migración de contaminantes idealizadas para varias direcciones de propagación transversales (Domenico y Robbins, 1985).

### 10.1.1 DOMINIO (A)

Sería el caso de una fuente que inicia en el nivel freático de tal manera que la dispersión es solo hacia abajo. Fuente plana desde  $Y/2$  a  $-Y/2$  y desde 0 hasta  $Z$ , Figura 45.

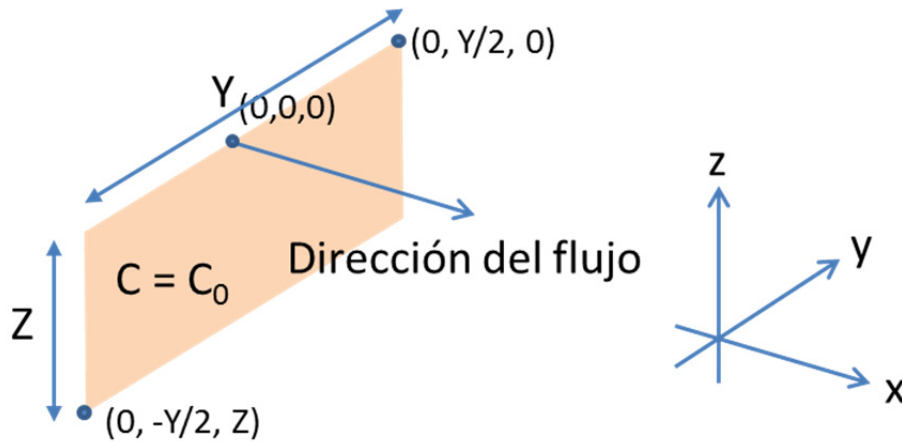


Figura 45. Esquema para dispersión sólo en la dirección  $z$ .

La ecuación de estado para el trazador conservativo es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (10.1)$$

La condición inicial es:  $C(x, y, z, 0) = 0$  Para  $0 \leq x < +\infty$ ;  $-\infty < y < +\infty$   $-\infty < z \leq 0$

Condiciones de contorno  $C(0, y, z, t) = C_0$   $t \geq 0$ ;  $-Y/2 \leq y \leq Y/2$ ;  $-Z \leq z \leq 0$

$C(0, y, z, t) = 0$   $t \geq 0$ ; todos los otros  $y, z$

$C(\infty, y, z, t) = 0$   $t \geq 0$ ; todos los  $y, z$

$C(x, \pm\infty, z, t) = 0$   $t \geq 0$ ; todos los  $x, z$

$C(x, y, -\infty, t) = 0$   $t \geq 0$ ; todos los  $x, y$

$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$   $t \geq 0$ ; todos los  $x, y$

La solución es (Domenico y Robbins, 1985):

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + Y/2}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - Y/2}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + Z}{2\sqrt{D_z \frac{x}{v_x}}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - Z}{2\sqrt{D_z \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \quad (10.2)$$

Si estamos en el plano de simetría, es decir  $y = z = 0$ , la ecuación (10.2) se reduce a:

$$C(x, 0, 0, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{Y}{4\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) \operatorname{erf} \left( \frac{Z}{2\sqrt{D_z \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \quad (10.3)$$

Incorporando desintegración o degradación y retardo por adsorción, la solución para el transporte multidimensional se hace:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp \left\{ \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda R_f D_x}{v_x^2}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t / R_f \sqrt{1 + (4\lambda R_f D_x) / v_x^2}}{2\sqrt{D_x t / R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + Z}{2\sqrt{D_z x / v_x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - Z}{2\sqrt{D_z x / v_x}} \right) \right] \quad (10.4)$$

En muchos problemas de transporte el componente difusivo es despreciable ( $D^* = 0$ ) y se puede hacer la siguiente simplificación en los últimos denominadores:

$$D_y \frac{x}{v_x} = \alpha_y v_x \frac{x}{v_x} = \alpha_y x$$

quedando la ecuación (10.4) de la siguiente forma:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda \alpha_x}{v_x / R_f}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t / R_f \sqrt{1 + (4\lambda \alpha_x R_f) / v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t / R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + Z}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - Z}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right) \right] \quad (10.5)$$

Esta simplificación también se hará en las próximas ecuaciones (10.7), (10.8), (10.9) y (10.11).

Si queremos la concentración a lo largo del eje de simetría la ecuación es:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{2} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t/R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x R_f)/v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t/R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{Y}{4\sqrt{\alpha_y x}} \right) \operatorname{erf} \left( \frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right) \right] \quad (10.6)$$

### 10.1.2 DOMINIO (B)

Las mayúsculas Y y Z representan el ancho y alto de la fuente respectivamente. Estamos en el centro de la fuente plana, que se extiende en las dos direcciones Y y Z, Figura 46. Ahora el término Z se hace Z/2.

La ecuación de estado es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

La condición inicial es:  $C(x, y, z, 0) = 0$  Para  $0 \leq x < +\infty$ ;  $-\infty < y < +\infty$   $-\infty < z \leq 0$

Condiciones de contorno	$C(0, y, z, t) = C_0$	$t \geq 0$ ; $-Y/2 \leq y \leq Y/2$ ; $-Z/2 \leq z \leq Z/2$
	$C(0, y, z, t) = 0$	$t \geq 0$ ; todos los otros $y, z$
	$C(\infty, y, z, t) = 0$	$t \geq 0$ ; todos los $y, z$
	$C(x, \pm\infty, z, t) = 0$	$t \geq 0$ ; todos los $x, z$
	$C(x, y, \pm\infty, t) = 0$	$t \geq 0$ ; todos los $x, y$

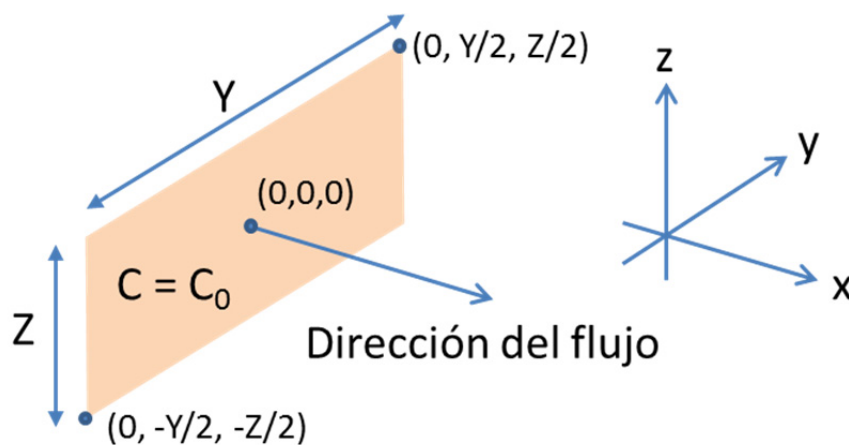


Figura 46. Esquema para la dispersión desde el centro de la fuente.

La solución analítica es (Domenico, 1987):

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + Z/2}{2\sqrt{D_z \frac{x}{v_x}}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - Z/2}{2\sqrt{D_z \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \quad (10.7)$$

Esta ecuación al considerar la sorción y la desintegración se transforma a:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t/R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x R_f)/v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t/R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + \frac{Z}{2}}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - \frac{Z}{2}}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right) \right] \quad (10.8)$$

Utilizando la ecuación (10.8), para una fuente con  $Y = 3$  y  $Z = 2$  de un contaminante conservativo, con dispersividad longitudinal  $\alpha_x = 0.1$ , transversal  $\alpha_y = 0.01$  y vertical  $\alpha_z = 0.01$ , se obtiene el mapa de concentraciones mostrado en la Figura 47. Si el contaminante presenta un  $R_f = 2$ , el resultado sería el mostrado en la Figura 48.

Para el caso en el que  $y = z = 0$ , es decir, si queremos calcular la concentración en la **línea central o plano de simetría**, la solución queda de la siguiente forma (Shih y Rong, 2001):

$$C(x, 0, 0, t) = \frac{C_0}{2} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t/R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x R_f)/v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t/R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{Y}{4\sqrt{\alpha_y x}} \right) \operatorname{erf} \left( \frac{Z}{4\sqrt{\alpha_z x}} \right) \right] \quad (10.9)$$

Si además de la solución en la **línea central** la queremos para **régimen permanente o estacionario** tenemos (Tong y Rong, 1999):

$$C(x, 0, 0, t) = C_0 \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}} \right] \right\} \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{Y}{4\sqrt{\alpha_y x}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{Z}{4\sqrt{\alpha_z x}} \right) \right] \quad (10.10)$$

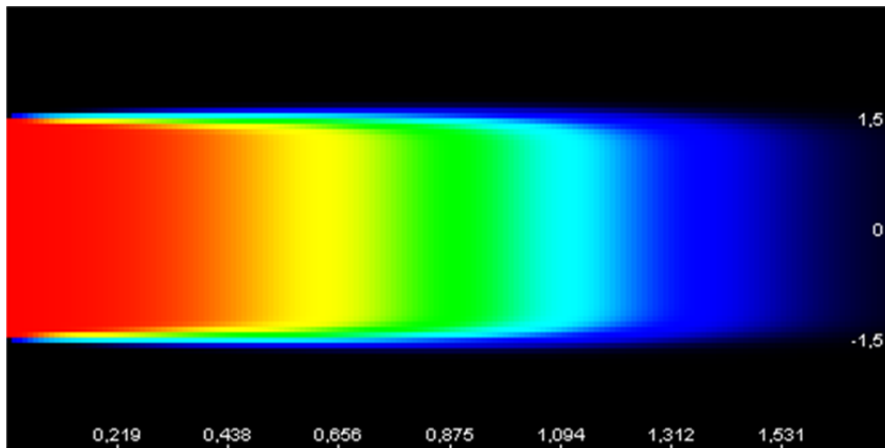


Figura 47. Plano de concentración para un trazador conservativo obtenido aplicando la ecuación (10.8).

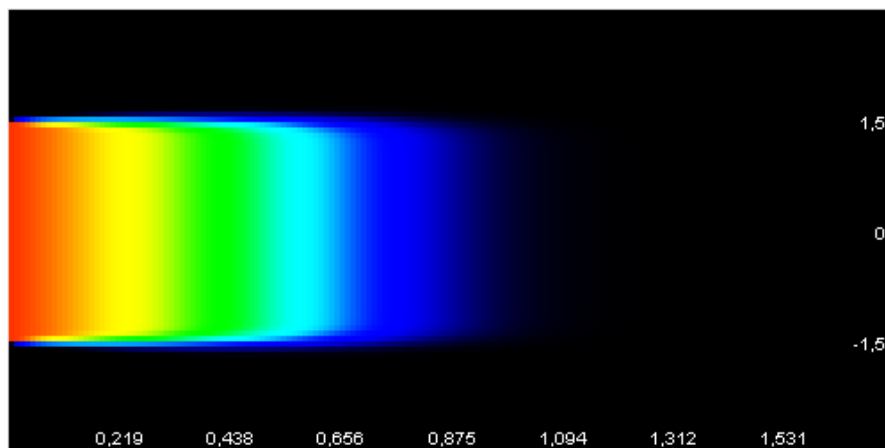


Figura 48. Plano de concentración para un trazador con  $R_f = 2$  aplicando la ecuación (10.8).

### 10.1.3 DOMINIO (c)

Si la extensión vertical de la fuente es igual al espesor del acuífero confinado, el sistema se hace 2D. Se ha eliminado por completo la expansión en  $z$ , por lo que el término que contiene  $z$  se ignora y  $C_0/8$  se convierte en  $C_0/4$ , Figura 49.

La ecuación de estado es:

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

La condición inicial es:  $C(x,y,0) = 0$  Para  $0 \leq x < +\infty$ ;  $-\infty < y < +\infty$

Condiciones de contorno  $C(0,y,t) = C_0$   $t \geq 0$ ;  $-Y/2 \leq y \leq Y/2$

$C(0,y,t) = 0$   $t \geq 0$ ; todos los otros  $y$

$$C(\infty, y, t) = 0 \quad t \geq 0; \text{ todos los } y$$

$$C(x, \pm\infty, t) = 0 \quad t \geq 0; \text{ todos los } x$$

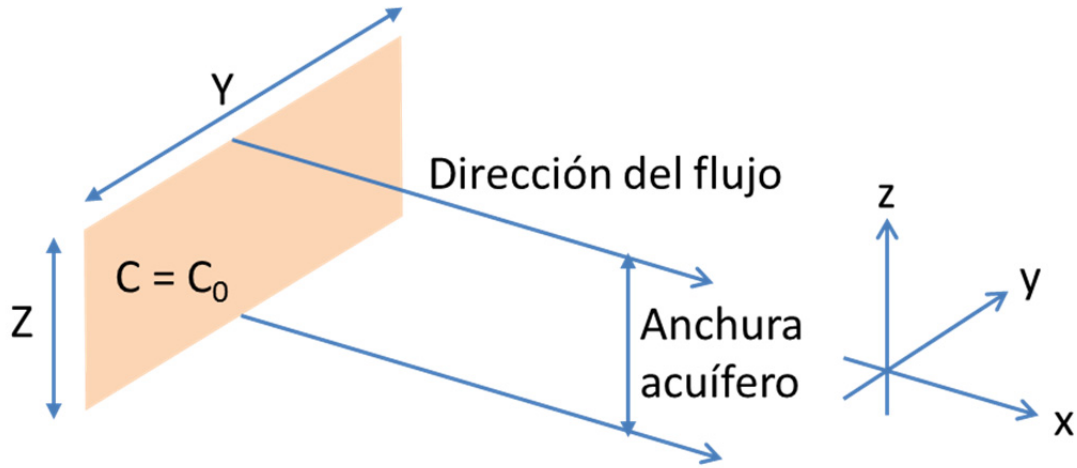


Figura 49. Esquema para la dispersión en un acuífero en el dominio c).

La solución analítica es:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{4} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y \frac{x}{v_x}}} \right) \right] \quad (10.11)$$

Con sorción y desintegración la solución queda:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp \left\{ \left( \frac{x}{2\alpha_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t/R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x R_f)/v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t/R_f}} \right) \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right) \right] \quad (10.12)$$

Si la anchura del acuífero es pequeña, la pluma de contaminación se extenderá verticalmente y ocupará toda la anchura del acuífero. La longitud  $x'$  sobre la que se puede extender puede aproximarse por (Domenico y Palciauskas, 1982):

$$x' = \frac{(H - Z)^2}{\alpha_z} \quad (10.13)$$

donde H es la anchura del acuífero, Figura 50. Por lo tanto, la ecuación (10.2) es válida para para distancias iguales o menores que  $\frac{(H-Z)^2}{\alpha_z}$ . Para distancias mayores de  $x'$ , la distancia x en



el denominador de la función de error del término  $z$  se reemplaza por  $x'$ . De esta forma, la extensión de la contaminación en  $z$  queda prohibida para  $x > x'$ .

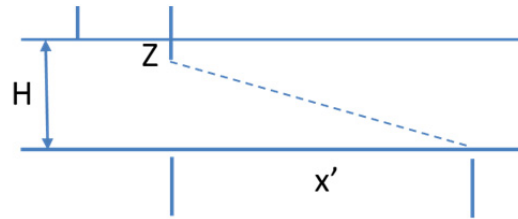


Figura 50. Extensión vertical de un contaminante limitado por la anchura del acuífero.

Que la fuente de contaminación y el punto de observación estén en línea con la dirección del flujo de agua, no es lo habitual en los casos de contaminación. Para poder transformarlos a la línea central o eje de simetría se utiliza un método trigonométrico (Shih y Rong, 2001). Se asume que la forma de la pluma de contaminación es una elipse con una dispersividad transversal un tercio de la longitudinal ( $\alpha_T = 0,33 \cdot \alpha_L$ ), aunque se puede ajustar si existen datos de campo, y que la elipse coincide con la línea de isoconcentración del contaminante. La ecuación de la elipse es:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (10.14)$$

donde  $a$  es la longitud del eje mayor,  $b$  del menor,  $x$  e  $y$  las coordenadas en la dirección  $X$  e  $Y$ , respectivamente.

Si situamos el pozo fuente en un lado de la elipse y el pozo de observación en el otro lado de la elipse a una distancia  $L$ , formando un ángulo  $\theta$  con el centro de línea, Figura 51, la nueva distancia,  $2a$ , se puede calcular teniendo en cuenta que:

$$b = 0,33 \cdot a; \quad x_1 = \cos\theta \cdot L - a; \quad y_1 = \text{sen}\theta \cdot L$$

$$\frac{(\cos\theta \cdot L - a)^2}{a^2} + \frac{(\text{sen}\theta \cdot L)^2}{(0,33 \cdot a)^2} = 1$$

$$(\cos\theta \cdot L - a)^2 + 9,18 \cdot (\text{sen}\theta \cdot L)^2 = a^2$$

$$(\cos\theta \cdot L)^2 + 9,18 \cdot (\text{sen}\theta \cdot L)^2 = 2a \cdot \cos\theta \cdot L$$

$$2a = \frac{\cos^2\theta \cdot L + 9,18 \cdot \text{sen}^2\theta \cdot L}{\cos\theta} = L(\cos\theta + 9,18 \cdot \text{tg}\theta \cdot \text{sen}\theta) \quad (10.15)$$

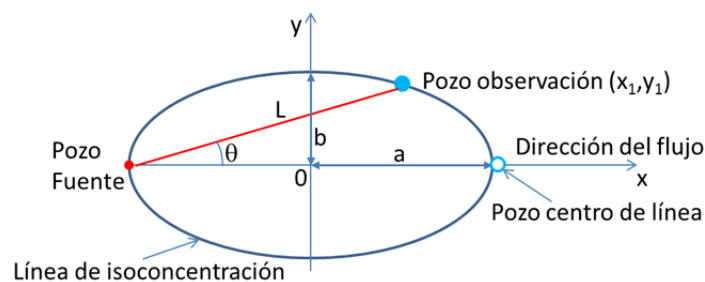


Figura 51. Esquema para transformar la posición al centro de simetría.

## EJEMPLO

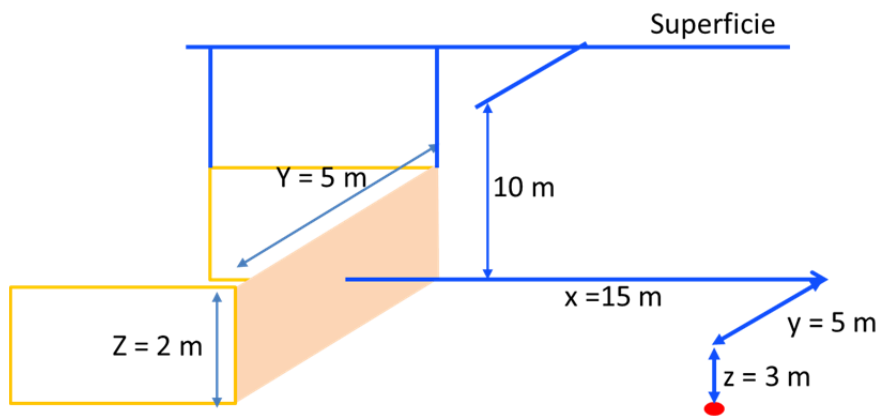
Supongamos un tanque de residuos radiactivos enterrado a 10 m de la superficie, del que se lixivia un contaminante en la dirección del flujo, con una concentración de 5 g/L, un factor de retardo,  $R_f = 2$  y un periodo de semidesintegración,  $T_{1/2} = 400$  días. El tanque es de dimensiones 5x5x2m. Calcular la concentración del contaminante en un pozo que se encuentra a 15 m de la pared del tanque, lateralmente a 5m y una profundidad de 3 m del centro del tanque, después de 1 año. (Basado en un ejemplo de E. Poeter, 2008). El acuífero está definido por los siguientes parámetros:

Conductividad hidráulica,  $K = 2,5 \cdot 10^{-5}$  m/s

Gradiente hidráulico: 0,003

Porosidad efectiva,  $n_e = 0,25$

$D_x = 2 \cdot 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s;  $D_y = 5 \cdot 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s;  $D_z = 2 \cdot 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s;



## Solución

Calculamos la velocidad del agua subterránea:

$$v = \frac{K \Delta h}{n_e \Delta l} = \frac{2,5 \cdot 10^{-5}}{0,25} \cdot 0,003 = 3 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$$

Y la constante de desintegración:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{0,693}{400 \cdot 24 \cdot 60 \cdot 60} = 2 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$$

La ecuación que tenemos que aplicar es:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp \left\{ \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda R_f D_x}{v_x^2}} \right] \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t / R_f \sqrt{1 + (4\lambda R_f D_x) / v_x^2}}{2\sqrt{D_x t / R_f}} \right) \\ \cdot \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z + \frac{Z}{2}}{2\sqrt{D_z x / v_x}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z - \frac{Z}{2}}{2\sqrt{D_z x / v_x}} \right) \right]$$

Que resolvemos:

$$\frac{v_x x}{D_x} = \frac{3 \cdot 10^{-7} \text{ m/s } 15 \text{ m}}{2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}} = 2,25$$

$$1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda R_f D_x}{v_x^2}} = 1 - \sqrt{1 + \frac{4(2 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}) \cdot 2 \cdot (2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s})}{(3 \cdot 10^{-7} \text{ m/s})^2}} = -1,134$$

$$\frac{x - v_x t / R_f \sqrt{1 + (4\lambda R_f D_x) / v_x^2}}{2\sqrt{D_x t / R_f}} = \frac{15 \text{ m} - (3 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 31536000 \text{ s} \cdot 2 \cdot 2,134)}{2\sqrt{2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \cdot 31536000 \text{ s} / 2}} = \frac{15 - 40,379}{11,231} \\ = 2,260$$

$$\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} = \frac{5 \text{ m} + \frac{10 \text{ m}}{2}}{2 \cdot \sqrt{(5 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}) \cdot 15 \text{ m} / (3 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{s}})}} = \frac{10}{10} = 1$$

$$\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y x / v_x}} = \frac{5 \text{ m} - \frac{10 \text{ m}}{2}}{10} = 0$$

$$\frac{z + \frac{Z}{2}}{2\sqrt{D_z x / v_x}} = \frac{3 \text{ m} + \frac{2 \text{ m}}{2}}{2 \cdot \sqrt{(2 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}) \cdot 15 \text{ m} / (3 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{s}})}} = \frac{4}{6,324} = 0,632$$

$$\frac{z - \frac{Z}{2}}{2\sqrt{D_z x / v_x}} = \frac{3 \text{ m} - \frac{2 \text{ m}}{2}}{6,324} = 0,316$$

$$C(x, y, z, t) = \frac{5000 \text{ mg/L}}{8} \exp\{(2,25)[-1,134]\} \cdot \operatorname{erfc}(2,260) \cdot [\operatorname{erf}(1) - \operatorname{erf}(0)][\operatorname{erf}(0,632) - \operatorname{erf}(0,316)]$$

$$C(x, y, z, t) = \frac{625 \text{ mg}}{L} \cdot 0,0779 \cdot 0,0014 \cdot 0,8427 \cdot 0,2835 = 1,63 \cdot 10^{-2} \text{ mg/L}$$

### EJEMPLO

Imaginemos un trazador conservativo infiltrado en una acuífero hasta una profundidad de  $Z = 10$  m. El flujo de agua subterránea se produce a través de la fuente, que tiene un tamaño de  $Y = 10$  m, y el acuífero una anchura de 20 m. La concentración de la fuente es de  $C_0 = 5000 \mu\text{g/L}$ .

Datos:  $v_x = 30,0$  m/a;  $R_f = 3,0$ ;  $b=20$  m;  $\alpha_L = 1,0$  m;  $\alpha_H = 0,1$  m;  $\alpha_v = 0,01$  m

- ¿Qué concentración puede esperarse después de 3 y 10 años en el punto de coordenadas  $x=100$  m,  $y=0$  y  $z=10$  m?
- ¿Cuál será la concentración en régimen permanente y cuanta dilución se obtendrá?

### Solución

Distancia a la que se alcanza el fondo del acuífero:

$$x' = \frac{(H - Z)^2}{\alpha_z/R_f} = \frac{(20 - 10)^2}{0,01/3,0} = 30000 \text{ m}$$

La ecuación que tenemos que aplicar es la (10.8):

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} \exp\left\{\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right) \left[1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v_x/R_f}}\right]\right\} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v_x t/R_f \sqrt{1 + (4\lambda\alpha_x R_f)/v_x}}{2\sqrt{\alpha_x v_x t/R_f}}\right) \cdot \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{z + \frac{Z}{2}}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{z - \frac{Z}{2}}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right)\right]$$

La concentración a los 3 años:

$$c\left(\begin{matrix} x = 100 \\ y = 0 \\ z = 10 \\ t = 3 \end{matrix}\right) = \left(\frac{5000}{8}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{100 - \frac{30,0}{3} 3}{2\sqrt{1,0 \frac{30,0}{3} 3}}\right] \left\{\operatorname{erf}\left[\frac{0 + 5}{2\sqrt{0,1 \cdot 100}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{0 - 5}{2\sqrt{0,1 \cdot 100}}\right]\right\} \left\{\operatorname{erf}\left[\frac{10 + 10}{2\sqrt{0,01 \cdot 100}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{10 - 10}{2\sqrt{0,01 \cdot 100}}\right]\right\}$$

$$= 625 \cdot \operatorname{erfc}(6,39) \cdot \{\operatorname{erf}(0,79) - \operatorname{erf}(-0,79)\} \cdot \{\operatorname{erf}(10) - \operatorname{erf}(0)\} =$$

$$= 625 \cdot 0 \cdot \{0,736 + 0,736\} \cdot \{1 - 0\} = 0$$

Concentración a los 10 años:

$$= 625 \cdot \operatorname{erfc}(0) \cdot 1,472 = 625 \cdot 1 \cdot 1,472 = 920 \mu\text{g/L}$$

La concentración en régimen permanente es la concentración máxima:

$$C_{\text{máx}}(x) = C_0 \operatorname{erf} \left[ \frac{Y}{4\sqrt{\alpha_H x}} \right] \operatorname{erf} \left[ \frac{Z}{4\sqrt{\alpha_V x}} \right]$$

En el plano de simetría, y en régimen permanente:

$$C_{\text{máx}}(x) = 5000 \cdot \operatorname{erf} \left[ \frac{10}{4\sqrt{0,1 \cdot 100/3}} \right] \operatorname{erf} \left[ \frac{10}{4\sqrt{0,01 \cdot 100/3}} \right] =$$

$$= 5000 \cdot \operatorname{erf}[1,369] \cdot \operatorname{erf}[4,330] = 5000 \cdot 0,947 \cdot 1 = 4735 \mu\text{g/L}$$

La dilución será:  $4735/5000 = 1:1.06$

## 10.2 FUENTE PUNTUAL INSTANTÁNEA. PULSO DE CONTAMINANTE.

Para el transporte en un espacio 3D con flujo lineal constante en la dirección x y fuente puntual instantánea la ecuación de transporte es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

Que con las siguientes condiciones inicial y de contorno:

$$\text{Condición inicial} \quad C(x, y, z, 0) = 0 \quad -\infty < x < +\infty \quad -\infty < y < +\infty \quad -\infty < z < +\infty$$

$$\text{Condiciones de contorno} \quad C(\pm\infty, y, z, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$C(x, \pm\infty, z, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$C(x, y, \pm\infty, t) = 0 \quad t \geq 0$$

Se obtiene la siguiente solución analítica (Hunt, 1978; Bear, 1979):

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{8n_e \sqrt{(\pi t)^3 \sqrt{D_x D_y D_z}}} \exp \left[ -\frac{(x - v_x t)^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t} \right] \quad (10.16)$$

con el punto de inyección localizado en  $x_0=0$ ,  $y_0=0$  y  $z_0=0$ .

O en forma general:

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{8n_e \sqrt{(\pi t)^3} \sqrt{D_x D_y D_z}} \exp \left[ -\frac{[(x - v_x t) - x_0]^2}{4D_x t} - \frac{(y - y_0)^2}{4D_y t} - \frac{(z - z_0)^2}{4D_z t} \right] \quad (10.17)$$

Que al igual que para el caso 2D es un función de distribución probabilística gaussiana. Para un tiempo  $t$ , la distribución gaussiana viene definida por la media en  $x = vt$ ,  $y = 0$  y  $z = 0$ , y las desviaciones estándar  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  definidas por la raíz cuadrada de  $2D_x t$ ,  $2D_y t$  y  $2D_z t$  respectivamente. La Figura 52 muestra un esquema de la pluma desarrollada por una fuente puntual en un sistema 3D.

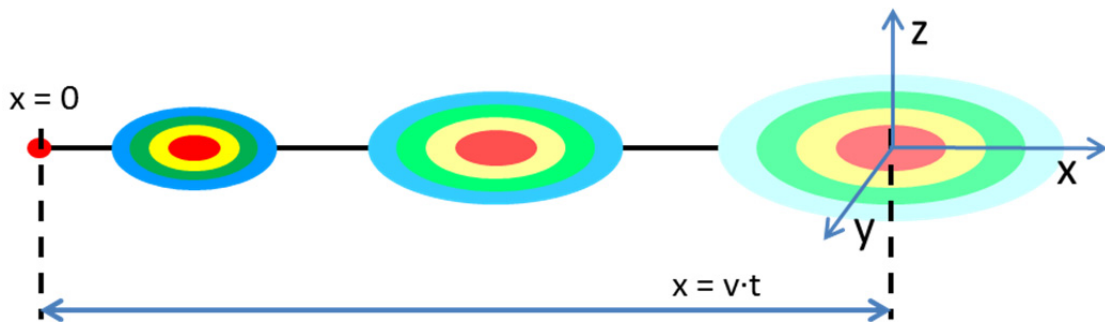


Figura 52. Esquema de una pluma de contaminación para diferentes tiempos en 3D. El centro de masas está localizado a lo largo del eje  $x$  y es la media de la función gaussiana.

Las dimensiones de la nube viene dadas por:

$$3\sigma_x = \sqrt{2D_x t}; \quad 3\sigma_y = \sqrt{2D_y t}; \quad 3\sigma_z = \sqrt{2D_z t};$$

Por las propiedades de la función gaussiana, el 99,7% de la masa está contenida dentro de 3 veces la desviación estándar, el 95% dentro del  $\pm 2\sigma$ , y el 68% dentro del  $\pm \sigma$ .

Para un tiempo  $t$ , la concentración máxima aparece a  $x_{m\acute{a}x} = vt$ ,  $y_{m\acute{a}x} = 0$  y  $z_{m\acute{a}x} = 0$ ; y la máxima concentración es igual a:

$$C_{m\acute{a}x}(x, y, z, t) = \frac{M}{8n_e \sqrt{(\pi t)^3} \sqrt{D_x D_y D_z}} \quad (10.18)$$

Schwartz y Zhang (2003), para el transporte de masas en tres dimensiones de una fuente puntual instantánea, con las condiciones de contorno que se observan en la Figura 53, que son:

$M =$  masa inicial, en  $x = 0$ ,  $y = y_s$  y  $z = z_s$

$$C = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ para } x = \infty$$

y la condición inicial de:  $C = 0$  para  $0 < x < \infty$  y  $t = 0$

presentan la siguiente solución para un contaminante que se adsorbe y es radiactivo:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{M}{n_e R_f} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_x t / R_f}} \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{v_x t}{R_f}\right)^2}{\frac{4D_x t}{R_f}} - \lambda t\right) \\
 & \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D_y t / R_f}} \exp\left(-\frac{(y - y_s)^2}{\frac{4D_y t}{R_f}}\right) \\
 & \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D_z t / R_f}} \left[ \exp\left(-\frac{(z - z_s)^2}{\frac{4D_z t}{R_f}}\right) + \exp\left(-\frac{(z + z_s)^2}{\frac{4D_z t}{R_f}}\right) \right]
 \end{aligned}
 \tag{10.19}$$

donde la masa inicial en  $(0, y_s, z_s)$  es  $M$ ,  $x$  es la distancia desde la fuente al punto de cálculo,  $y$  es la distancia lateral desde la fuente,  $z$  es la distancia desde el nivel freático al punto de cálculo.

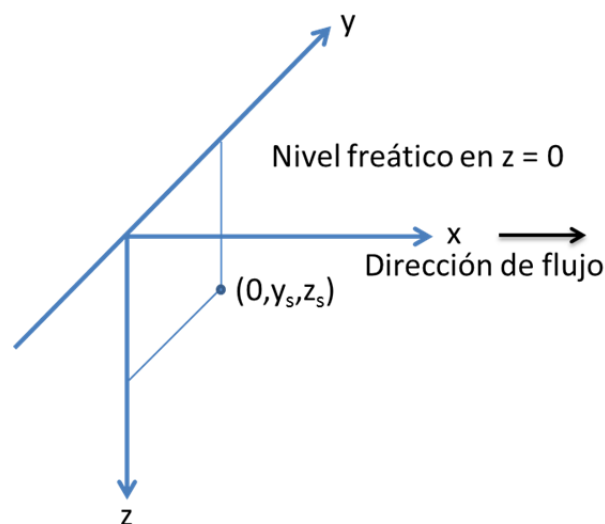


Figura 53. Geometría para una fuente puntual en un dominio 3D.

Para el caso de una mezcla completa de la masa disuelta en la dirección vertical del acuífero, la ecuación (10.19) se simplifica eliminando el término en  $Z$ :

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{M}{bn_e R_f} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_x t / R_f}} \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{v_x t}{R_f}\right)^2}{\frac{4D_x t}{R_f}} - \lambda t\right) \\
 & \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D_y t / R_f}} \exp\left(-\frac{(y - y_s)^2}{\frac{4D_y t}{R_f}}\right)
 \end{aligned}
 \tag{10.20}$$

donde  $b$  es la anchura del acuífero. Para una fuente puntual, la concentración máxima en el centro de la pluma donde  $x = v_x t$ ,  $y = y_s$ ,  $y z = z_s$ , se expresa similarmente como:

$$C(x = v_x t, y = y_s, z = z_s, t) = \frac{M}{4n_e R_f} \frac{1}{\sqrt{(\pi t / R_f)^3 \sqrt{D_x D_y D_z}}} \exp(-\lambda t) \quad (10.21)$$

Cuando aumenta el tiempo, la concentración máxima se reduce gradualmente debido a la dispersión.

Baetslé (1969) presenta una solución muy útil para fuente puntual instantánea con desintegración:

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0 V_0}{8\sqrt{(\pi t)^3 \sqrt{D_x D_y D_z}}} \exp\left(-\frac{(x - v_x t)^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t} - \lambda t\right) \quad (10.22)$$

donde  $C_0 V_0$  es la masa envuelta en la descarga. Si no hay desintegración se ignora el término  $\lambda t$ . Si hay retardo  $v_x$ ,  $D_x$ ,  $D_y$ ,  $D_z$  y  $C_0$  tienen que dividirse por  $R_f$ .



## 11 REFERENCIAS

- Anderson, S. (2008) Transport Processes in the Environment. Lecture Notes Course 1.061 Civil and Environmental Engineering.
- Apey Freire, A.A. (2009) Contaminación de aguas subterráneas: Determinación del coeficiente de dispersión mediante el uso de trazadores conservativos. Tesis doctoral Universidad de Santiago de Chile.
- Aral, M.M. (2001) Analytical Contaminant Transport analysis System (ACTS). School of Civil and Environmental Engineering. Georgia Institute of Technology, Atlanta.
- Baetslé, L.H. (1969) Migration of radionuclides in porous media. In Progress in Nuclear Energy Series XII, Health Physics, ed. A.M.F. Duhamel, 707–730. Elmsford, New York, Pergamon.
- Baresel, Ch., Molin, S. (2006) An interactive guide on Solute Contaminant transport in Grounwater. Royal Institute of Technology, Suecia.
- Bear, J. (1972) Dynamics of fluid in porous media. New York, American Elsevier Publishing Company.
- Bear, J. (1979) Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill, New York.
- Chuang, L-C. (1998) A guidance system for choosing analytical contaminant transport model. Th.D. Environmental Engineering. University of Houston.
- Cleary, R.W., Unga, M.J. (1978) Analytical Models for Groundwater Pollution and Hydrology. Water Resources Program Report 78-WR-15. Princeton University.
- Cunningham, J.A. (2005) Transport in porous media. Homework 3. Civil & Environmental Eng. University of South Florida.
- De Josselin De Jong, G. (1958) Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. Transactions, American Geophysical Union 39 (1), 67-74.
- Domenico, P. (1987) An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. Journal of Hydrology, 91, 49-58.
- Domenico, P., Palciauskas, V.V. (1982) Alternative boundaries in solid waste management. Ground Water, vol. 20, 303-311.
- Domenico, P., Robbins, G. (1985) A new method of contaminant plume analysis. Ground Water, 23(4), 476-485.
- Domenico, P. Schwartz, F.W. (1998) Physical and Chemical Hydrogeology, 2<sup>nd</sup> edition. Wiley, New York.
- Espinoza, C. (2004) Curso de Hidráulica de aguas subterráneas y su aprovechamiento. Universidad de Chile.
- Fetter, C:W. (1992) Contaminant Hydrology. Second edition, Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ07458.

- Freeze, R.A, Cherry, J.A. (1979) *Groundwater*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ 07632.
- Goltz, M., Huang, J. (2017) *Analytical modeling of Solute Transport in Groundwater. Using Models to Understand the Effect of Natural Processes on Contaminant Fate and Transport*. Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- Hantush, M.S. (1956) Analysis of data from Pumping test in Leaky Aquifers. *Transactions, American Geophysical Union*, 37, 702-714.
- Hunt, B.W. (1978) Dispersive sources in uniform groundwater flow. *ASCE, Journal of Hydraulics Division*, 104(HT1), 75-85.
- Javandel, I., Doughty, C., Tsang, C. F. (1984) *Groundwater transport: Handbook of mathematical models*. Water Resources Monograph 10, American Geophysical Union, Washington, D.C.
- Kinzelbach, W. (1986) *Groundwater modelling. An introduction with sample programs in BASIC*. Elsevier.
- Kreft, A., Zuber, A. (1978) On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions. *Chemical Engineering Science*, vol. 33, p.1471-1480.
- Li, Y., Gregory, S. (1973) Diffusion of ions in seawater and in deep-sea sediments *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38, 703.
- Lindstrom, F.T., Haque, R., Freed, V.H., Boersma, L. (1967) Theory on the movement of some herbicides in soils: linear diffusion and convection of chemicals in soils, *Journal of Environmental Science and Technology* 1, 561-565.
- Ogata, A., Banks, R.B. (1961) A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. U.S. Geological Survey Professional Paper 411-A.
- Paladino, O., Moranda, A., Massabò, M., Robbins, G.A.(2018) Analytical solutions of Three-Dimensional Contaminant Transport models with Exponential Source Decay. *Groundwater*, vol. 56 (1), 96-108.
- Parker, J.C., van Genuchten, M. Th. (1984) Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. Virginia Agriculture Experimental Station. Bulletin 84-3, Blacksburgs, VA.
- Poeter, E.P. (2008) On-line Ground Water Modeling Course. Colorado School of Mines. ([inside.mines.edu/fs\\_home/epoeter](http://inside.mines.edu/fs_home/epoeter))
- Rodriguez Olivares, J.G. (2009) Pronóstico de la migración de contaminantes en aguas subterráneas mediante redes neuronales artificiales. Tesis presentada en el Instituto Politécnico nacional, México D.F.
- Sánchez San Román, F.J. (2017) *Hidrología superficial y subterránea*. Editado por el autor. ISBN 978-1975606602.
- Sauty, J.P. (1980a) An analysis of hydrodispersive transfer in aquifers. *Water Resources Research* 16 (1), 145-158.
- Schwart, F.W., Zhang, H. (2003) *Fundamentals of Ground Water*. John Wiley & Sons, Inc.

Shih, T., Rong, Y. (2001) Manual for Domenico non-steady state spreadsheet analytical model (for continuous source release. Underground Storage Tank Section. California Regional Water Quality Control Board. Los Angeles.

Simunek, J., van Genuchten, M.Th., Sejna, M., Toride, N., Leij, F.J. (2000) The STANNOD computer software for evaluating solute transport in porous media using analytical solutions of convection-dispersion equation. Version 2.0, Int. Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado.

Tong, W., Rong, Y. (1999) Domenico spreadsheet analytical model manual. Underground Storage Tank Section.

Toride, N., Leij, F.J., van Genuchten, M.Th. (1999) The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. Version 2.1, Research Report nº 137 U.S. Salinity laboratory, USDA, ARS, Riverside, USA. 121 p.

Valocchi, A.J., Werth, Ch.J. (2004) Web-Based Interactive Simulation of Groundwater Pollutant Fate and Transport. Wiley Periodicals, Inc. Comput. Appl. Eng. Educ. 12, 75-83.

Van Genuchten, M. Th., Alves, W.J. (1982) Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. U.S. Department of Agriculture, Technical Bulletin Nº 1661.

Van Genuchten, M.Th., Leij, F.J., Skaggs, T.H., Toride, N., Bradford, S.A., Pontedeiro, E.M. (2013) Exact analytical solutions for contaminant transport in rivers. 1. The equilibrium advection-dispersion equation. J. Hydrol. Hydromech. 61 (2) 146-160.

Wexler, E.J. (1992) Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow. Techniques of Water-Resources Investigations of the U.S. Geological Survey. Book 3. Chapter B7.

Widdowson, M. A. (1999) Lecture Notes Curso Dynamics of Groundwater CEE 5374.

Wiedemeier, T.H., Rifai, H.S., Newell, C.J., Wilson, J.T. (1999) Natural attenuation of fuels and chlorinated solvents in the subsurface. John Wiley & Sons, New York.

