



Aspectos Teóricos sobre el Fenómeno de Contaminación de Aguas Subterráneas

Gloria ■ Elena ■ Echeverri ■ R.

El fenómeno de contaminación de aguas subterráneas y el destino de ciertos constituyentes del agua tienen en cuenta diversos mecanismos de naturaleza física, química y biológica; en este trabajo se consigna de manera concisa, los aspectos teóricos de estos tópicos, es decir, los principios básicos de la hidráulica subterránea, los conceptos fundamentales de la física del movimiento y la química del agua subterránea, así como las ecuaciones que gobiernan el fenómeno de contaminación de la masa de agua contenida en los intersticios de los suelos y las rocas, ampliamente utilizadas en la modelación matemática del fenómeno.

Gloria Elena Echeverri R. Geóloga, Maestría en Ingeniería. Profesora Universidad EAFIT, Departamento de Ingeniería Civil.

INTRODUCCIÓN

Una de las principales fuentes de abastecimiento de agua potable, son los acuíferos o estratos de suelos y rocas relativamente permeables que contienen agua subterránea. Generalmente en estado natural, los acuíferos tienen una calidad adecuada como agua potable; sin embargo, y sobre todo en el tiempo más recientes, debido al gran incremento en la actividad humana, se presentan casos de acuíferos contaminados por actividad antrópica y en consecuencia no están en condiciones de ser explotados.

El flujo de agua subterránea y el transporte de contaminantes no son fáciles de observar ni medir. Ambos procesos son generalmente lentos, y posiblemente ésta sea una de las causas de la amplia preocupación acerca del riesgo de contaminación del agua subterránea, aún entre los administradores de recursos de agua y de suelo. No obstante, el asunto es de importancia práctica y directa por la escala y persistencia de muchos episodios de contaminación de agua subterránea, por su impacto en los abastecimientos de agua potable y por el costo excesivo y la dificultada técnica de rehabilitación.

La contaminación de aguas subterráneas se genera por diversos mecanismos de naturaleza física, química y biológica. Dentro de este contexto, la modelación de tales fenómenos

permite prever el destino de ciertos constituyentes del agua, sobre todo de los tóxicos, y establecer estrategias para prevenir sus efectos adversos innegables en los cultivos, la calidad del recurso agua y suelo, y particularmente en la salud humana.

Dada la trascendencia y el estado actual del conocimiento sobre la contaminación de agua subterránea, a continuación se presentan los principales aspectos teóricos que involucran el fenómeno de contaminación de aguas subterráneas, teniendo en cuenta los conceptos generales de la hidráulica subterránea, los constituyentes químicos, los mecanismos de contaminación y las ecuaciones que gobiernan el proceso de polución de estos sistemas.

El flujo de agua subterránea y el transporte de contaminantes no son fáciles de observar ni medir. Ambos procesos son generalmente lentos, y posiblemente esta sea una de las causas de la amplia preocupación acerca del riesgo de contaminación del agua subterránea, aún entre los administradores de recursos de agua y de suelo. No obstante, el asunto es de importancia práctica y directa por la escala y persistencia de muchos episodios de contaminación de agua subterránea, por su impacto en los abastecimientos de agua potable y por el costo excesivo y la dificultada técnica de rehabilitación.

1. CONCEPTOS GENERALES DE LA HIDRÁULICA SUBTERRÁNEA

La cadena de eventos que describe la historia del agua se denomina ciclo hidrológico. Este ciclo involucra al sistema total de la tierra y sufre varios procesos complicados de evaporación, precipitación, intercepción, transpiración, infiltración, percolación y escurrimiento.

Las rocas y los suelos contienen numerosos espacios abiertos denominados intersticios, en los que el agua es almacenada y a través de los cuales el agua puede moverse; cuando

las oquedades de las rocas y los suelos están saturados de agua, se denomina a ésta agua subterránea.

Un acuífero es un lecho saturado, que contiene agua en cantidades suficientes como para ser considerado una fuente de abastecimiento. Sirve de conducto de transmisión y depósito de almacenamiento. Transporta agua desde las zonas de recarga hacia los cuerpos superficiales de agua, terrenos húmedos, manantiales, áreas de evapotranspiración, así como a pozos y otros dispositivos abastecedores de agua. **Como depósito de almacenamiento, un acuífero proporciona agua de reserva para usarla durante los períodos en que las descargas superan la recarga. La cantidad de agua disponible en almacenamiento, en algunos acuíferos, puede ser tan grande que durante años de altas descargas no se observen evidencias marcadas de agotamiento.**

La fuerza impulsora del flujo de agua en el subsuelo es el potencial o carga hidráulica y causa el movimiento del agua subterránea. Si el fluido tiene la misma carga en cualquier punto, no hay flujo, pero si hay diferencia de carga en el espacio, el agua fluye en la dirección en que disminuye la cabeza hidráulica. El agua subterránea fluye en respuesta a las diferencias de presión y de elevación. Hubbert en 1940, clarificó el concepto de potencial del agua subterránea y su relación con la carga de Darcy, derivándola a partir de principios físicos. (Fried, 1985).

El potencial de agua subterránea en un punto dado es la energía requerida para transportar una masa unitaria de agua desde un estado

estándar de referencia hacia este punto; este potencial se denomina potencial de fuerza porque su derivada espacial tiene unidades de fuerza por unidad de masa.

Como depósito de almacenamiento, un acuífero proporciona agua de reserva para usarla durante los períodos en que las descargas superan la recarga. La cantidad de agua disponible en almacenamiento, en algunos acuíferos, puede ser tan grande que durante años de altas descargas no se observen evidencias marcadas de agotamiento.

El agua dentro de una perforación se estabiliza en un nivel que se denomina superficie piezométrica o nivel piezométrico; es decir, la superficie que une todos los niveles de agua, si ésta coincide con el manto freático, se trata como una superficie libre y el acuífero es no confinado. En el caso contrario, la superficie piezométrica está encima del manto freático.

Algunas propiedades del subsuelo que influyen en el comportamiento hidráulico del agua subterránea y que se tienen en cuenta en la modelación del fenómeno de contaminación de aguas subterráneas son la forma, la interconexión y el arreglo de los intersticios de los acuíferos. La naturaleza de los intersticios está determinada por la estructura geológica, siendo esencial una descripción de la geología de una región y así comprender el movimiento y almacenamiento del agua subterránea. También depende de la porosidad, definida como la medida del espacio intersticial de un suelo o roca y expresada cuantitativamente como el porcentaje del volumen total de roca ocupado por las oquedades y de la permeabilidad, definida como la facilidad o dificultad

con que el fluido puede atravesar el medio poroso de un suelo o roca. El coeficiente de permeabilidad es el factor gobernante del flujo y su estimación es crítica, debido a la anisotropía o amplio intervalo de variabilidad en la porosidad de los materiales naturales.

El coeficiente de almacenamiento, S , es un parámetro adimensional que se aplica en los acuíferos confinados, y se expresa como la relación entre el volumen real de agua extraída durante el recorrido bajo presión de un cierto volumen.

Otra forma útil de definir el coeficiente de almacenamiento es en función del volumen de agua que un acuífero suministra o toma para almacenamiento, por unidad de área superficial del acuífero y por unidad de cambio de la carga normal a esa superficie.

2. CONSTITUYENTES QUÍMICOS Y MECANISMOS DE CONTAMINACIÓN

El agua subterránea contiene una amplia variedad de constituyentes químicos inorgánicos disueltos en varias concentraciones, como resultado de las interacciones químicas y bioquímicas entre el agua subterránea y los materiales geológicos a través de los cuales fluye, y en un menor grado debido a las contribuciones de la atmósfera y cuerpos de agua superficial.

Los principales constituyentes inorgánicos presentes en el agua subterránea son: Ácido carbónico, Bicarbonatos, Calcio, Cloruros, Magnesio, Silicio, Sodio y Sulfatos; éstos ocurren fundamentalmente en forma iónica y

denominados iones principales (Na^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cl^- , HCO_3^- , SO_4^{2-}). La concentración total de estos seis iones principales constituyen normalmente más del 90% de la concentración de sólidos disueltos totales, SDT, en el agua subterránea con variaciones en muchos órdenes de magnitud. Los constituyentes menores son el Hierro, los Nitratos, el Potasio, etc., y los constituyentes trazas, Molibdeno, Niobio, Níquel, Oro, Plata, Platino, Plomo, Rubidio, Selenio, Uranio, Zinc, etc. Tanto los elementos menores como los elementos trazas, están controlados por la disponibilidad de estos constituyentes en el suelo y las rocas que se encuentran el agua en su camino. **Cada vez es más común que las concentraciones de los constituyentes inorgánicos disueltos en el agua subterránea, generados por los procesos geológicos y geoquímicos, estén influenciados por las actividades del hombre.**

El agua subterránea contiene una amplia variedad de constituyentes químicos inorgánicos disueltos en varias concentraciones, como resultado de las interacciones químicas y bioquímicas entre el agua subterránea y los materiales geológicos a través de los cuales fluye, y en un menor grado debido a las contribuciones de la atmósfera y cuerpos de agua superficial.

La materia orgánica disuelta está siempre presente en el agua subterránea natural, aunque las concentraciones son generalmente bajas en comparación con las de los constituyentes inorgánicos. Falta mucho por conocer acerca de la naturaleza química de la materia orgánica del agua subterránea. Investigaciones sobre el agua del subsuelo han sugerido

que la materia orgánica que se encuentra más disuelta en los sistemas de flujo superficial, son el ácido fúlvico y el ácido húmico. Estos se refieren a tipos particulares de materiales orgánicos que persisten en las aguas subsuperficiales debido a su resistencia a la degradación por los microorganismos.

Los gases disueltos más abundantes en el agua subterránea son N_2 , O_2 , CO_2 , CH_4 , H_2S y N_2O ; los tres primeros componen la mayor parte de la atmósfera terrestre y por lo tanto es común que se encuentren en aguas superficiales, mientras que los restantes existen frecuentemente en el agua subterránea en concentraciones significativas, debido a que son productos de los procesos bioquímicos que le suceden en zonas subsuperficiales no aireadas.

Una de las relaciones más útiles para el análisis de los procesos químicos del agua subterránea, es la ley de acción de masas. Se sabe desde hace más de un siglo que la fuerza impulsora de una reacción química se relaciona con las concentraciones de los constituyentes que están reaccionando y las concentraciones de los productos de la reacción (Freeze, 1979). La acción de masas expresa la relación entre los reactivos y los productos cuando la reacción está en equilibrio.

El proceso donde los constituyentes iónicos o moleculares se mueven por la influencia de su actividad cinética en la dirección de su gradiente de concentración, se conoce como la difusión en las soluciones y ocurre en ausencia de cualquier movimiento hidráulico de la masa de solución. Si la solución fluye, la difusión junto con la dispersión originan el mezclado

de los constituyentes iónicos o moleculares. La difusión cesa, sólo cuando los gradientes de concentración dejan de existir.

Cuando el agua entra en contacto con los minerales, la disolución de estos comienza y continuará hasta que se alcancen las concentraciones de equilibrio en el agua o hasta que se consuman todos los minerales. La solubilidad de un mineral se define como la masa que se disolverá en un volumen unitario de solución bajo condiciones específicas y presenta un amplio intervalo de valores. Así, dependiendo de los minerales que el agua subterránea encuentre durante la historia de su flujo, puede resultar ligeramente con mayor cantidad de sólidos disueltos que el agua lluvia o varias veces más salada que el agua de mar.

Muchos minerales que afectan la evolución química del agua subterránea se disuelven incongruentemente; esto es, uno o más de los productos de la disolución ocurren como minerales o sustancias sólidas amorfas, por ejemplo, los silicatos de aluminio como es el caso de la albita que se disuelve por la acción lixivante del ácido carbónico (H_2CO_3) para producir especies disueltas y el mineral de arcilla caolinita. Esta es una reacción común en zonas de aguas subterráneas de terrenos con presencia de cuerpos graníticos.

Muchas reacciones que ocurren en el ambiente del agua subterránea tienen en cuenta la transferencia de electrones entre los constituyentes disueltos, gaseosos o sólidos. Como resultado de la transferencia electrónica hay cambios en los estados de oxidación de los reactantes y los productos. La tendencia en los

sistemas de aguas subterráneas es hacia la disminución de oxígeno y en condiciones reductoras, debido a que el agua que circula a través del subsuelo generalmente está aislada de la atmósfera y a que no se recupera el oxígeno que se consume por reacciones hidroquímicas y bioquímicas. Si el ambiente se convierte en un ambiente fuertemente reductor, los compuestos orgánicos pueden sufrir degradación anaeróbica.

La extraordinaria complejidad de la geometría de un medio poroso natural y su aleatoriedad, interaccionan en forma importante con los fenómenos mencionados complicándolos más aún que si se tratara de un medio fluido continuo.

Los materiales geológicos porosos que contienen un porcentaje apreciable de partículas de tamaño coloidal, tienen la capacidad de intercambiar constituyentes iónicos adsorbidos en la superficie de dichas partículas. Estas tienen diámetros en el rango de 10^{-3} a 10^{-6} mm, las cuales son grandes en comparación con el tamaño molecular, pero son suficientemente pequeñas para que las fuerzas interfaciales sean significativas en el control de su comportamiento. La mayoría de los minerales de la arcilla son de tamaño coloidal; así como los productos de la alteración geoquímica de las rocas que frecuentemente son coloides inorgánicos y amorfos en un estado metaestable persistente. Los procesos de intercambio iónico están limitados exclusivamente a partículas coloidales y por lo tanto a la tendencia de adsorción de cationes o de aniones.

Se puede inferir que la contaminación de agua en un medio poroso es un proceso complejo, donde intervienen varios fenómenos siendo los predominantes, la difusión molecular, que consiste en el mezclado entre dos fluidos, por ejemplo, en este caso pueden considerarse agua limpia y agua con cierto grado de contaminación; la dispersión mecánica, que es el mezclado generado por las fluctuaciones de velocidad de un fluido en movimiento; la adsorción, producida la transferencia de un material disuelto en un fluido a la superficie de un sólido por medio del contacto directo; y las reacciones químicas o procesos físicos o biológicos que pueden limitar el tiempo de existencia de un cierto compuesto en su forma original.

La extraordinaria complejidad de la geometría de un medio poroso natural y su aleatoriedad, interaccionan en forma importante con los fenómenos mencionados complicándolos más aún que si se tratara de un medio fluido continuo.

El deterioro de la calidad del agua y los requerimientos para el control de la contaminación están en función directa de la evolución y el crecimiento de las actividades productivas y el desarrollo urbano. Es así como las principales fuentes de contaminación de aguas subterráneas se pueden agrupar en los siguientes tipos: desechos sólidos sobre la superficie del terreno, que se infiltran en solución o suspensión con el agua lluvia; fugas de agua contaminada que posteriormente se infiltra; inyección a los acuíferos de aguas contaminadas, por ejemplo, pozos de recarga o pozos para eliminar desechos industriales; incorporación de contaminantes naturales al

agua del acuífero, a medida que el agua pasa a través de una formación geológica; infiltración de agua de riego contaminada con fertilizantes o pesticidas; desprendimiento de contaminantes de desechos enterrados (radiactivos, productos químicos, letrinas, fosas sépticas, etc.); invasión de un acuífero ya contaminado a una zona no contaminada, debido a cambios en la dirección y velocidad de flujo, usualmente producidos por sobreexplotación de los acuíferos.

Es importante considerar la contaminación de aguas subterráneas como un fenómeno relativo, puesto que todos los acuíferos en mayor o menor grado están contaminados con alguna sustancia indeseable. Más aún, se debe considerar al subsuelo no solamente como una reserva para explotación, sino como un almacenamiento de aguas sobrantes y como medio purificador de las aguas, al infiltrarse a través de él.

3. ECUACIONES GOBERNANTES DEL FENÓMENO

Para evaluar el grado de contaminación de aguas subterráneas, se deben tener en cuenta, la ley de Darcy y la ley de conservación de la masa líquida en un medio poroso; a partir de las cuales se obtiene la ecuación de movimiento para flujo bidimensional y saturado, que permite establecer las condiciones del flujo del agua (o solvente, en el caso de la contaminación) en el medio. Además se requiere introducir la ecuación de dispersión hidrodinámica o de transporte de contaminante en el medio.

3.1 ECUACIÓN DE DARCY

La ecuación de Darcy relaciona la velocidad de flujo con el gradiente de carga hidráulica, así:

$$q = -K \frac{dh}{ds} \quad (1)$$

donde q es la velocidad media aparente en un volumen representativo elemental, (LT^{-1}) definido como un volumen del medio tal que contenga suficientes partículas sólidas e intersticios para que pequeñas variaciones en su localización no afecten un promedio volumétrico realizado en él. A la velocidad aparente, q , se le conoce también como gasto o caudal específico, debido a que puede ser interpretado como el gasto a través de un área unitaria, normal a la dirección s .

Es importante considerar la contaminación de aguas subterráneas como un fenómeno relativo, puesto que todos los acuíferos en mayor o menor grado están contaminados con alguna sustancia indeseable. Más aún, se debe considerar al subsuelo no solamente como una reserva para explotación, sino como un almacenamiento de aguas sobrantes y como medio purificador de las aguas, al infiltrarse a través de él.

La velocidad real se define como la velocidad a la cual circula el fluido dentro de los poros y cavidades en cada punto de la masa de suelo y es una variable difícil de manejar al tratar de modelar el fenómeno de contaminación de aguas subterráneas, puesto que es imposible describir la geometría de los canales; esta velocidad puntual presenta magnitudes y

direcciones muy distintas las promedio del movimiento.

En general, la velocidad del flujo en acuíferos, se da en el rango de aplicación de la ecuación de Darcy, es decir en el flujo laminar. Existen indicios de un límite inferior al rango de aplicación, pero este carece de importancia en problemas de interés práctico.

3.2 ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE MASA LÍQUIDA

El principio de conservación de masa en un flujo de un medio saturado no permanente exige que el cambio temporal de masa dentro de un volumen de control, sea igual al flujo neto de masa que entra a dicho volumen, esto es:

$$-\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} \quad (2)$$

donde, ρ es la densidad del fluido, (ML^{-3}) y n , porosidad del medio

De la ecuación anterior, el término a la derecha indica el cambio temporal del volumen de fluido almacenado en el volumen de control. Dicho cambio se debe a la compresibilidad, tanto del medio poroso como del fluido, al variar la carga total en el volumen de control. De esta manera se puede establecer que:

3.3 ECUACIÓN DE FLUJO

Sustituyendo la ecuación de Darcy en la ecuación de conservación de masa líquida, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = Ss \frac{\partial h}{\partial t} - S \quad (6)$$

Considerando el coeficiente de permeabilidad K , como constante o independiente de x e y , la ecuación (6) puede expresarse como:

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} = \rho Ss \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3)$$

donde Ss es el almacenamiento específico del medio (L^{-1})

El almacenamiento específico es una propiedad del medio, para un fluido dado, que se define como el volumen del fluido almacenado cedido por un volumen unitario de medio poroso, al reducirse en una unidad la carga hidráulica sobre él. Puesto que en líquidos, la variación de la densidad, ρ , es muy pequeña en el intervalo de presiones comúnmente consideradas, se puede asumir como un valor constante y por lo tanto la ecuación (2), se puede expresar como:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} = Ss \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4)$$

Con el fin de tener en cuenta la existencia de una fuente o sumidero de fluido en el interior del volumen de control, se puede aumentar un término en la ecuación (4) así:

$$-\frac{\partial}{\partial x} q_x - \frac{\partial}{\partial y} q_y = Ss \frac{\partial h}{\partial t} - S \quad (5)$$

donde S es el gasto por unidad de volumen del medio poroso en la fuente o sumidero; tiene valor positivo para una fuente y negativo para un sumidero (T^{-1}).

$$K_{xx} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + K_{yy} \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + 2K_{xy} \frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = Ss \frac{\partial h}{\partial t} - S \quad (7)$$

La expresión anterior es la ecuación de flujo para un medio poroso homogéneo anisotrópico, con flujo bidimensional no permanente.

3.4 ECUACIÓN DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTE

La ecuación de transporte de contaminante, se obtiene aplicando el principio de conservación de masa a la sustancia contaminante en el fluido. Esto se logra igualando el flujo neto de contaminantes a través de las fronteras de un volumen de control con el cambio temporal de contaminantes en el interior de dicho volumen. El flujo a través de las fronteras tiene que incluir el transporte mecánico (debido al movimiento del solvente) y el producido por la difusión molecular. El cambio temporal en el interior del volumen debe incluir tanto el almacenamiento en la fase líquida como en la sólida, así como la existencia de fuentes o sumideros y el decaimiento del contaminante.

El transporte mecánico en dirección s , por unidad de área normal a s es igual a $C_a \cdot V_s'$ donde V_s es la dirección puntual en dirección s . Este transporte mecánico se lleva a cabo en parte por la velocidad media o transporte convectivo, y en parte por la variación de la velocidad con respecto a esta media o dispersión mecánica.

$$C_a (V_s + V_s') \quad (8)$$

donde, C_a es la concentración del contaminante en el fluido, (ML^{-3}); V_s es la velocidad

media, (LT^{-1}) y V_s' es la variación de la velocidad puntual con respecto a la media, (LT^{-1}).

La velocidad media, V_s , se obtiene como promedio espacial en un volumen del medio poroso, que incluye varios granos sólido y varios canales, o volumen representativo elemental.

El transporte por dispersión mecánica es proporcional al gradiente de concentraciones, lo que permite manejar en forma similar el transporte difuso. El transporte convectivo total a través de una cara del volumen de control, por ejemplo en la dirección x es:

$$J_{1x} = V_x C_\alpha n dA \quad (9)$$

y el transporte por dispersión mecánica,

$$J_{2x} = -(D'_{xx} \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D'_{xy} \frac{\partial C_\alpha}{\partial y}) n dA \quad (10)$$

donde, D_{ij} es el tensor de coeficiente de dispersión mecánica (L^2T^{-1}).

El transporte por difusión molecular, considerando la ley de Fick es:

$$J_{3x} = -(D''_{xx} \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D''_{xy} \frac{\partial C_\alpha}{\partial y}) n dA \quad (11)$$

donde, D''_{ij} es el tensor de coeficiente de difusión molecular (L^2T^{-1})

La masa de sustancias difusivas que pasa a través de una sección transversal dada por unidad de tiempo, es proporcional al gradiente de concentración. Esto se conoce como la primera ley de Frick.

Como se puede observar, el transporte dispersivo y difusivo se puede manejar a través de un coeficiente de dispersión hidrodinámico que incluye ambos efectos, D_{ij}^T

$$J_{2x+3x} = -(D_{xx}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D_{xy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial y})ndA \quad (12)$$

donde,

$$D_{ij}^T = D'_{ij} + D''_{ij} \quad (13)$$

El transporte total por unidad de área en dirección x se obtiene sumando las ecuaciones (9) y (12) y dividiendo entre dA .

$$J_x = V_x C_\alpha n - n(D_{xx}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D_{xy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial y}) \quad (14)$$

El signo negativo indica que la dispersión hidrodinámica transporta contaminante en la dirección de la concentración decreciente.

De manera análoga, en dirección y ,

$$J_y = V_y C_\alpha n - n(D_{xy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D_{yy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial y}) \quad (15)$$

La masa total de contaminante que entra al volumen de control es:

$$J_x(dy.1) + J_y(dx.1) \quad (16)$$

y la masa que sale,

$$(J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} dx)(dy.1) + (J_y + \frac{\partial J_y}{\partial y} dy)(dx.1) \quad (17)$$

Con lo que la entrada neta de la masa de contaminante es:

$$-(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y})dxdy \quad (18)$$

El cambio temporal de masa contaminante almacenada en el interior del volumen de control, se puede determinar con la fracción ocupada por la fase sólida $(1 - n)$, mientras que el cambio temporal de contaminante en la fase líquida está dado por la expresión

$$n \frac{\partial C_\alpha}{\partial t} dx.dy.1 \quad (19)$$

Definiendo a F , concentración en los sólidos, como una masa de contaminante por unidad de volumen de sólidos, el cambio temporal en la fase sólida es:

$$(1-n) \frac{\partial F_\alpha}{\partial t} dx.dy.1 \quad (20)$$

En las expresiones (19) y (20) se considera que la porosidad n , no varía en el tiempo y el volumen de control es de material homogéneo.

La disminución de contaminante en el interior del volumen de control, es un cambio temporal en la masa almacenada. Tanto la masa de contaminante en la fase líquida como en la sólida decaen; este cambio de masa almacenada por unidad de tiempo está dada por la ecuación

$$\lambda(nC_\alpha + (1-n)F_\alpha)dx.dy.1 \quad (21)$$

donde, λ es la constante de decaimiento (T^{-1}); en contaminantes radioactivos, está constante, $1/\lambda$ es el recíproco de la vida media de la substancia.

Al existir una fuente o sumidero en el interior del volumen de control, la masa que aparece o desaparece en él, por unidad de tiempo, debe ser considerada en el cambio temporal con el término

$$-(Q\dot{C}_\alpha)dx.dy.1 \quad (22)$$

donde, Q es el gasto del fluido por unidad de volumen del medio poroso, en la fuente valores positivos y en sumideros valores negativos, (T^{-1}); y \dot{C}_α es la concentración del contaminante α en el gasto, Q , (ML^{-3})

El signo negativo en la expresión (22) se debe a que, cuando Q tiene un valor positivo (fuente), $Q\dot{C}_\alpha$ representa una masa de contaminante que aparece en el interior del

volumen sin haber entrado a través de las fronteras del mismo.

El cambio temporal total se obtiene sumando las expresiones (19) y (22). Si se aplica el principio de conservación, es decir,

(Flujo neto a través de fronteras) = (Cambio de almacenamiento por unidad de tiempo).

Utilizando las expresiones (18) y (22) se obtiene:

$$-\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y}\right)dx.dy = n\frac{\partial C_\alpha}{\partial t}dx.dy + (1-n)\frac{\partial F_\alpha}{\partial t}dx.dy + \lambda(nC_\alpha + (1-n)F_\alpha)dx.dy - Q\dot{C}_\alpha dx.dy \quad (23)$$

y dividiendo entre el volumen $dx.dy.1$

$$-\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y}\right) = n\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} + (1-n)\frac{\partial F_\alpha}{\partial t} + \lambda nC_\alpha + \lambda(1-n)F_\alpha - Q\dot{C}_\alpha \quad (24)$$

Al introducir las ecuaciones (14) y (15) en la (24) se obtiene:

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left[V_x C_\alpha n - (D_{xx}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D_{xy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial y})n\right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[V_y C_\alpha n - (D_{xy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} + D_{yy}^T \frac{\partial C_\alpha}{\partial y})n\right] = n\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} + (1-n)\frac{\partial F_\alpha}{\partial t} + \lambda nC_\alpha + \lambda(1-n)F_\alpha - Q\dot{C}_\alpha \quad (25)$$

Desarrollando la parte izquierda de la expresión (25) y considerando al medio homogéneo, es decir, con porosidad constante y tensor D_{ij}^T constante en el espacio, se tiene

$$-C_\alpha n \frac{\partial V_x}{\partial x} - C_\alpha n \frac{\partial V_y}{\partial y} - nV_x \frac{\partial C_\alpha}{\partial x} - nV_y \frac{\partial C_\alpha}{\partial y} + nD_{xx}^T \frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial x^2} + 2nD_{xy}^T \frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial x \partial y} + nD_{yy}^T \frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial y^2} = n\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} + (1-n)\frac{\partial F_\alpha}{\partial t} + \lambda nC_\alpha + \lambda(1-n)F_\alpha - Q\dot{C}_\alpha \quad (26)$$

En un líquido incompresible que es el caso para el rango de presiones usuales en estos problemas, se sabe que,

$$\operatorname{div} \bar{V} = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} = 0 \quad (27)$$

La divergencia es un operador que se ejecuta sobre un vector y produce una cantidad escalar. Aplicándola a los primeros dos términos de la ecuación (26) y reordenando, se obtiene la ecuación de transporte de contaminante en un medio poroso homogéneo bidimensional.

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + (1-n) \frac{\partial F}{\partial t} = nD_{xx}^T \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + 2nD_{xy}^T \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + nD_{yy}^T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - nV_x \frac{\partial C}{\partial x} - nV_y \frac{\partial C}{\partial y} - \lambda(nC + (1-n)F) + Q\dot{C} \quad (28)$$

Si se define concentración en sólidos, C , como la masa de contaminante por unidad de masa del medio poroso, su relación con F es,

$$\rho C = (1-n)F \quad (29)$$

donde, ρ densidad del medio poroso seco (ML^{-3})

Al sustituir la ecuación (29) en la (28), se obtiene la fórmula de la ecuación de transporte.

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \frac{\partial C'}{\partial t} = nD_{xx}^T \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + 2nD_{xy}^T \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + nD_{yy}^T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - nV_x \frac{\partial C}{\partial x} - nV_y \frac{\partial C}{\partial y} - \lambda(nC + \rho C') + Q\dot{C} \quad (30)$$

donde se considera la densidad del medio poroso seco, ρ , constante en el tiempo. La ecuación (30) es sólo válida para un medio homogéneo, pero puede utilizarse para un medio no homogéneo si se divide este en elementos finitos que resulten homogéneos.

3.5 COMENTARIOS SOBRE LOS COEFICIENTES DE DISPERSIÓN

Como se mencionó anteriormente el coeficiente de dispersión hidrodinámica en la ecuación de transporte, $D_{ij}^T = D_{ij}' + D_{ij}''$, ecuación (13), incluye dos efectos conceptualmente distintos, la difusión molecular y la dispersión mecánica,

En esta ecuación D_{ij}^T es el tensor de coeficientes de dispersión hidrodinámica (L^2T^{-1}); D_{ij}' es el tensor de coeficientes de dispersión mecánica (L^2T^{-1}); D_{ij}'' es el tensor de coeficientes de difusión molecular (L^2T^{-1}).

El coeficiente de difusión molecular en un medio poroso está dado por:

$$D_{ij}'' = D_{\alpha\beta} T_{ij}^* \quad (31)$$

donde, D_{ab} es el coeficiente de difusión molecular del contaminante a en el solvente b , en un medio continuo (L^2T^{-1}); T_{ij}^* es el tensor de tortuosidad del medio poroso, adimensional.

El tensor de tortuosidad representa el efecto de la geometría de los canales en el medio poroso, sobre el movimiento difuso de las moléculas del contaminante.

El coeficiente de difusión molecular, D_{ij}'' , en un medio poroso, puede ser relacionado con el coeficiente de difusión de la sustancia contaminante en el agua, D_{ij}^0 , en medio continuo, y con el contenido volumétrico de agua en el medio poroso, que en el caso de medio saturado es igual a la porosidad n con

$$D_{ij}'' = D^0 (ae^{bn}) \quad (32)$$

donde a varía entre 0.005 y 0.001 y b se considera igual a 10.

Se ha visto que el coeficiente de dispersión mecánica se maneja en forma análoga al de difusión molecular, sin embargo su valor es proporcional a la velocidad del flujo

$$D'_L = a_I |V| \quad D'_T = a_{II} |V| \quad (33)$$

donde,

D'_L : coeficiente de dispersión mecánica en la dirección del flujo (L_2T^{-1})

D'_T : coeficiente de dispersión mecánica transversal, normal a la dirección del flujo (L^2T^{-1})

a_I : dispersividad longitudinal (L)

a_{II} : dispersividad transversal (L)

V : velocidad de flujo (LT^{-1})

Se observa que la dispersividad es un tensor de rango cuatro, a_{ijkl} y que finalmente, en flujo bidimensional en un medio isotrópico, se puede expresar en combinación de a_I y a_{II} .

En un modelo matemático que siga direcciones cartesianas fijas, no necesariamente colineal y normal a la del flujo, es necesario manejar coeficientes de dispersión mecánica en dichas direcciones. En un medio isotrópico la dispersión mecánica se puede evaluar así:

$$D'_{ij} = a_{II} V \delta_{ij} + (a_I - a_{II}) \frac{V_i V_j}{V} \quad (34)$$

donde, δ_{ij} es el delta de Kronecker,

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1, \text{ para } i = j \\ \delta_{ij} &= 0, \text{ para } i \neq j \end{aligned}$$

La importancia relativa de los tres tipos de transporte de contaminantes, difusivo, dispersivo y convectivo, varía con las características del medio poroso y del fluido solvente, así como con la velocidad del flujo.

En numerosos experimentos se ha observado que D'_L se puede expresar como una función del número de Peclet para difusión, de la siguiente manera:

$$\frac{D'_L}{D_m} = f(P_e) \quad P_e = \frac{Vd}{D_m} \quad (35)$$

donde, V es la velocidad de flujo (LT^{-1}); d es el diámetro medio de partículas del medio poroso (L); D_m es el coeficiente de difusión molecular entre los fluidos de interés en un medio continuo (L_2T^{-1}).

Estos experimentos muestran que existen varias zonas donde la relación entre los valores de D' y D'' varía de la siguiente manera:

- Para $P_e < 0.4$, la difusión molecular predomina sobre la dispersión mecánica.
- Para $0.4 < P_e < 5$, ambos efectos son del mismo orden de magnitud en la dirección del flujo.
- Para $5 < P_e < 100$, la dispersión mecánica predomina en el sentido del flujo, pero la difusión molecular debe tomarse en cuenta por su efecto transversal.
- Para valores mayores de P_e , pero permaneciendo en el rango de validez de la ley de Darcy, la dispersión mecánica es predominante en ambos sentidos y la difusión molecular puede despreciarse.
- Al estar por fuera del rango de aplicación de la ley de Darcy (puesto que al aumentar P_e en un cierto medio y para fluidos dados, aumenta V y, por lo tanto aumenta el número de Reynolds), la dispersión mecánica predomina, pero hay que tomar en cuenta efectos inerciales y de turbulencia.

En velocidades altas, el transporte convectivo es mucho más importante que el dispersivo. Para medir la relativa importancia de estos transportes se utiliza, en experimentos con columnas de material compactado, el número de Brenner, B , expresado como,

$$B = \frac{VL}{4D^T} \quad (36)$$

donde, L es la Longitud de la columna; D^T es el coeficiente de dispersión hidrodinámica (L^2T^{-1}).

3.6 DIFERENTES EXPRESIONES DE ADSORCIÓN

En la ecuación de transporte aparece la concentración en la matriz sólida, F , que se

convierte en otra variable del problema; se han propuesto numerosas expresiones que relacionan a C con F , entre las que se destacan:

- a. Transferencia en equilibrio,

$$F = K_{eq} \cdot C \quad (37)$$

- b. Transferencia en desequilibrio,

$$\frac{\partial F}{\partial t} = K_{deq1} - K_{deq2} F \quad (38)$$

- c. Transferencia de Freundlic,

$$F = K_{fr} \cdot C^{a_{fr}} \quad (39)$$

- d. Transferencia de Langmuir,

$$\frac{\partial F}{\partial t} = K_{lg1} \cdot C \cdot (F_m - F) - K_{lg2} \cdot F \quad (40)$$

- e. Transferencia bilineal,

$$\frac{\partial F}{\partial t} = K_{bl1} \cdot C \cdot (F_m - F) - K_{bl2} \cdot F \cdot (C_o - C) \quad (41)$$

donde:

$K_{eq}, K_{deq1}, K_{deq2}, K_{fr}, a_{fr}, K_{lg1}, K_{lg2}, K_{bl1}, K_{bl2}$ son constantes, F_m es la concentración máxima que se puede alcanzar en la matriz sólida del medio poroso, y C_o es la concentración inicial en el fluido.

Las expresiones (a) y (c) son llamadas adsorciones en equilibrio pues establecen un proceso de transferencia instantáneo entre dos fases, a diferencia de las (b), (d) y (e), llamadas cinéticas, que establecen un proceso de transferencia que depende del tiempo transcurrido.

Cuando, en las expresiones cinéticas, los coeficientes K_{deq2} , K_{lg2} ó K_{bl2} son nulos, se convierte en procesos irreversibles puesto que la transferencia sólo puede darse de la fase líquida a la fase sólida.

La transferencia de Langmuir hace depender la velocidad de transferencia fase líquida a fase sólida del grado de contaminación (relativo al máximo posible) en la fase sólida. La adsorción bilineal hace depender la velocidad de transferencia fase líquida - fase sólida del grado de contaminación relativo en ambas fases.

CONCLUSIONES

El movimiento descendente de la contaminación desde la superficie hasta los sistemas de aguas subterráneas, está acompañado por diversos mecanismos complejos de naturaleza física, química y biológica que deben involucrarse en la modelación del fenómeno. En su movimiento varios elementos pueden alterar su concentración o sufrir una transformación química, dependiendo de las características de los agentes contaminantes y de las propiedades del medio poroso, requiriéndose un amplio conocimiento de las características geológicas del lugar para la interpretación de los valores de concentraciones anómalas.

El punto de partida en el desarrollo de ecuaciones diferenciales que describen el transporte de solutos en materiales porosos, es considerar el flujo de los solutos hacia adentro y hacia afuera de un volumen elemental fijo en la región de flujo.

Si no fuera por el efecto de la heterogeneidad de los materiales geológicos naturales, el problema de la predicción y detección del comportamiento de los contaminantes en sistemas de flujo de aguas subterráneas, sería mucho menos complejo y fácilmente resuelto.

La zona no saturada merece especial atención ya que ella representa la primera y más importante defensa natural contra la contaminación de las aguas subterráneas, esto no es solamente por su posición estratégica entre la superficie y la napa freática, sino también porque su ambiente es generalmente más favorable para atenuación y eliminación de los contaminantes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Chang, A. C. & Page, A. L., (1980), *Fate of inorganic micro-contaminants during groundwater recharge*, California, pp 118-136.
- Chester, D. R., (1995), *Groundwater contamination*, Technomic Publishing Co., Inc, 139 pp.
- Christopher, M. P., Peterson, J. L. & Behnke, J., (1992), *Principles of contaminant hydrogeology*, Lewis Publishers, 211 pp.
- Freeze, R. A. & Cherry, J., (1979), *Groundwater*, Prentice Hall, 406 pp.
- Fried, J. J., (1985), *Groundwater Pollution*, Elsevier Scientific Publishing Company, 329 pp.
- Stephen, F. & Hirata, R., (1991), *Determinación del riesgo de contaminación de aguas subterráneas*. Lima: Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias del Ambiente, 81 pp.