

## Sumari de l'annex

<b>SUMARI DE L'ANNEX</b>	<b>1</b>
<b>A. SOLUCIONS ANALÍTiques DE L'ESTAT ESTACIONARI</b>	<b>3</b>
A.1. Resolucions de l'equació de Laplace	3
A.1.1. Resolució fixant la velocitat mitjana a l'entrada	4
A.1.2. Resolució fixant el nivell a l'entrada	4
A.2. Resolucions de l'equació de Poisson	5
A.2.1. Resolució fixant la velocitat mitjana a l'entrada	5
A.2.2. Resolució fixant el nivell a l'entrada	6
<b>B. TAULES DE MODELS I SOLUBILITAT D'OXIGEN</b>	<b>9</b>
<b>C. TAULES DEL MODEL MULTIMONOD</b>	<b>12</b>
<b>D. SENSIBILITAT DE LA SOLUCIÓ NUMÈRICA</b>	<b>15</b>
D.1. Variació de $K_b$	16
D.1.1. Simulació Kb1 amb $K_b = 12$ mg/L	16
D.1.2. Simulació Kb2 amb $K_b = 45$ mg/L	18
D.1.3. Simulació Kb2 amb $K_b = 1200$ mg/L	20
D.2. Variació de $T$	22
D.2.1. Simulació T1 amb $T = 8^\circ\text{C}$	22
D.2.2. Simulació Kb1 amb $T = 18^\circ\text{C}$	24
D.2.3. Simulació T2 amb $T = 23^\circ\text{C}$	26
D.2.4. Simulació T3 amb $T = 27^\circ\text{C}$	28
<b>E. SIMULACIONS DE L'AQUÍFER D'ARGENTONA</b>	<b>31</b>
E.1. Simulació R	31
E.2. Simulació A	34
E.3. Simulació 8T	37
E.4. Simulació 27T	40
E.5. Simulació 40OC	43
E.6. Simulació 80OC	46
E.7. Simulació P1	49
E.8. Simulació P2	52
E.9. Perfils de la velocitat mitjana i el nivell	55





## A. Solucions analítiques de l'estat estacionari

Per tal de resoldre l'equació parabòlica diferencial analíticament, cal suposar que s'arriba a l'estat estacionari molt ràpidament. El terme variable amb el temps en l'equació del flux d'aigües subterrànies en aqüífers s'anul·la.

$$K_x \frac{\delta^2 h}{\delta x^2} + q_s = S_s \frac{\delta h}{\delta t} = 0 \quad (\text{Eq. A.1.})$$

$$\frac{\delta^2 h}{\delta x^2} = \frac{-q_s}{K_x} \quad (\text{Eq. A.2.})$$

Existeixen dues solucions analítiques de l'estat estacionari segons hi hagi o no el terme  $q_s$ , ja que aquest, depèn de  $h$ : Si no hi ha  $q_s$ , l'equació a resoldre analíticament és de Laplace:

$$\frac{\delta^2 h}{\delta x^2} = 0 \quad (\text{Eq. A.3.})$$

En canvi, si hi ha  $q_s$ , l'equació a resoldre és de Poisson. S'agafa d'exemple una situació on hi ha pluja i no hi ha drenatge. Segons les teories de Dupuit (1863), es pot relacionar el flux de Darcy amb la intensitat de pluja com:

$$q_s = q_p - q_d \quad (\text{Eq. A.4.})$$

$$q_p = \frac{W}{h} \quad (\text{Eq. A.5.})$$

Com no hi ha drenatge ( $q_d = 0$ ) i si que hi ha pluviositat, s'arriba a l'equació de Forchheimer (1901) que és de Poisson:

$$\frac{\delta^2 h}{\delta x^2} = \frac{-W}{K_x \cdot h} \quad (\text{Eq. A.6.})$$

$$\frac{\delta^2 (h^2)}{\delta x^2} = \frac{-2W}{K_x} \quad (\text{Eq. A.7.})$$

### A.1. Resolució de l'equació de Laplace

$$\frac{\delta^2 h}{\delta x^2} = 0 \quad (\text{Eq. A.8.})$$

Integrant l'equació apareix la primera constant.

$$\frac{\delta h}{\delta x} = C_1 \quad (\text{Eq. A.9.})$$



Integrant per segona vegada apareix la segona constant d'integració. La solució és lineal.

$$h = C_1 x + C_2 \quad (\text{Eq. A.10.})$$

### A.1.1. Resolució fixant la velocitat mitjana a l'entrada

Ara cal solucionar l'equació de Laplace aplicant dues condicions de contorn. Hi ha dos casos segons la condició de contorn a  $x=0$  que es desitgi. Seguidament es resol fixant la velocitat mitjana a l'entrada. Més endavant es resol fixant el nivell a l'entrada.

$$1. \quad \text{per } x = L, h(t) = h_L \quad h_L = C_1 L + C_2 \quad (\text{Eq. A.11.})$$

$$2. \quad \text{per } x = 0, v = v_0 = \frac{-K_x}{n} \left( \frac{\delta h}{\delta x} \right)_{x=0} \quad \text{que es pot reescriure com: } \left( \frac{\delta h}{\delta x} \right)_{x=0} = \frac{-n \cdot v_0}{K_x}$$

(Eq. A.12.)

Aplicant aquestes condicions de contorn, les solucions de les dues constants són:

$$C_1 = \frac{-n \cdot v_0}{K_x} \quad (\text{Eq. A.13.})$$

$$C_2 = \frac{n \cdot v_0}{K_x} L + h_L \quad (\text{Eq. A.14.})$$

La solució generalitzada del perfil del nivell quan  $q_s = 0$  i fixant la velocitat mitjana a l'entrada és:

$$h = \frac{n \cdot v_0}{K_x} (L - x) + h_L \quad (\text{Eq. A.15.})$$

Es pot reescriure com la llei de Darcy:

$$\frac{h - h_L}{L - x} = \frac{q_0}{K_x} \quad (\text{Eq. A.16.})$$

### A.1.2. Resolució fixant el nivell a l'entrada

Ara es resol l'equació de Laplace utilitzant l'altra condició de contorn. Es fixa el nivell  $h$  a  $x=0$ .

$$1. \quad \text{per } x = L, h(t) = h_L \quad h_L = C_1 L + C_2 \quad (\text{Eq. A.17.})$$



$$2. \text{ per } x = 0, h(t) = h_0 \quad h_0 = C_2 \quad (\text{Eq. A.18.})$$

La constant  $C_1$  és:

$$C_1 = \frac{h_L - h_0}{L} \quad (\text{Eq. A.19.})$$

La solució generalitzada del perfil del nivell quan  $q_s = 0$  i fixant el nivell a l'entrada és:

$$h = \left( \frac{h_L - h_0}{L} \right) x + h_0 \quad (\text{Eq. A.20.})$$

## A.2. Resolució de l'equació de Poisson

$$\frac{\delta^2(h^2)}{\delta x^2} = \frac{-2W}{K_x} \quad (\text{Eq. A.21.})$$

Integrant l'equació apareix la primera constant.

$$\frac{\delta(h^2)}{\delta x} = \frac{-2W}{K_x} x + C_1 \quad (\text{Eq. A.22.})$$

Integrant per segona vegada apareix la segona constant d'integració.

$$h^2 = \frac{-W}{K_x} x^2 + C_1 x + C_2 \quad (\text{Eq. A.23.})$$

### A.2.1. Resolució fixant el nivell a l'entrada

Ara cal solucionar l'equació de Poisson aplicant dues condicions de contorn. Hi ha dos casos segons la condició de contorn a  $x=0$  que es desitgi. Seguidament es resol fixant el nivell a l'entrada. Més endavant es resol fixant la velocitat mitjana a l'entrada.

$$1. \text{ per } x = L, h(t) = h_L \quad h_L^2 = \frac{-W}{K_x} L^2 + C_1 L + C_2 \quad (\text{Eq. A.24.})$$

$$2. \text{ per } x = 0, h(t) = h_0 \quad h_0^2 = C_2 \quad (\text{Eq. A.25.})$$

Aplicant aquestes condicions de contorn, les solucions de les dues constants són:



$$C_1 = \frac{h_L^2 + \frac{W}{K_x} L^2 - C_2}{L} \quad (\text{Eq. A.26.}) \quad C_2 = h_0^2 \quad (\text{Eq. A.27.})$$

Per tant  $h^2$  escrita de forma parabòlica:

$$h^2 = \frac{-W}{K_x} x^2 + \frac{h_L^2 + \frac{W}{K_x} L^2 - h_0^2}{L} x + h_0^2 \quad (\text{Eq. A.28.})$$

i la solució generalitzada del perfil del nivell quan  $q_s \neq 0$  és:

$$h = \sqrt{\frac{-W}{K_x} x^2 + \left(\frac{h_L^2 - h_0^2}{L} + \frac{WL}{K_x}\right) x + h_0^2} \quad (\text{Eq. A.29.})$$

Aquesta és la solució general de l'equació de Forchheimer donada per Chesnaux (2004). S'assumeix que  $h_0 > h_L$ .

Solucionant per la velocitat:

$$v_x = \frac{1}{n_e} \frac{W x - \frac{K_x (h_L^2 - h_0^2)}{2L} - \frac{WL}{2}}{\sqrt{\frac{-W}{K_x} x^2 + \left(\frac{h_L^2 - h_0^2}{L} + \frac{WL}{K_x}\right) x + h_0^2}} \quad (\text{Eq. A.30.})$$

### A.2.2. Resolució fixant la velocitat mitjana a l'entrada

Ara es resol l'equació de Poisson utilitzant l'altra condició de contorn. Es fixa la velocitat mitjana  $v_x$  a  $x=0$ .

$$1. \text{ per } x = L, h(t) = h_L \quad h_L^2 = \frac{-W}{K_x} L^2 + C_1 L + C_2 \quad (\text{Eq. A.31.})$$

$$2. \text{ per } x = 0, v = v_0 = \frac{-K_x}{n} \left(\frac{\delta h}{\delta x}\right)_{x=0} \text{ que es pot reescriure com: } \left(\frac{\delta h}{\delta x}\right)_{x=0} = \frac{-n \cdot v_0}{K_x}$$

(Eq. A.32.)

Com la primera condició de contorn és la mateixa que en l'apartat A.1.1., es relaciona  $v_0$  amb  $h_0$  a partir de la solució de la velocitat mitjana (Eq. A.30.). Es fixe  $x=0$ :



$$v_0 = \frac{1}{n_e} \frac{-K_x(h_L^2 - h_0^2) - \frac{WL}{2}}{2L h_0} \quad (\text{Eq. A.33.})$$

Quan es fa l'arrel de  $h_0$  només es considera la solució positiva ja que el nivell no pot ser negatiu. S'aïlla  $h_0$  de l'equació quadràtica resultant:

$$\frac{K_x h_0^2}{2L} - v_0 n_e h_0 - \frac{K_x h_L^2}{2L} - \frac{WL}{2} = 0 \quad (\text{Eq. A.34.})$$

I a partir de la solució positiva de  $h_0$ , es pot utilitzar en la mateixa equació del perfil del nivell (Eq. 29.) i de la velocitat (Eq. 30.). La solució generalitzada del perfil del nivell quan  $q_s \neq 0$  és:

$$h = \sqrt{\frac{-W}{K_x} x^2 + \left(\frac{h_L^2 - h_0^2}{L} + \frac{WL}{K_x}\right) x + h_0^2} \quad (\text{Eq. A.29.})$$

Aquesta és la solució general de l'equació de Forchheimer donada per Chesnaux (2004). S'assumeix que  $h_0 > h_L$ .

Solucionant per la velocitat:

$$v_x = \frac{1}{n_e} \frac{W x - \frac{K_x(h_L^2 - h_0^2)}{2L} - \frac{WL}{2}}{\sqrt{\frac{-W}{K_x} x^2 + \left(\frac{h_L^2 - h_0^2}{L} + \frac{WL}{K_x}\right) x + h_0^2}} \quad (\text{Eq. A.30.})$$







## B. Taules de models i solubilitat d'oxigen

TABLE 3-1. METHODS USED BY SELECTED MODELS TO PREDICT DISSOLVED OXYGEN SATURATION

Equation Number	Model Name (or Description)	Model Reference	Equation or Method for Dissolved Oxygen Saturation $C_s$ (mg/l)
3-1	Limnological Model for Eutrophic Lakes and Impoundments	Baca and Arnett, 1976	$C_s = 14.652 - (0.41022 T) + (0.007991 T^2) - (7.7774 \times 10^{-5} T^3)$ $T = ^\circ C$
3-1	EXPLORE-1	Battelle, 1973	Same as above
3-1	Level III-Receive	Medina, 1979	Same as above
3-1	Water Quality Model for Large Lakes: Part 2: Lake Erie	D1 Toro and Connolly, 1980	Same as above
3-3	QUAL-II	Roesner, <i>et al.</i> , 1981	$C_s = 24.89 - 0.4259 T + 0.003734 T^2 - 1.328 \times 10^{-5} T^3$ $T = ^\circ F$
3-4	CE-QUAL-R1	U.S. Army COE, 1982	$C_s = (14.6)e^{-(0.027767 - 0.00027 T + 0.000002 T^2) T}$ $T = ^\circ C$
3-5	One Dimensional Steady State Stream Water Quality Model	Bauer, <i>et al.</i> , 1979	$C_s = (14.652 - 0.41022 T + 0.007910 T^2 - 7.7774 \times 10^{-5} T^3) (BP/29.92)$ $T = ^\circ C$ BP = Barometric pressure (in.Hg)
3-5	HSPF (Release 7.0)	Imhoff, <i>et al.</i> , 1981	Same as above
3-6	DOSAG and DOSAG3	Duke and Masch, 1973	$(14.62 - (0.3898 T) + (0.006969 T^2) - (5.897 \times 10^{-5} T^3))$ $[1.0 - (6.97 \times 10^{-6} E)]^{5.167}$ $T = ^\circ C$ E = Elevation, ft.
3-7	Pearl Harbor Version of Dynamic Estuary Model (DEM)	Genet <i>et al.</i> , 1974	$C_s = 14.5532 - .38217 T + .0054258 T^2 - CL(1.665 \times 10^{-4} - 5.866 \times 10^{-6} T + 9.796 \times 10^{-8} T^2)$ $T = ^\circ C$ CL = Chloride concentration (ppm)
3-8	RECEIV-II	Raytheon Co., 1974, and Weiss, 1970	$C_s = 1.4277 \exp[-173.492 + 24963.39/T + 143.3483 \ln(T/100.) - 0.218492 T + S(-0.033096 + 0.00014259 T - 0.00000017 T^2)]$ $T_s = ^\circ K = ^\circ C + 273.15$ S = Salinity (ppt)

Figura B.1. Models per calcular la solubilitat d'oxigen en l'aigua segons la temperatura (Font: [http://www.ecy.wa.gov/programs/eap/models/rates\\_and\\_constants/Sect3-1.pdf](http://www.ecy.wa.gov/programs/eap/models/rates_and_constants/Sect3-1.pdf), data de consulta 7/5/12)



Solubility of oxygen in mg/L as a function of temperature (mount air barometric pressure = 760 mm Hg, salinity = 0.0 ppt) (Source: EIFAC, 1986)

Temp (°C)	TABLE I									
	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
5	12.757	12.725	12.692	12.659	12.627	12.595	12.563	12.531	12.499	12.467
6	12.436	12.404	12.373	12.342	12.311	12.280	12.249	12.218	12.188	12.158
7	12.127	12.097	12.067	12.037	12.008	11.978	11.949	11.919	11.880	11.861
8	11.832	11.803	11.774	11.746	11.717	11.689	11.661	11.632	11.604	11.577
9	11.549	11.521	11.493	11.466	11.439	11.412	11.384	11.357	11.331	11.304
10	11.277	11.251	11.224	11.198	11.172	11.145	11.119	11.093	11.068	11.042
11	11.016	10.991	10.965	10.940	10.915	10.890	10.865	10.884	10.815	10.791
12	10.766	10.741	10.717	10.693	10.669	10.645	10.620	10.597	10.573	10.549
13	10.525	10.502	10.478	10.455	10.432	10.409	10.386	10.363	10.340	10.317
14	10.294	10.271	10.249	10.226	10.204	10.182	10.160	10.137	10.115	10.094
15	10.072	10.050	10.028	10.007	9.985	9.964	9.942	9.921	9.900	9.879
16	9.858	9.837	9.816	9.795	9.774	9.753	9.733	9.712	9.692	9.672
17	9.651	9.631	9.611	9.591	9.571	9.551	9.531	9.512	9.492	9.472
18	9.453	9.433	9.414	9.395	9.375	9.356	9.337	9.318	9.299	9.280
19	9.261	9.242	9.224	9.205	9.187	9.168	9.150	9.131	9.113	9.095
20	9.077	9.058	9.040	9.022	9.004	8.987	8.969	8.951	8.933	8.916
21	8.989	8.881	8.863	8.846	8.829	8.812	8.794	8.777	8.760	8.743
22	8.726	8.709	8.693	8.676	8.659	8.642	8.626	8.609	8.583	8.576
23	8.560	8.544	8.528	8.511	8.495	8.479	8.463	8.447	8.431	8.415
24	8.400	8.384	8.368	8.352	8.337	8.321	8.306	8.290	8.275	8.260
25	8.244	8.29	9.214	8.199	8.184	8.168	8.153	8.139	8.124	8.109
26	8.094	8.079	8.065	8.050	8.035	8.021	8.006	7.992	7.977	7.963
27	7.949	7.934	7.920	7.906	7.892	7.878	7.864	7.850	7.836	7.822
28	7.808	7.794	7.780	7.766	7.753	7.739	7.725	7.712	7.698	7.685
29	7.671	7.658	7.645	7.631	7.618	7.605	7.592	7.578	7.565	7.552
30	7.539	7.526	7.513	7.500	7.487	7.475	7.462	7.449	7.436	7.424

Figura B.2. Solubilitat d'oxigen en l'aigua segons la temperatura (Font: FAO

<http://www.fao.org/docrep/field/003/AC183E/AC183E04.htm>, data de consulta 28/4/12)





### C. Taules del model multimonod

Table 4.2. Overview of published Monod kinetic reaction parameters in denitrification models.

Parameter	Symbol	Value	Units	Remarks	Reference
Maximum growth rate for aerobic bacteria	$\mu_{maxO_2}$	3	$d^{-1}$	Calibrated. Denitrification in aquifer material. Ambient temperature.	(Schäfer <i>et al.</i> , 1998)
		10			
Maximum growth rate for denitrifying bacteria	$\mu_{maxNO_3}$	1.5-2	$d^{-1}$	Calibrated. <i>In situ</i> denitrification of groundwater.	(Kinzelsbach <i>et al.</i> , 1991)
		2.75			
		1.4			
		1.5-2			
Maximum growth rate for heterotrophic bacteria	$\mu_{maxH}$	0.65	$d^{-1}$	Calibrated. Denitrification in aquifer material.	(Killingstad <i>et al.</i> , 2002)
		1.40			
Decay rate constant for aerobic bacteria	$h_{oa}$	6.0	$d^{-1}$	Typical parameter values at 20°C and neutral pH. WWTP. <sup>a</sup>	(Henze <i>et al.</i> , 2000)
		1.18			
Decay rate constant for denitrifying bacteria	$h_{na}$	0.3	$d^{-1}$	Assumed value (10% of the maximum growth rate).	(Schäfer <i>et al.</i> , 1998)
		0.15			
Decay rate constant for heterotrophic bacteria	$h_{na}$	0.275	$d^{-1}$	Calibrated. <i>In situ</i> denitrification of groundwater.	(Kinzelsbach <i>et al.</i> , 1991)
		0.15			
Inhibition coefficient for oxygen	$K_{o-1}$	0.05	$d^{-1}$	Assumed value (10% of the maximum growth rate).	(Schäfer <i>et al.</i> , 1998)
		0.01			
Decay rate constant for heterotrophic bacteria	$b_H$	0.05	$d^{-1}$	Calibrated. <i>In situ</i> denitrification of groundwater.	(Killingstad <i>et al.</i> , 2002)
		0.01			
Saturation coefficient for oxygen	$K_{O_2}$	0.62	$mg\ O_2\ L^{-1}$	Typical parameter values at 20°C and neutral pH. WWTP.	(Henze <i>et al.</i> , 2000)
		0.05			
Saturation coefficient for nitrate	$K_{NO_3}$	6.4	$mg\ NO_3\ L^{-1}$	Calibrated. Denitrification in aquifer material. Ambient temperature.	(Schäfer <i>et al.</i> , 1998)
		0.001			
Saturation coefficient for substrate	$K_S$	0.001	$mg\ O_2\ L^{-1}$	Calibrated. Denitrification in aquifer material. Ambient temperature.	(Doussan <i>et al.</i> , 1997)
		0.2			
Saturation coefficient for nitrate	$K_{NO_3}$	0.2	$mg\ O_2\ L^{-1}$	Typical parameter values at 20°C and neutral pH. WWTP.	(Henze <i>et al.</i> , 2000)
		2.2			
Saturation coefficient for substrate	$K_S$	0.9	$mg\ NO_3\ L^{-1}$	Calibrated. Denitrification in aquifer material. Ambient temperature.	(Killingstad <i>et al.</i> , 2002)
		7			
Saturation coefficient for substrate	$K_S$	20	$mg\ COD\ L^{-1}$	Typical parameter values at 20°C and neutral pH. WWTP.	(Henze <i>et al.</i> , 2000)
		343			

<sup>a</sup> WWTP: wastewater treatment plant.

<sup>b</sup> COD: chemical oxygen demand.

Figura C.1. Taula de paràmetres multimonod, Calderer (2010)



**Table 4.5. Kinetic and stoichiometric model for enhanced denitrification in groundwater systems.**

Component, <i>i</i> →	OC	X <sub>H</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	O <sub>2</sub>	Process rate, <i>p<sub>j</sub></i> (M·L <sup>-3</sup> ·T <sup>-1</sup> )
Process, <i>j</i> ↓					
<b>1. Growth of X<sub>H</sub></b>					
<b>1.1 Growth of X<sub>H</sub> in aerobic conditions</b>	$-\frac{1}{Y_H}$	1	$-\frac{R}{Y_H}$	$-\frac{W}{Y_H}$	$\frac{OC}{OC + K_{OC}} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{O_2}} \cdot X_H$
<b>1.2 Growth of X<sub>H</sub> in anoxic conditions</b>	$-\frac{1}{Y_H}$	1	$-\frac{Z}{Y_H}$		$\frac{\mu_{max,H} \cdot OC}{OC + K_{OC}} \cdot \frac{NO_3^-}{NO_3^- + K_{NO_3}} \cdot \frac{K_{O_2,L}}{O_2 + K_{O_2,L}} \cdot \eta \cdot X_H$
<b>2. Decay of X<sub>H</sub></b>		-1			$b_H \cdot X_H$
Observed conversion rates [ML <sup>-3</sup> T <sup>-1</sup> ]	$r_i = \sum_j v_{ij} p_j$				
Stoichiometric parameters Heterotrophic growth yield: <i>Y<sub>H</sub></i> Stoichiometric ratios: <i>Z</i> (NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> /OC anoxic conditions) <i>R</i> (NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> /OC aerobic conditions) <i>W</i> (O <sub>2</sub> /OC)	Organic Carbon [M(OC)·L <sup>-3</sup> ]	Active heterotrophic biomass [M(cells)·L <sup>-3</sup> ]	Nitrate [M(NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> )·L <sup>-3</sup> ]	Oxygen [M(O <sub>2</sub> )·L <sup>-3</sup> ]	Kinetic parameters Heterotrophic growth and decay: <i>μ<sub>max,H</sub></i> , <i>K<sub>OC</sub></i> , <i>K<sub>O<sub>2</sub></sub></i> , <i>K<sub>NO<sub>3</sub></sub></i> , <i>K<sub>NO<sub>3</sub></sub></i> , <i>b<sub>H</sub></i> , Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: <i>η</i>

Figura C.2. Taula resum de la cinètica i estequiometria de la desnitrificació, Calderer (2010)





## D. Sensibilitat de la solució numèrica

Taula amb els paràmetres de referència per les simulacions de la sensibilitat numèrica justificats en el capítol 4.7. de la memòria. Corresponen a la simulació Kb1. El paràmetre  $K_b$  en blau es varia en l'apartat D.1. i la temperatura  $T$  en taronja es varia en l'apartat D.2.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	76	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	4	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	76	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	90	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coeficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.42	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coeficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	2	m
$T$	Temps d'Integració	100	h

Taula D.1. Variables d'entrada de la simulació Kb1



### D.1. Variació de $K_b$

#### D.1.1. Simulació Kb1 amb $K_b = 12 \text{ mg/L}$

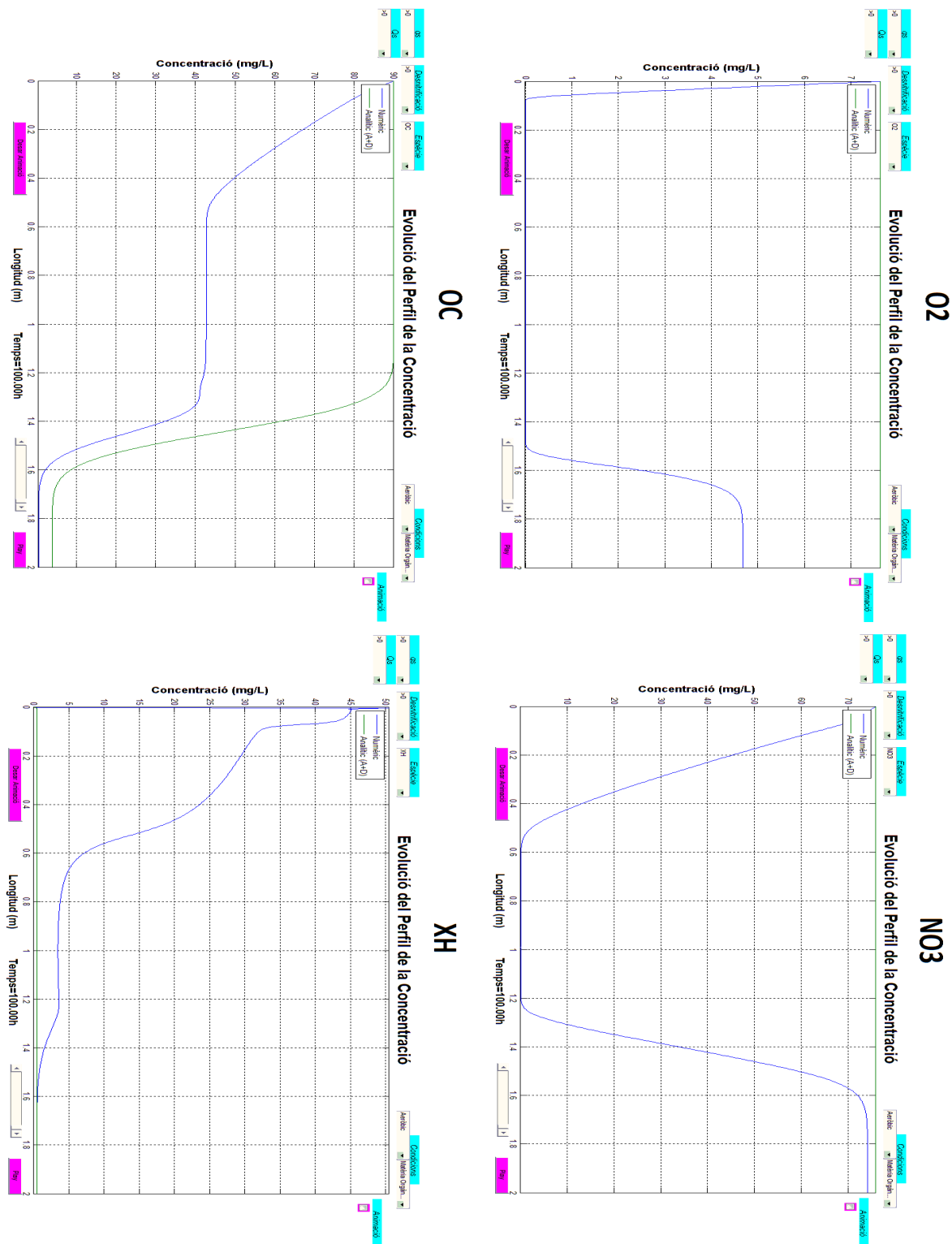


Figura D.1. Evolucions dels perfils de les concentracions amb  $K_b=12\text{mg/L}$ , simulació Kb1





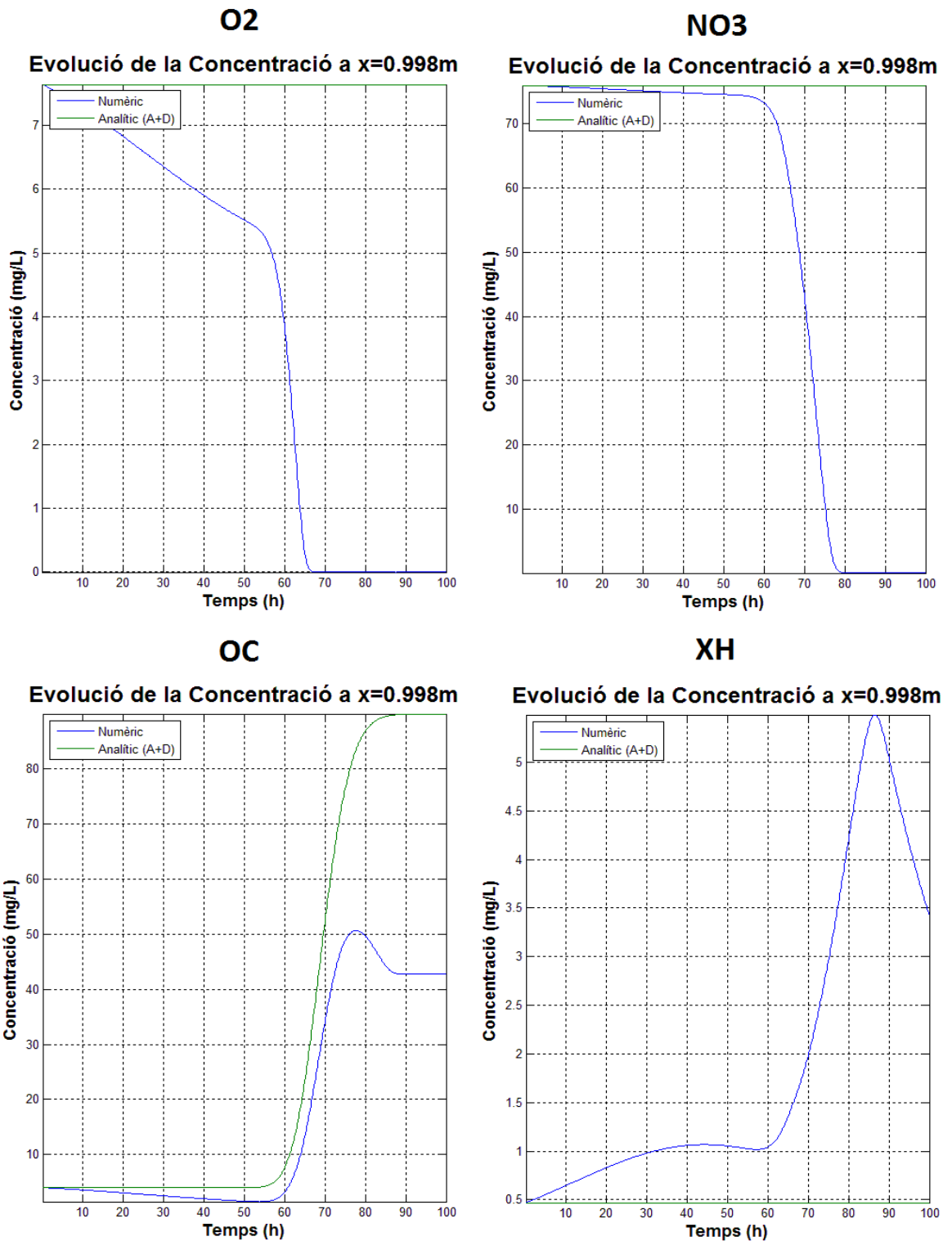


Figura D.2. Evolucions de les concentracions a  $x=1\text{m}$  i  $K_b=12\text{mg/L}$ , simulació Kb1



### D.1.2. Simulació Kb2 amb $K_b = 45 \text{ mg/L}$

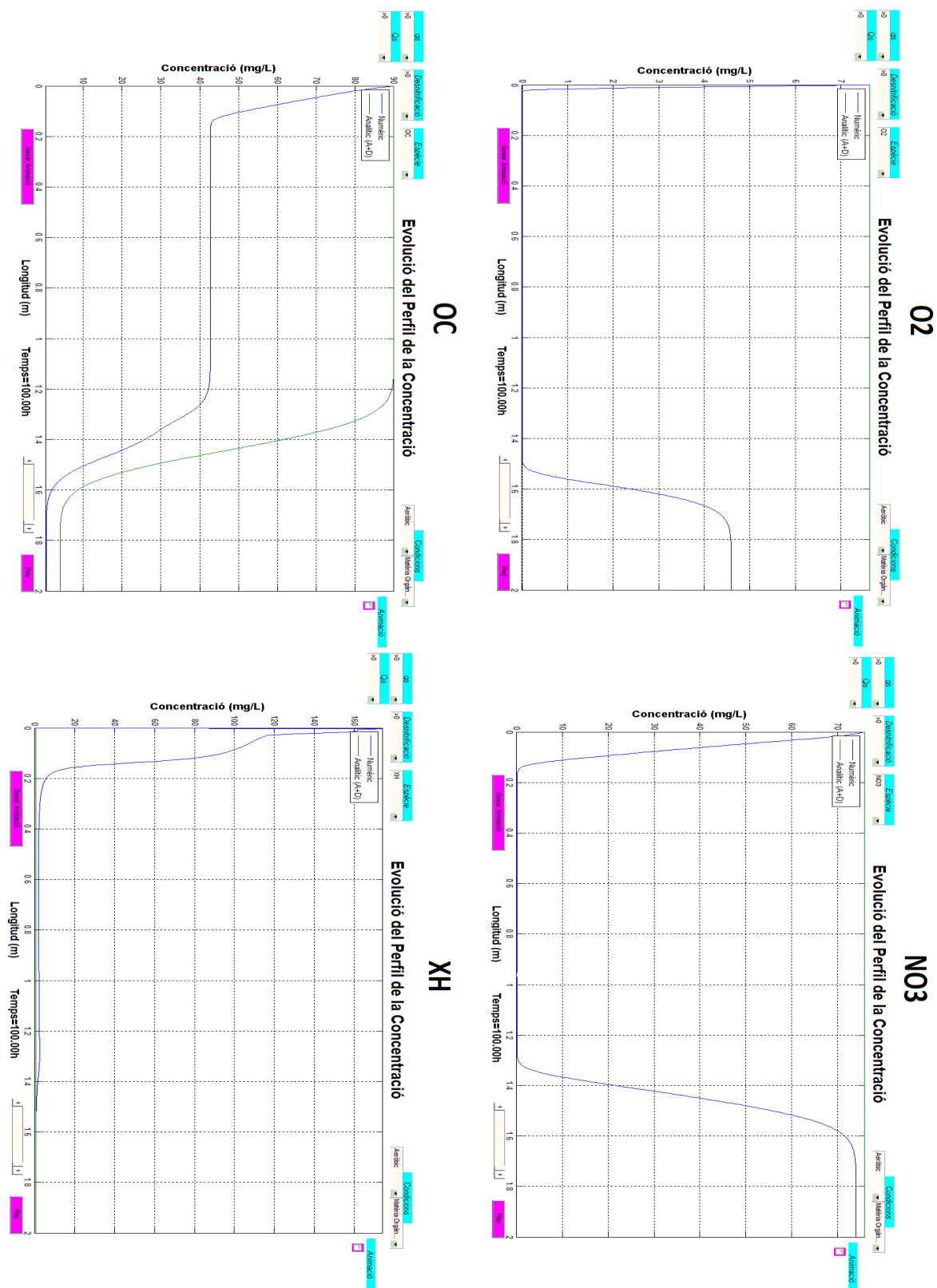


Figura D.3. Evolucions dels perfils de les concentracions amb  $K_b=45\text{mg/L}$ , simulació Kb2



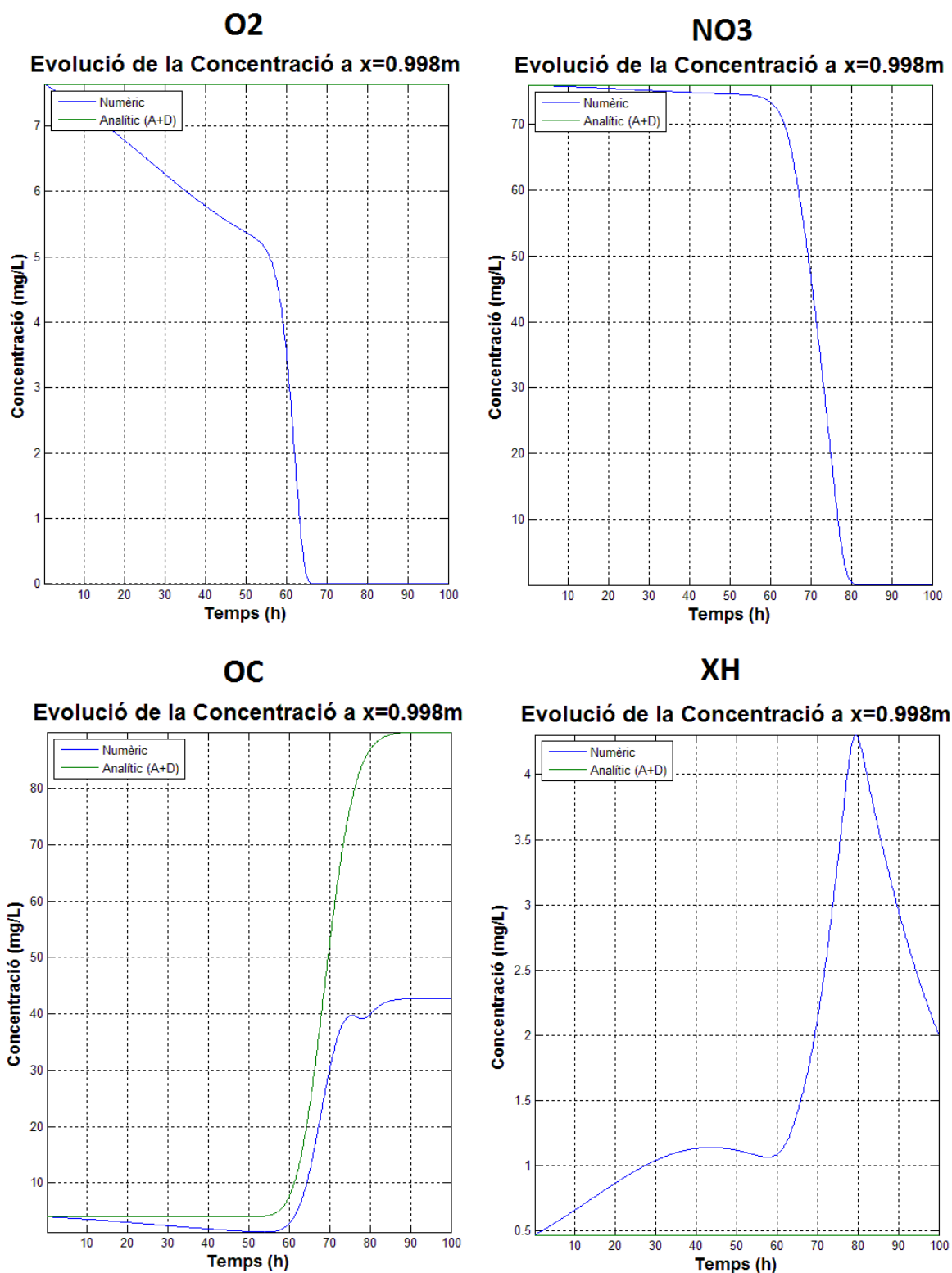


Figura D.4. Evolucions de les concentracions a  $x=1\text{m}$  i  $K_b=45\text{mg/L}$ , simulació Kb2



D.1.3. Simulació Kb3 amb  $K_b = 1200 \text{ mg/L}$

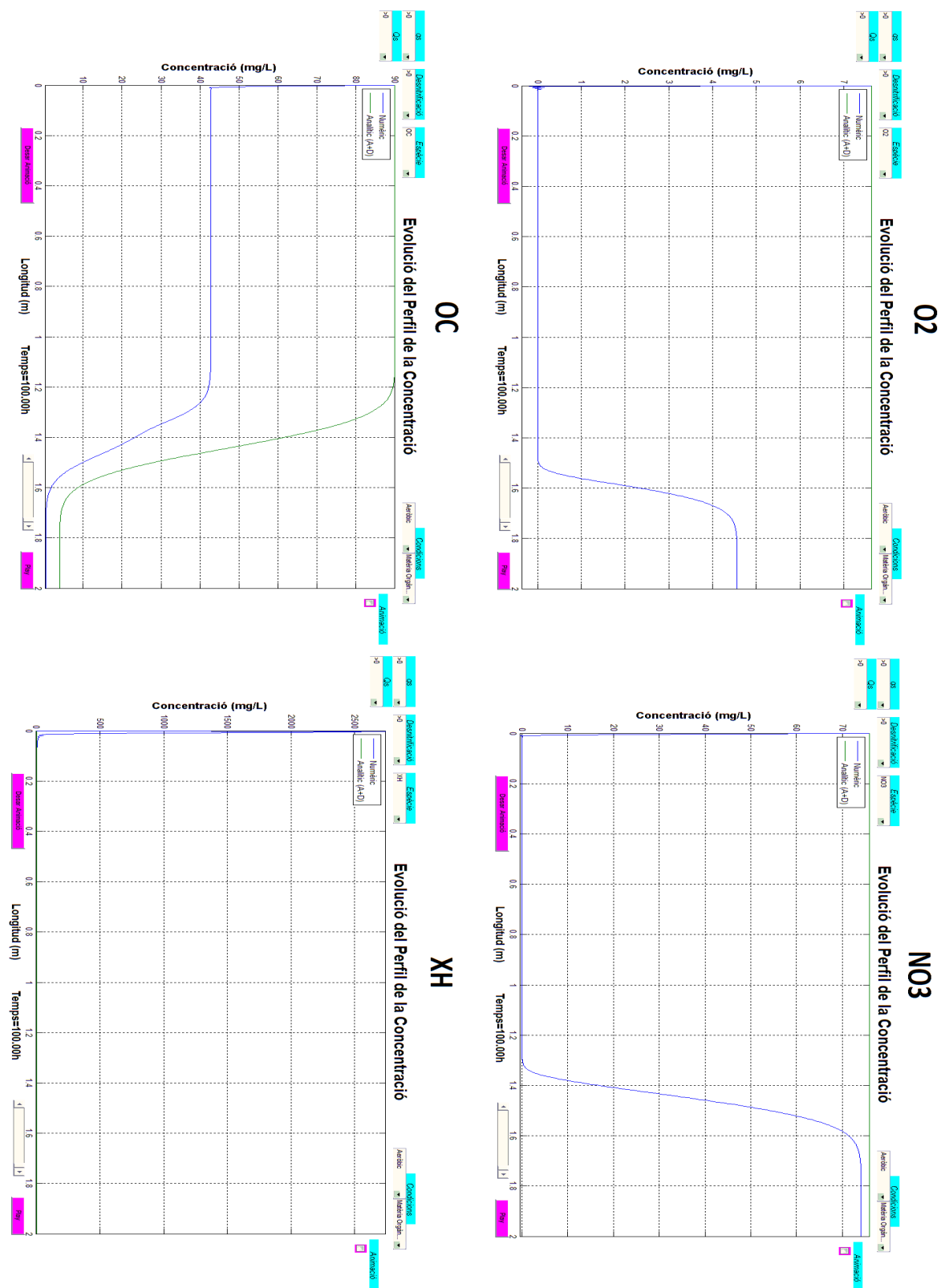


Figura D.5. Evolucions dels perfils de les concentracions amb  $K_b=1200\text{mg/L}$ , simulació Kb3



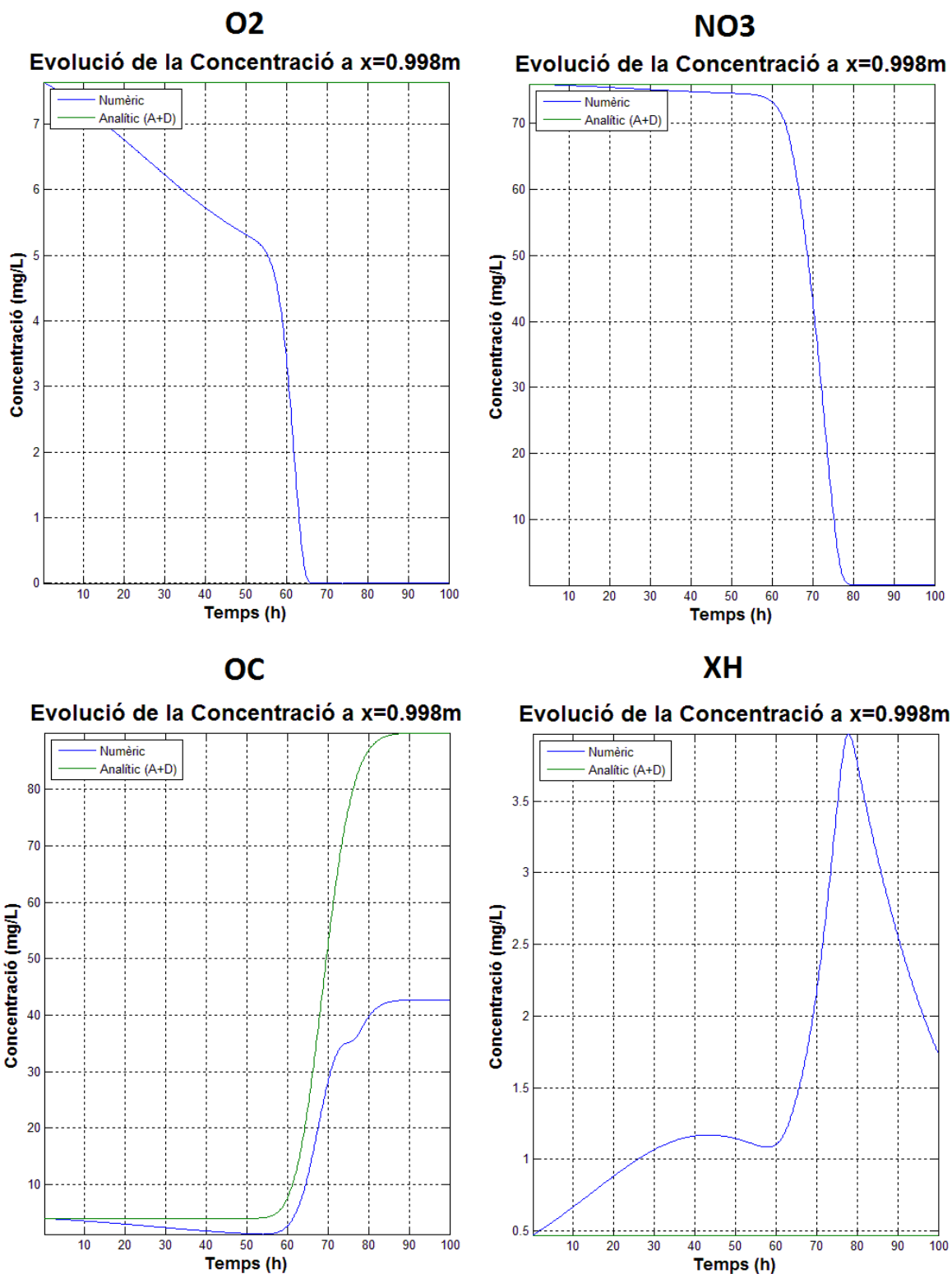


Figura D.6. Evolucions de les concentracions a  $x=1\text{m}$  i  $K_b=1200\text{mg/L}$ , simulació Kb3



## D.2. Variació de T

### D.2.1. Simulació T1 amb $T = 8^{\circ}\text{C}$

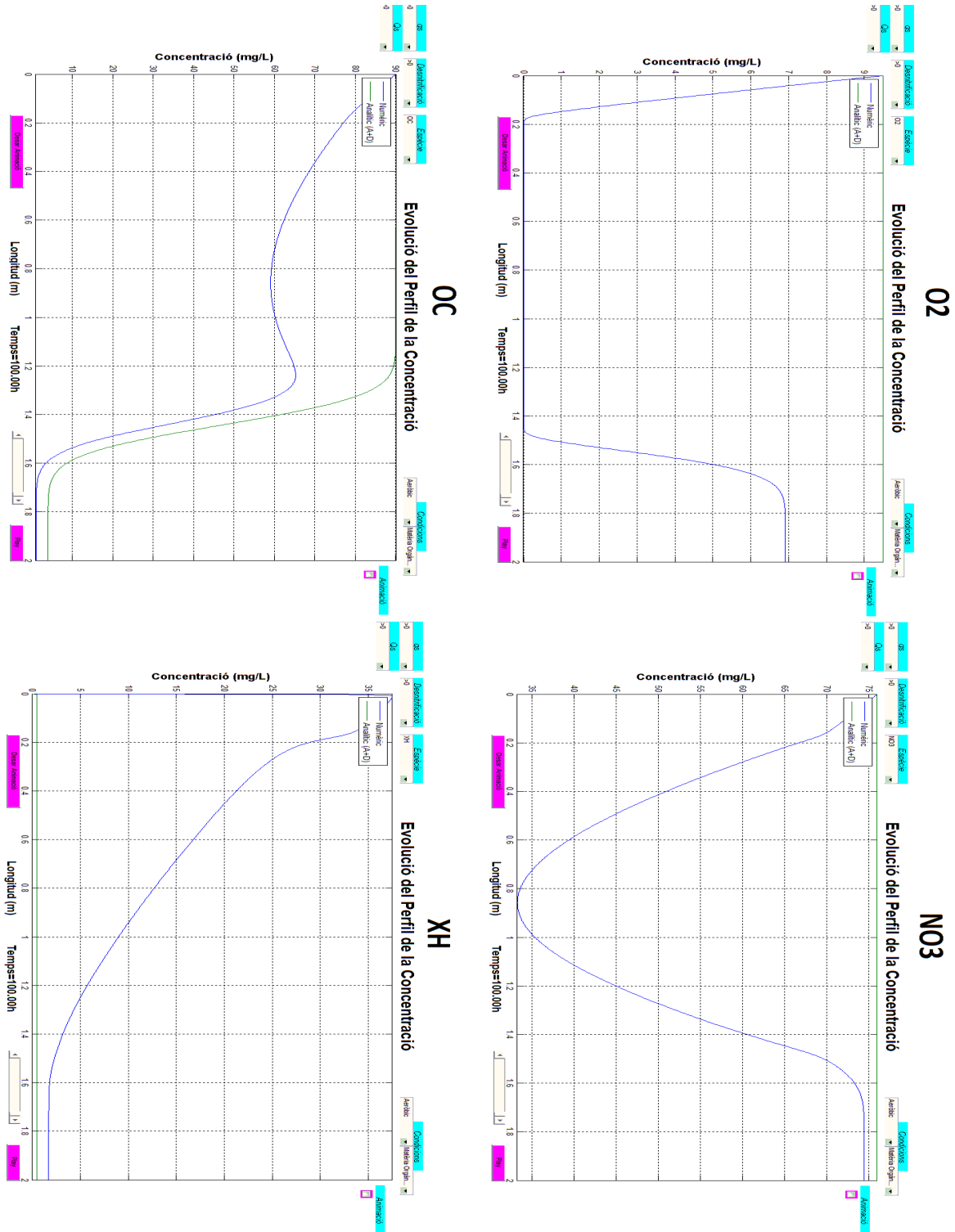


Figura D.7. Evolucions dels perfils de les concentracions a  $T=8^{\circ}\text{C}$ , simulació T1



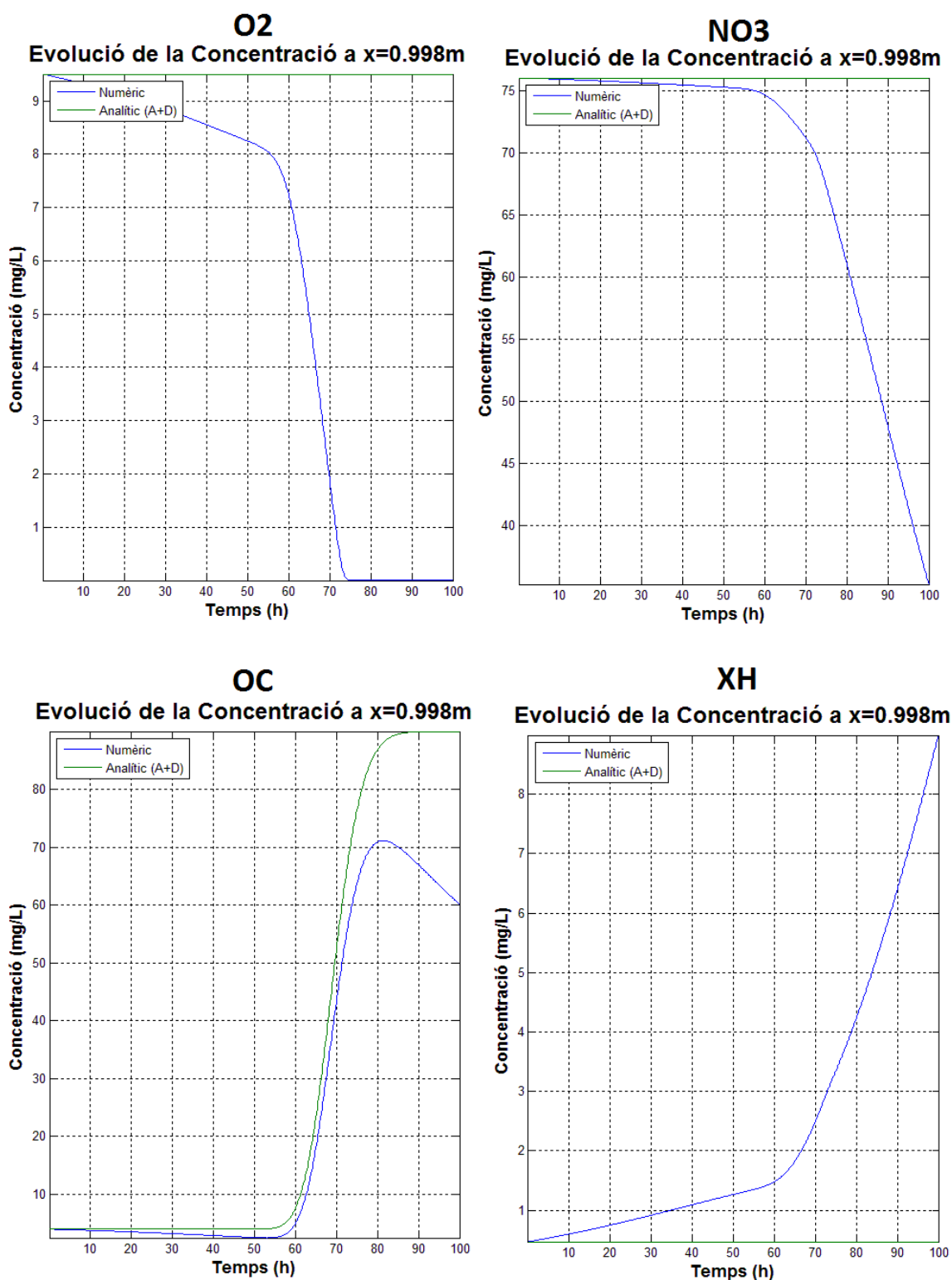


Figura D.8. Evolucions de les concentracions a x=1m i T=8°C, simulació T1



### D.2.2. Simulació Kb1 amb $T = 18^\circ\text{C}$

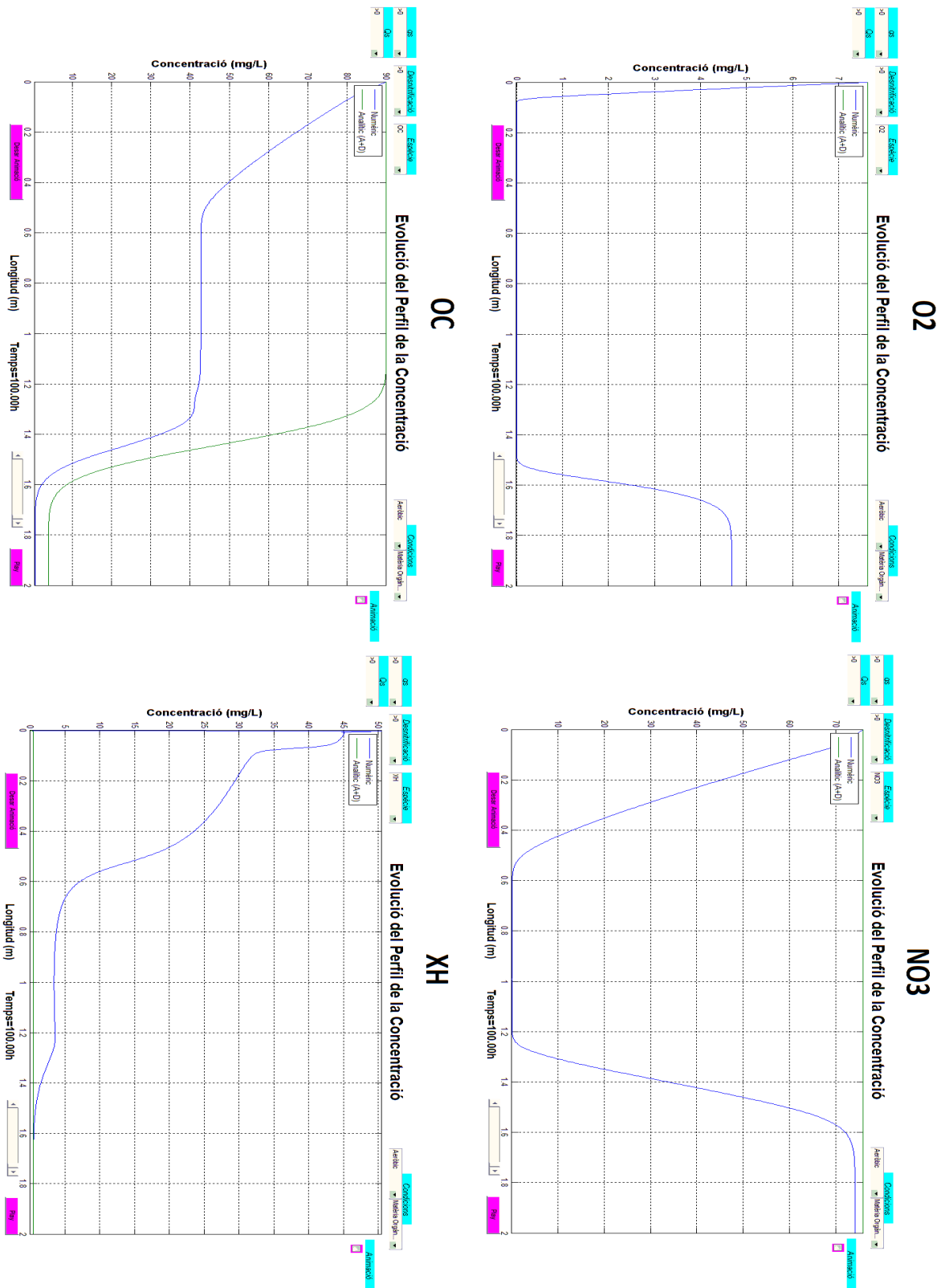


Figura D.1. Evolucions dels perfils de les concentracions amb  $T=18^\circ\text{C}$ , simulació Kb1





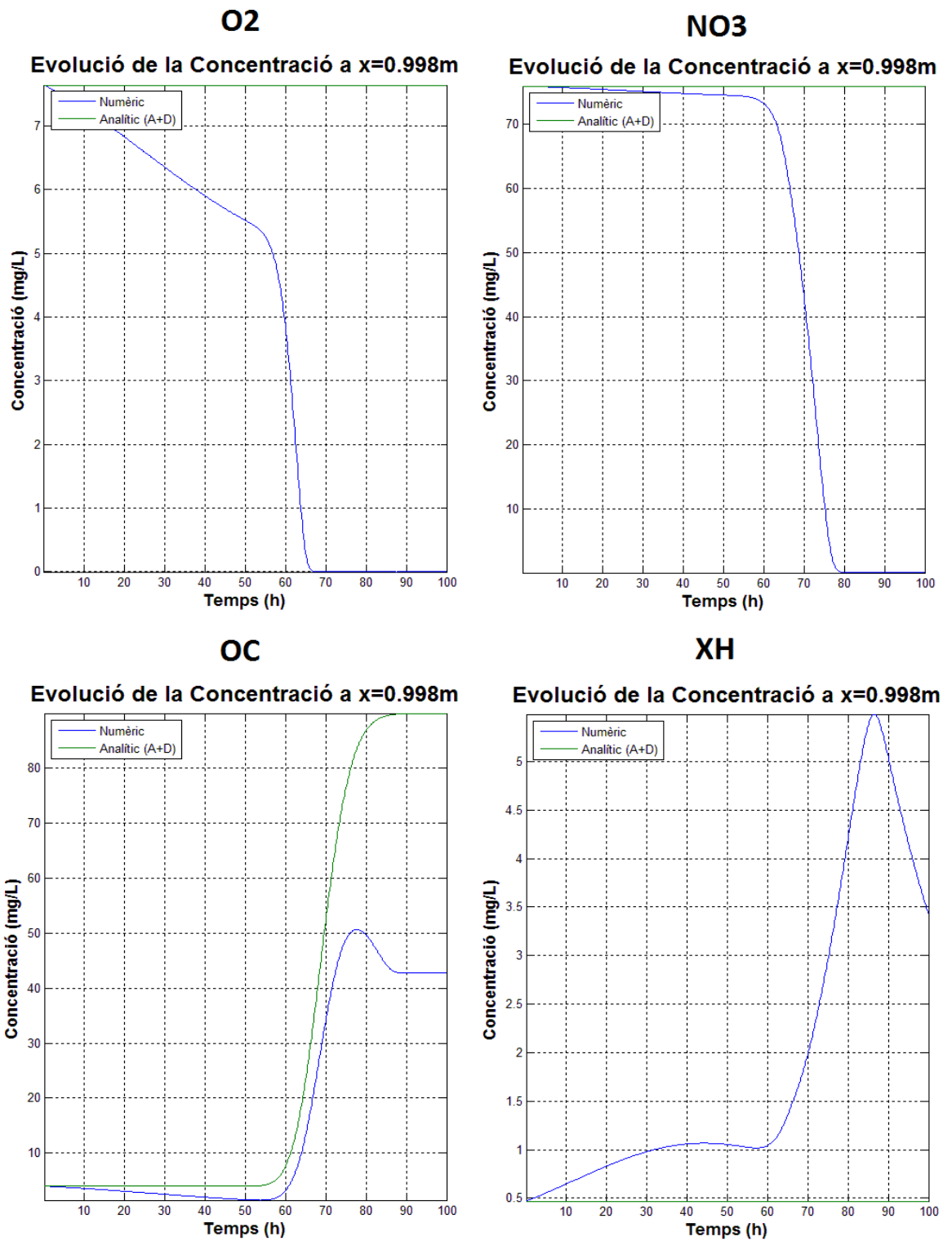


Figura D.2. Evolucions de les concentracions a  $x=1\text{m}$  i  $T=18^\circ\text{C}$ , simulació Kb1



### D.2.3. Simulació T2 amb $T = 23^{\circ}\text{C}$

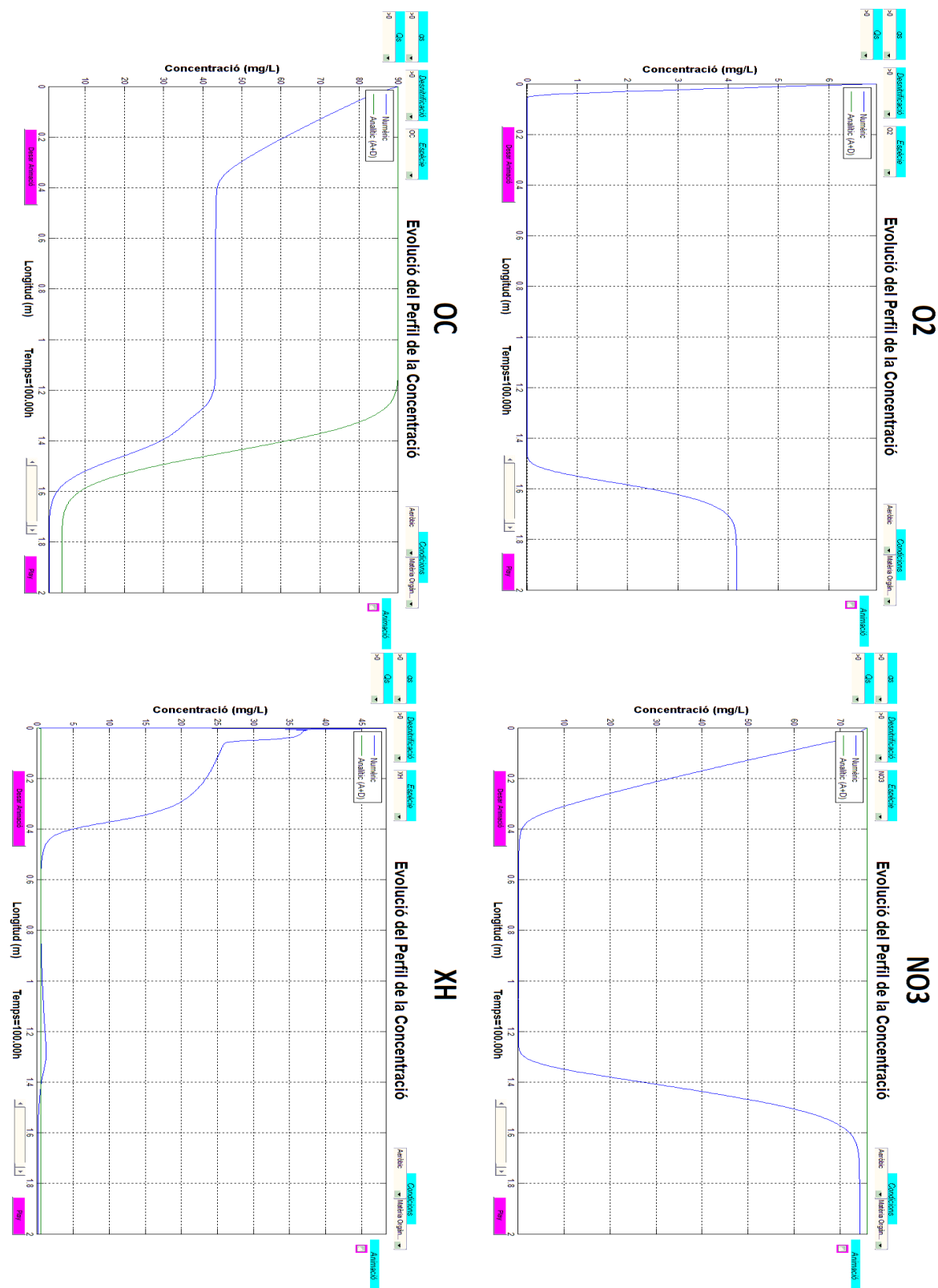


Figura D.9. Evolucions dels perfils de les concentracions a  $T=23^{\circ}\text{C}$ , simulació T2



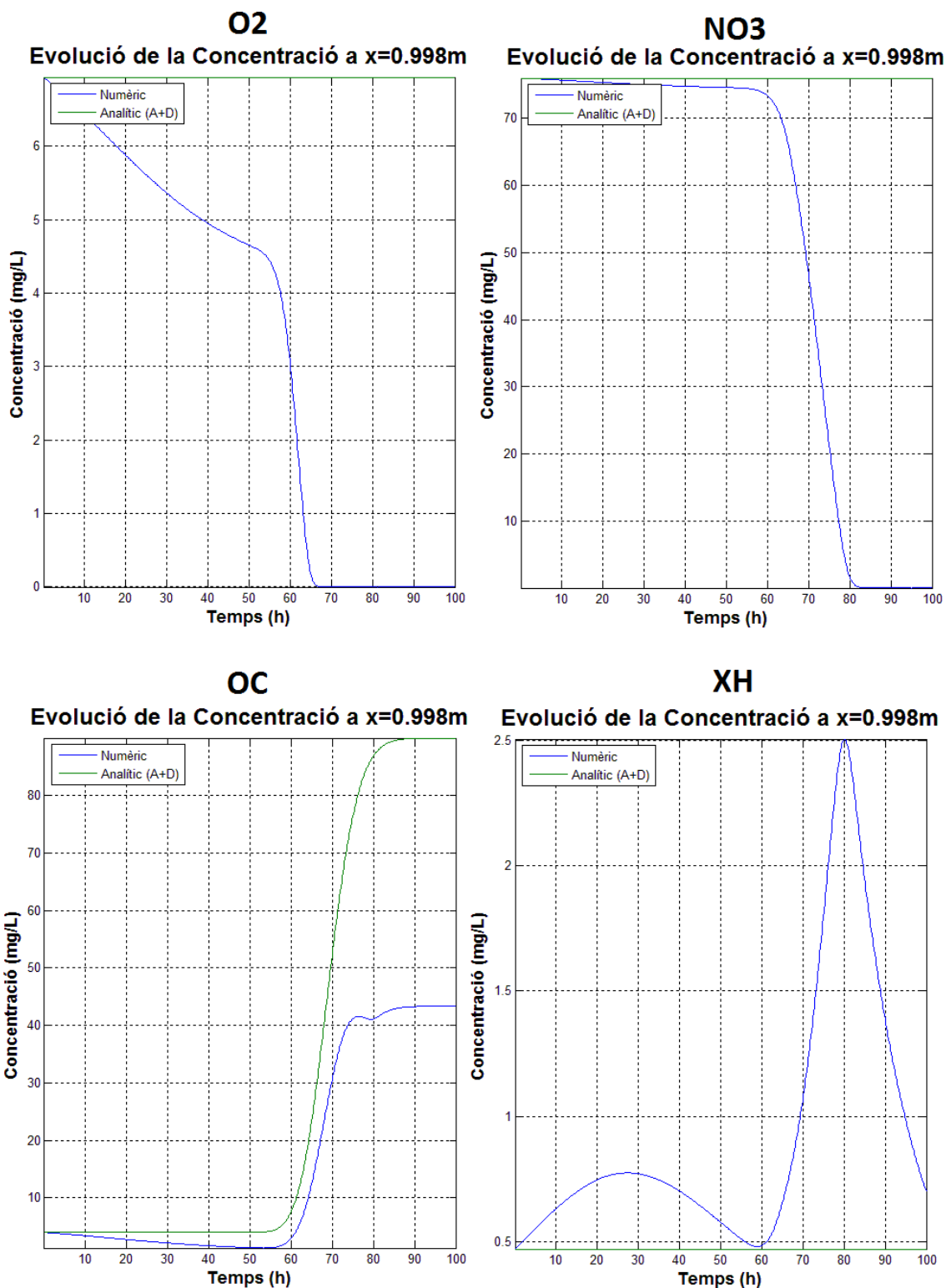


Figura D.10. Evolucions de les concentracions a x=1m i T=23°C, simulació T2



D.2.4. Simulació T3 amb  $T = 27^{\circ}\text{C}$

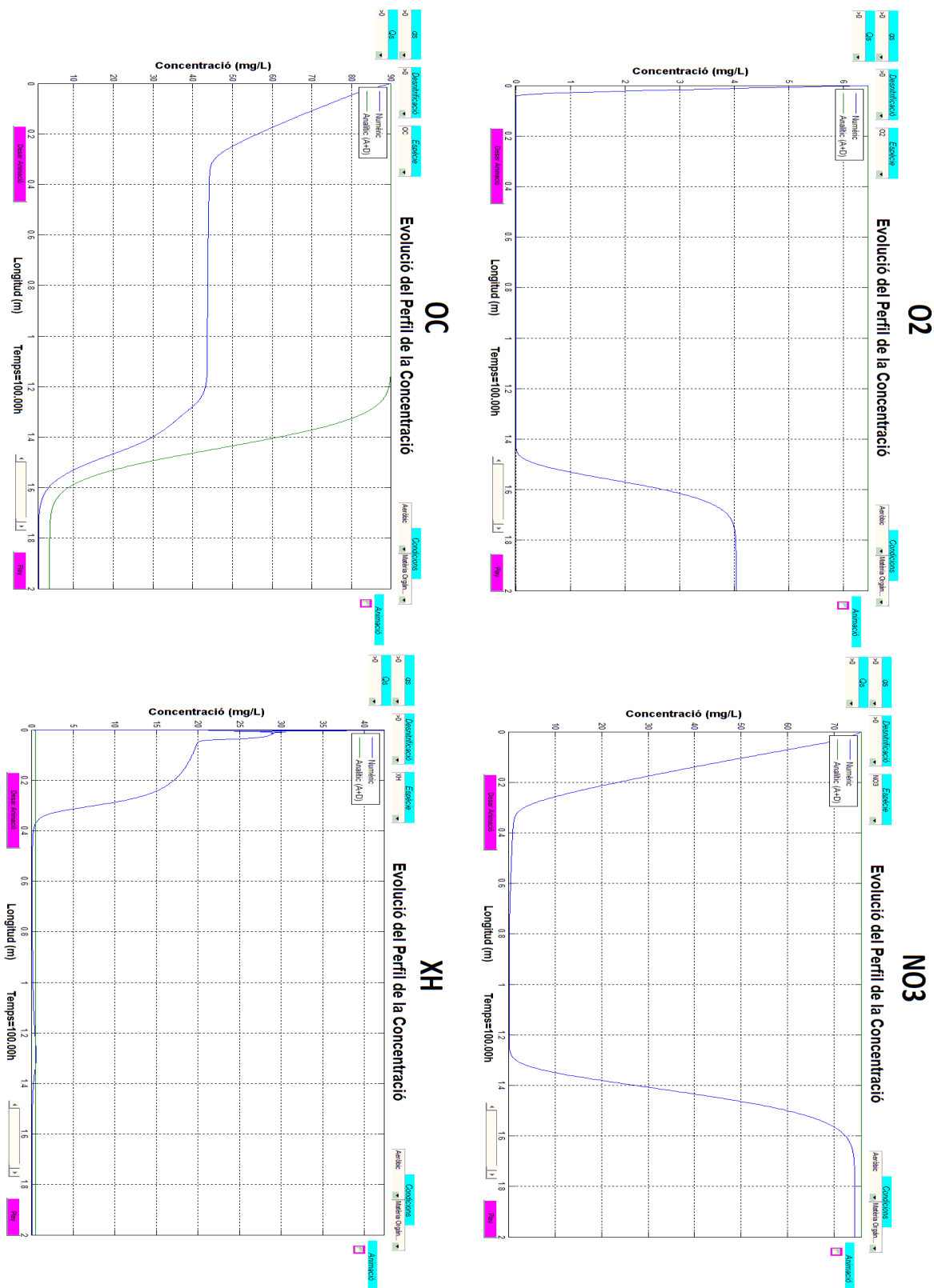


Figura D.11. Evolucions dels perfils de les concentracions a  $T=27^{\circ}\text{C}$ , simulació T3



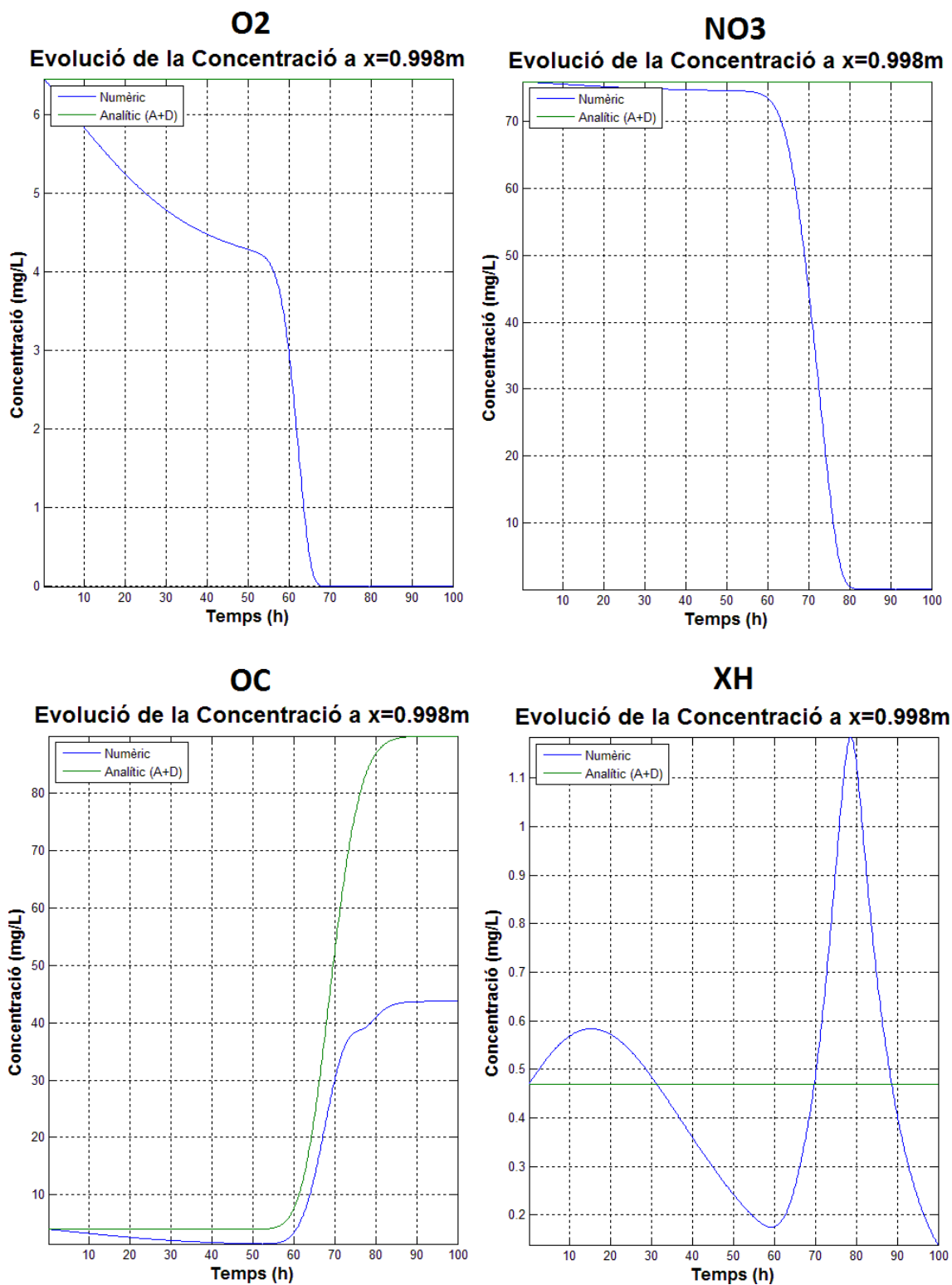


Figura D.12. Evolucions de les concentracions a x=1m i T=27°C, simulació T3





## E. Simulacions de l'Aqüífer d'Argentona

### E.1. Simulació R

Taula amb els paràmetres de referència per les simulacions justificats en el capítol 5 de la memòria:

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.1. Variables d'entrada de la simulació R



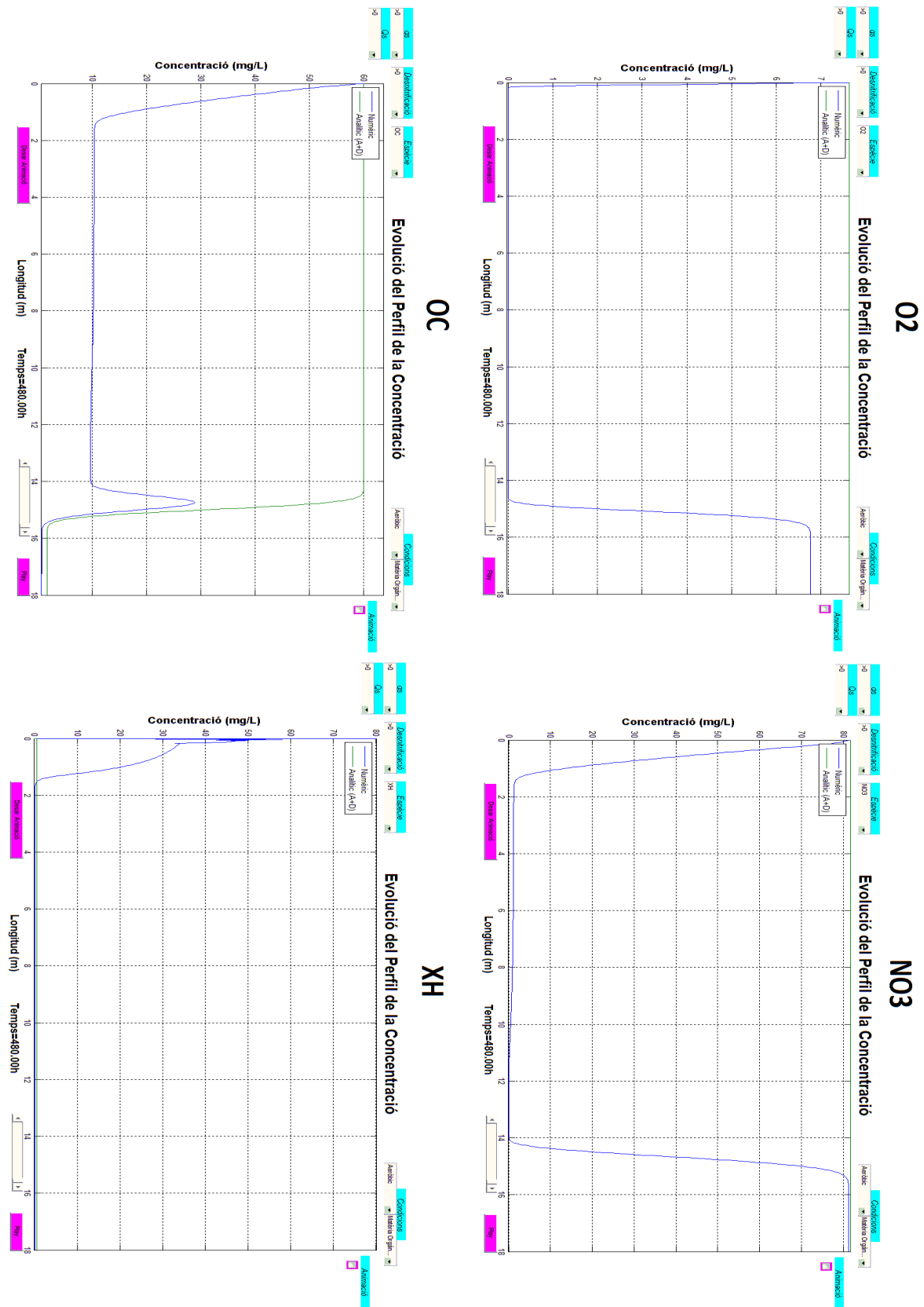


Figura E.1. Evolucions dels perfils de les concentracions, simulació R





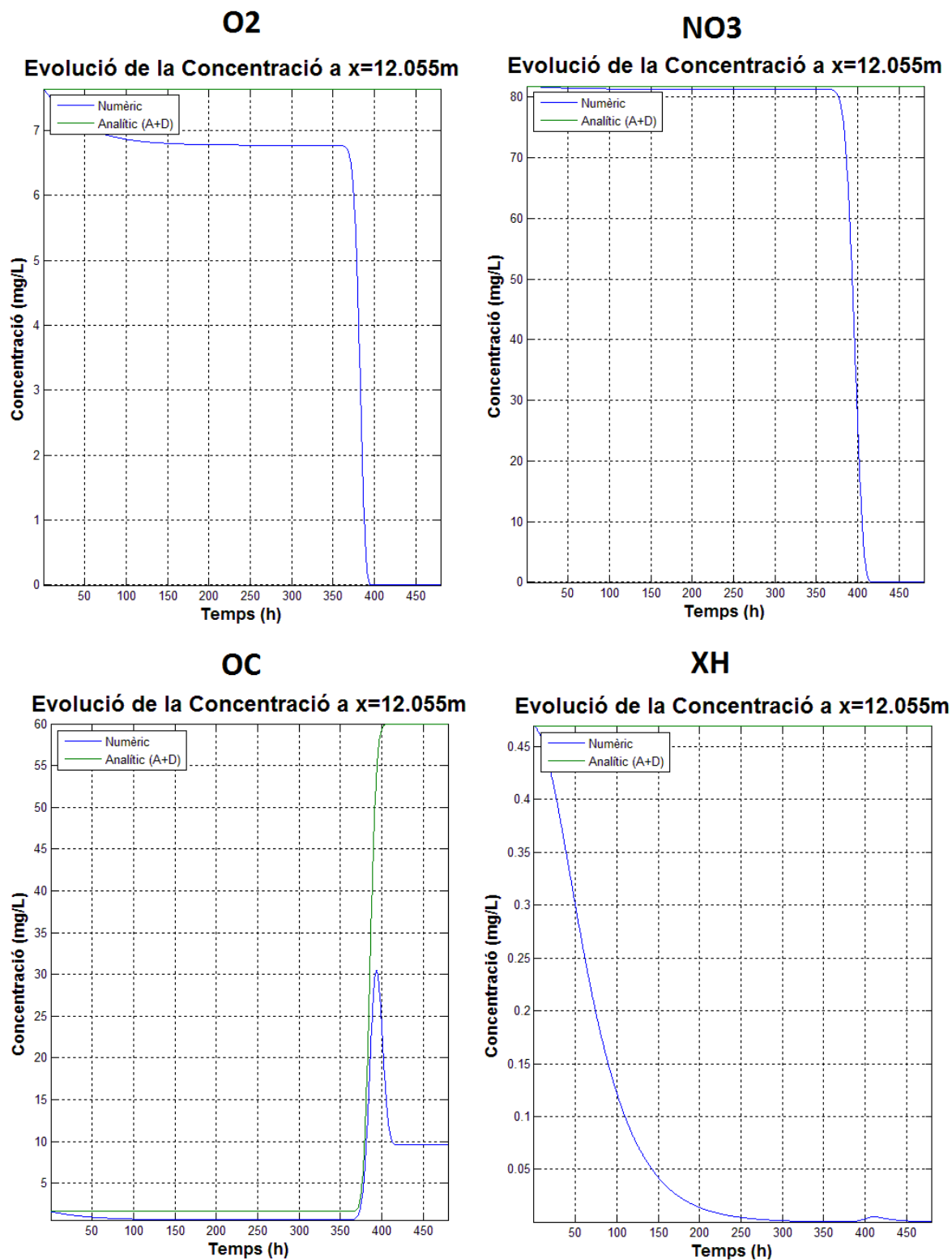


Figura E.2. Evolucions de les concentracions a x=12m, simulació R



## E.2. Simulació A

Taula amb els paràmetres de la simulació A on es considera l'aqüífer de referència anòxic. S'utilitza la pestanya *Anòxic* de Denitor en les dues primeres grafiques després de calcular els paràmetres de referència mitjançant *Calcula 2*. En blau són els paràmetres canviats respecte els de referència.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	0	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	0	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coeficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coeficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.2. Variables d'entrada de la simulació A



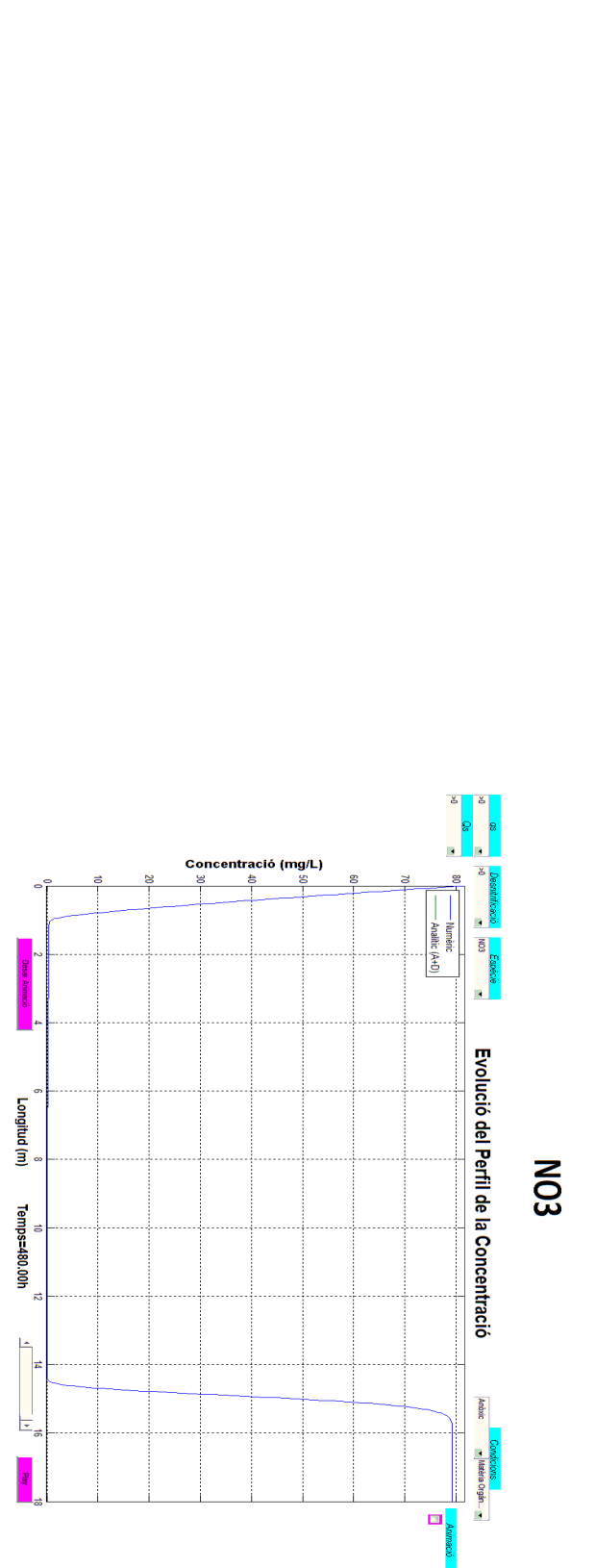
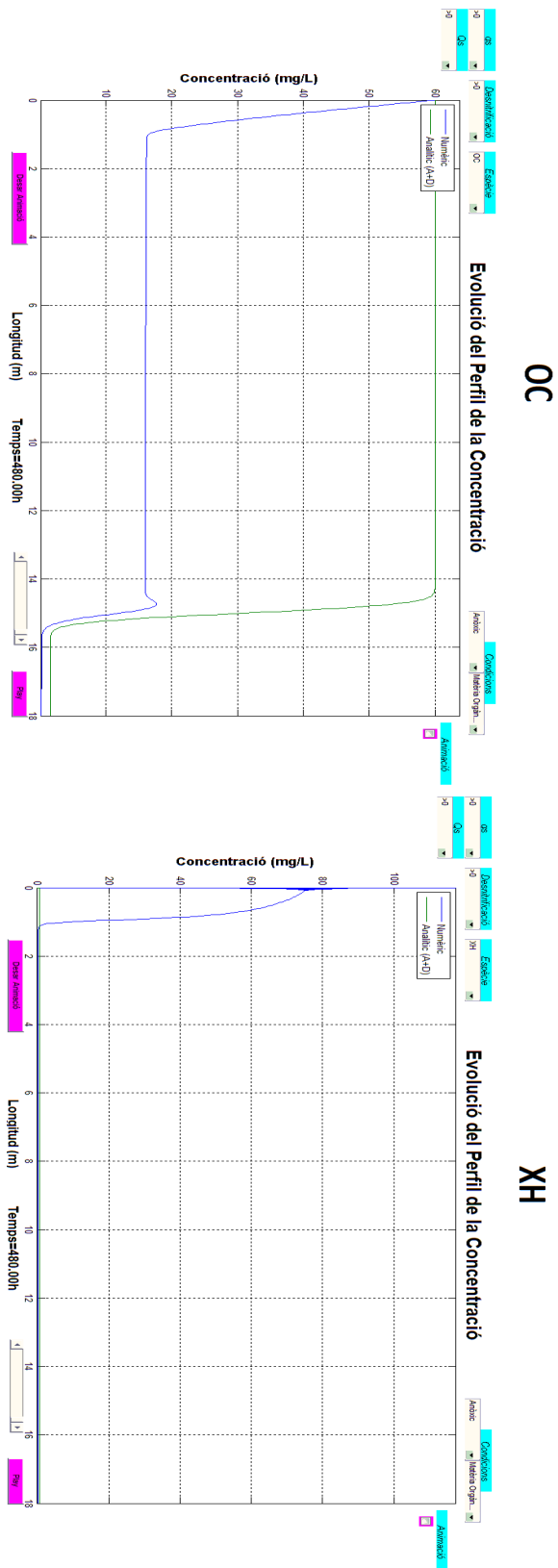
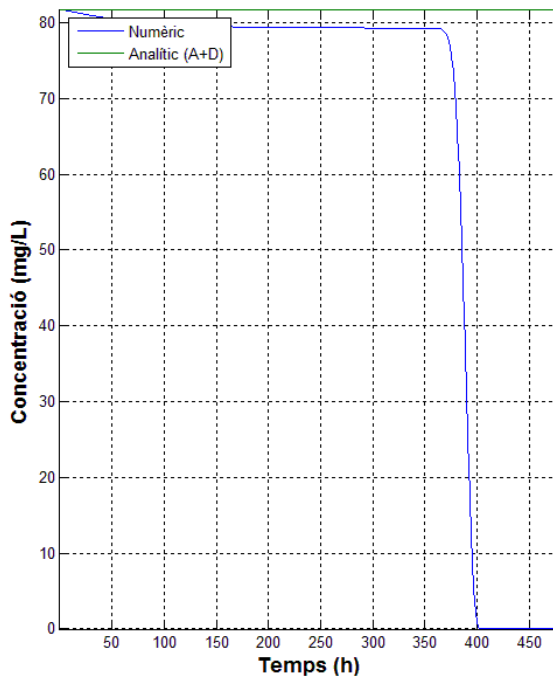


Figura E.3 Evolucions dels perfils de les concentracions anòxicament, simulació A



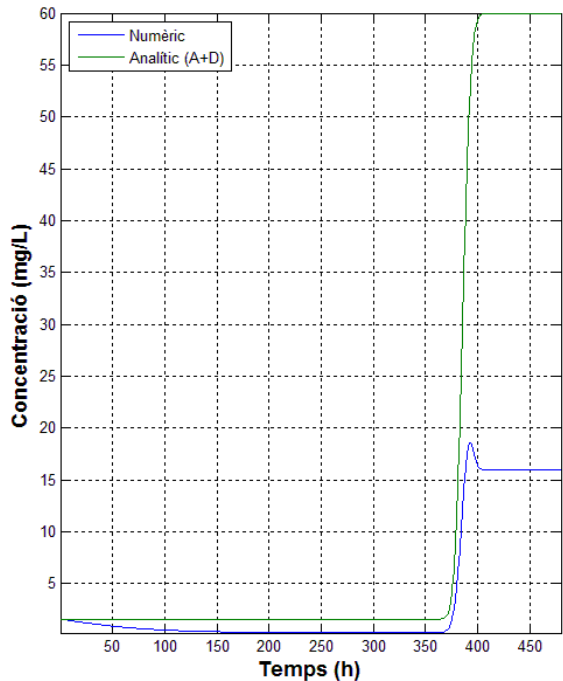
### NO3

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### OC

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### XH

Evolució de la Concentració a x=12.055m

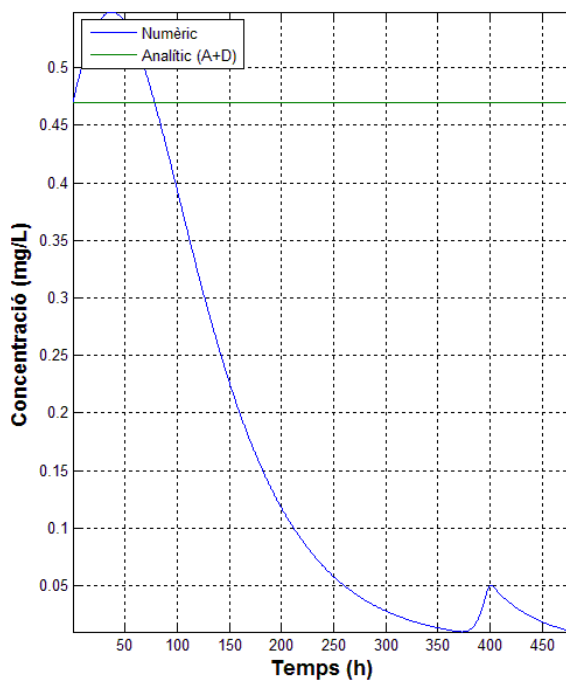


Figura E.4. Evolucions de les concentracions a x=12m anòxicament, simulació A



### E.3. Simulació 8T

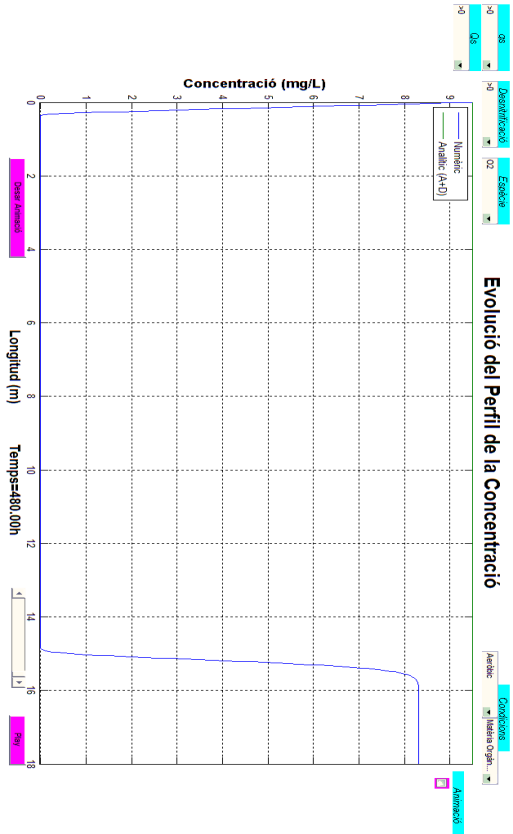
Taula amb els paràmetres de la simulació 8T on es considera l'aqüífer a  $T=8^{\circ}\text{C}$ . Com a conseqüència de la baixa temperatura, l'oxigen al 80% de saturació augmenta en concentració. En taronja són els paràmetres canviats respecte els de referència.

<b>Símbol</b>	<b>Variable</b>	<b>Valor</b>	<b>Unitats</b>
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a $t=0$	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a $t=0$	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a $t=0$	9.506	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a $t=0$	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a $x=0$	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a $x=0$	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a $x=0$	9.506	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a $x=0$	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	$\text{m}^2/\text{s}$
$v_0$	Velocitat Mitjana a $x=0$	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	8	$^{\circ}\text{C}$
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.3. Variables d'entrada de la simulació 8T

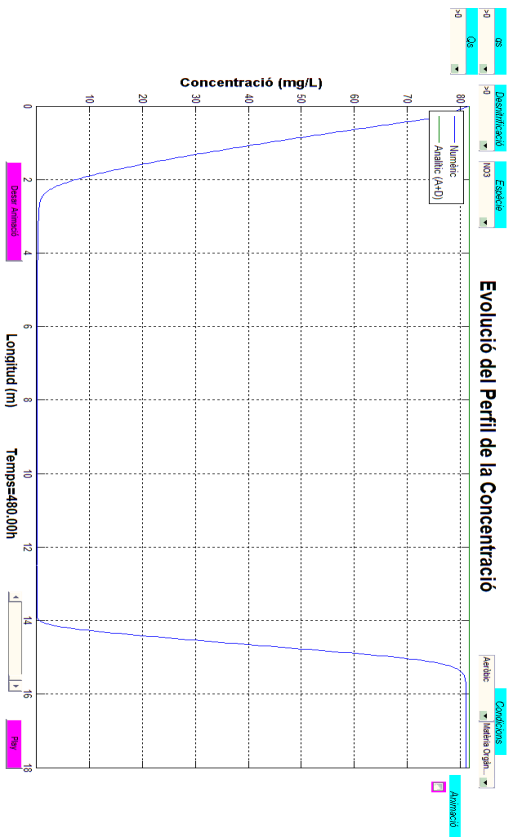


02



OC

NO3



XH

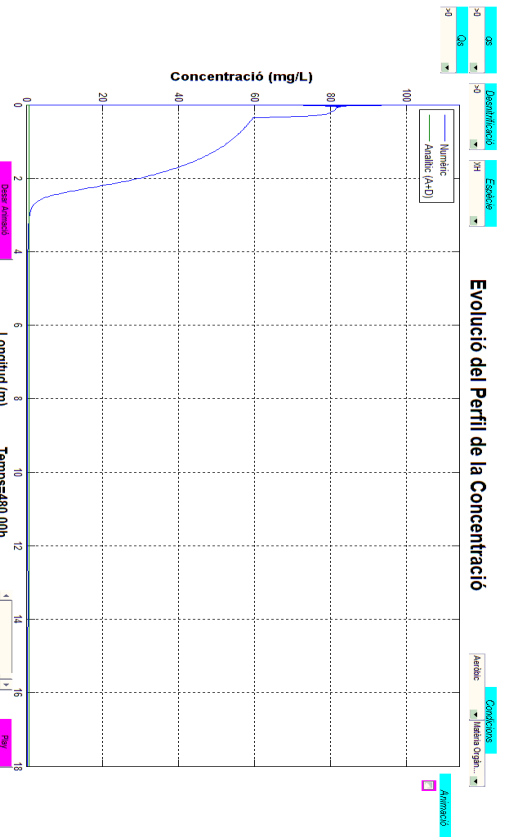
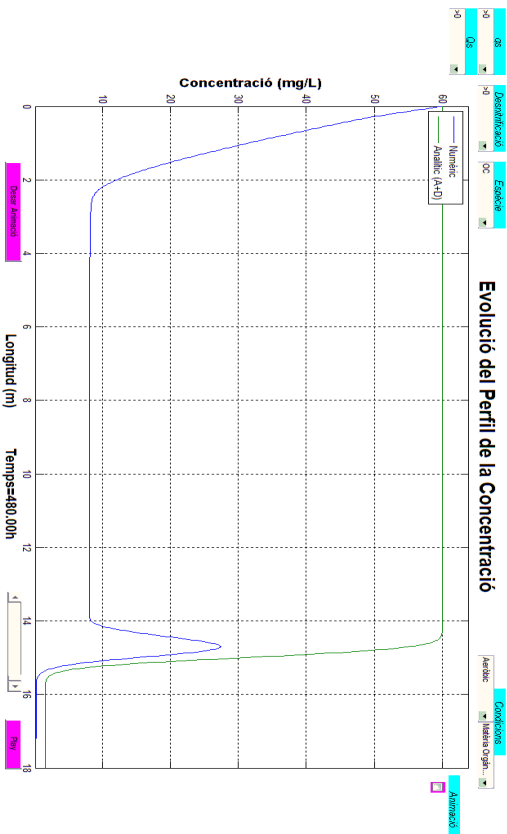
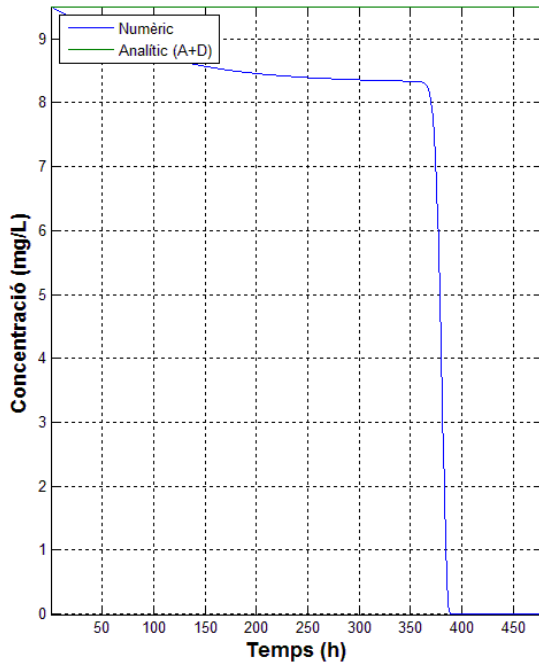


Figura E.5. Evolucions dels perfils de les concentracions a T=8°C, simulació 8T



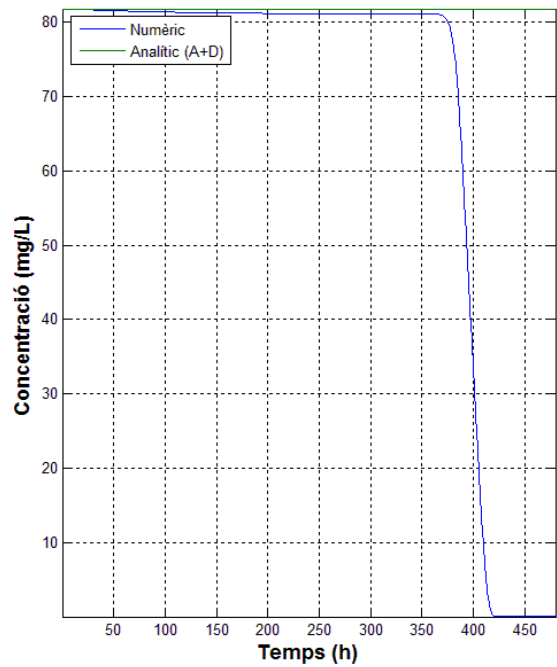
### O<sub>2</sub>

Evolució de la Concentració a x=12.055m



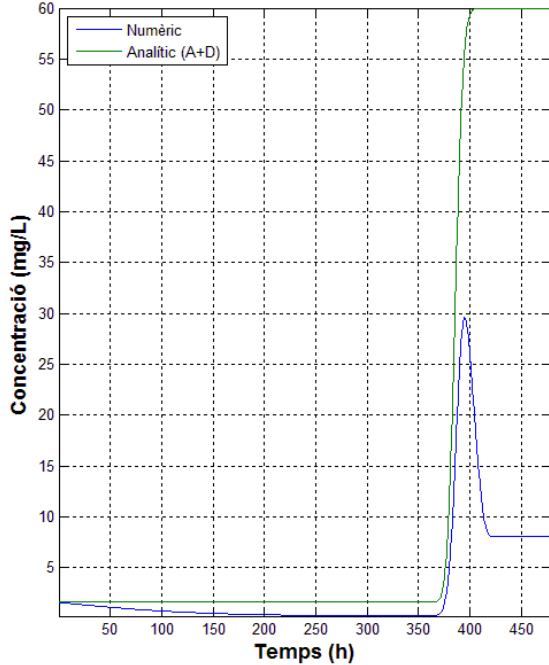
### NO<sub>3</sub>

Evolució de la Concentració a x=12.055m



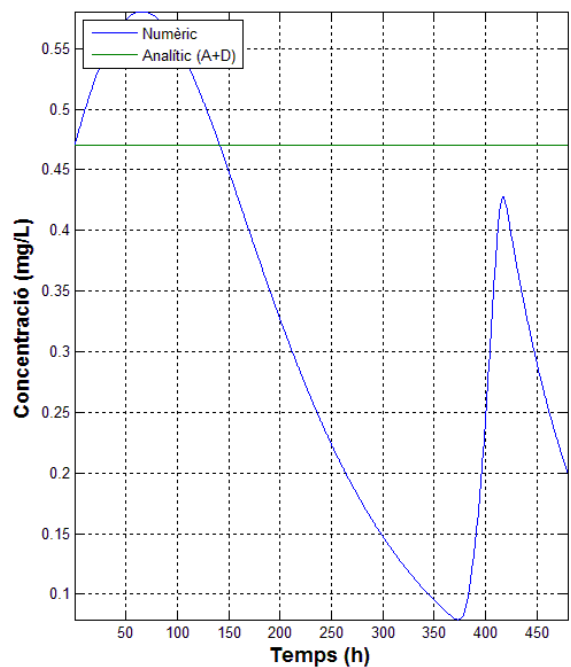
### O<sub>C</sub>

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### XH

Evolució de la Concentració a x=12.055m



E.6. Evolucions de les concentracions a x=12m i T=8°C, simulació 8T



## E.4. Simulació 27T

Taula amb els paràmetres de la simulació 27T on es considera l'aquífer a  $T=27^{\circ}\text{C}$ . Com a conseqüència de l'alta temperatura, l'oxigen al 80% de saturació disminueix en concentració. En taronja són els paràmetres canviats respecte els de referència.

<b>Símbol</b>	<b>Variable</b>	<b>Valor</b>	<b>Unitats</b>
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a $t=0$	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a $t=0$	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a $t=0$	6.4583	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a $t=0$	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a $x=0$	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a $x=0$	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a $x=0$	6.4583	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a $x=0$	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	$\text{m}^2/\text{s}$
$v_0$	Velocitat Mitjana a $x=0$	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	27	$^{\circ}\text{C}$
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.4. Variables d'entrada de la simulació 27T





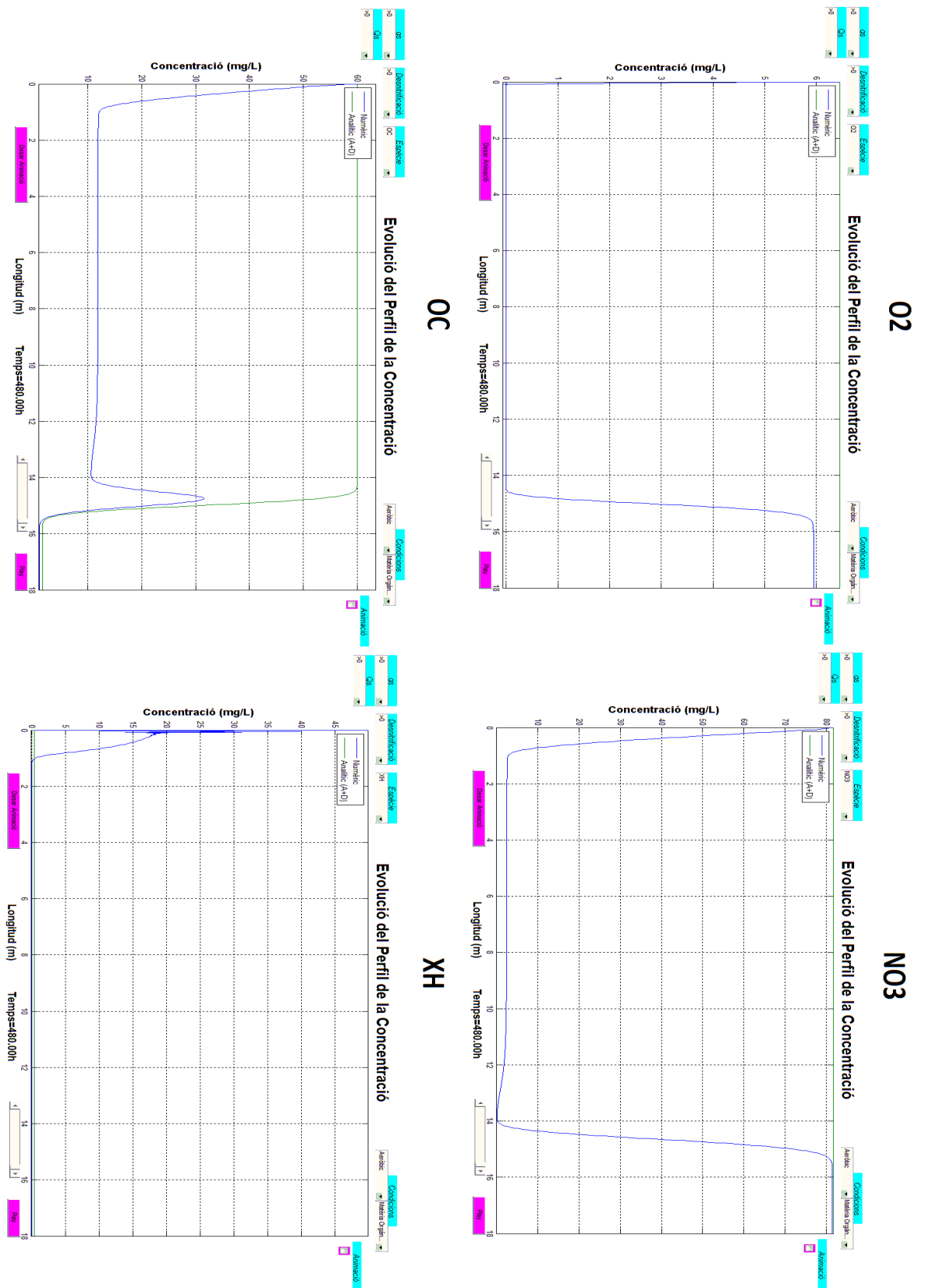
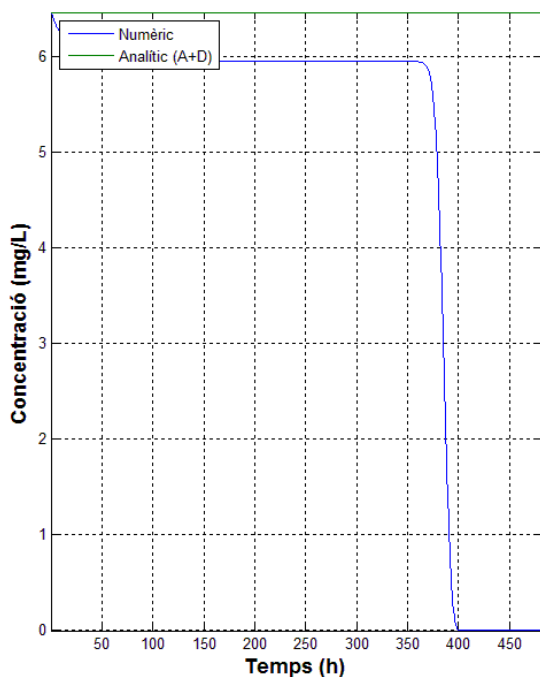


Figura E.7. Evolucions dels perfils de les concentracions a T=27°C, simulació 27T



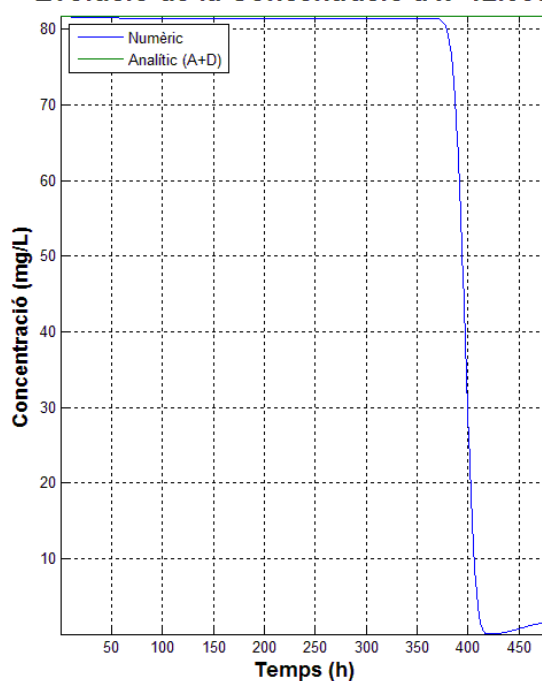
### O2

Evolució de la Concentració a x=12.055m



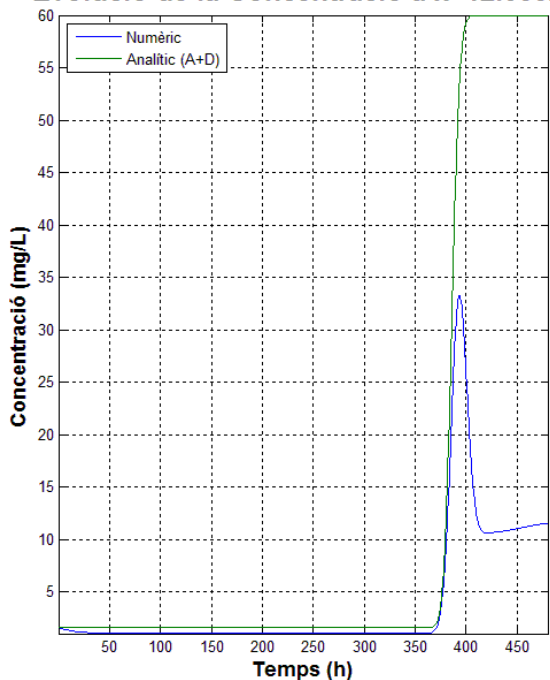
### NO3

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### OC

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### XH

Evolució de la Concentració a x=12.055m

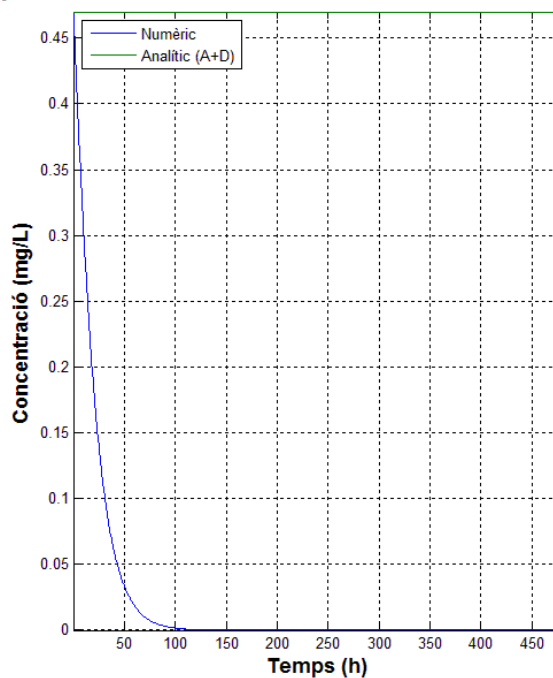


Figura E.8. Evolucions de les concentracions a x=12m i T=27°C, simulació 27T



## E.5. Simulació 40OC

Taula amb els paràmetres de la simulació 40OC on es considera una injecció de matèria orgànica a l'aqüífer de 40mg/L. En verd són els paràmetres canviats respecte els de referència.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	40	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.5. Variables d'entrada de la simulació 40OC



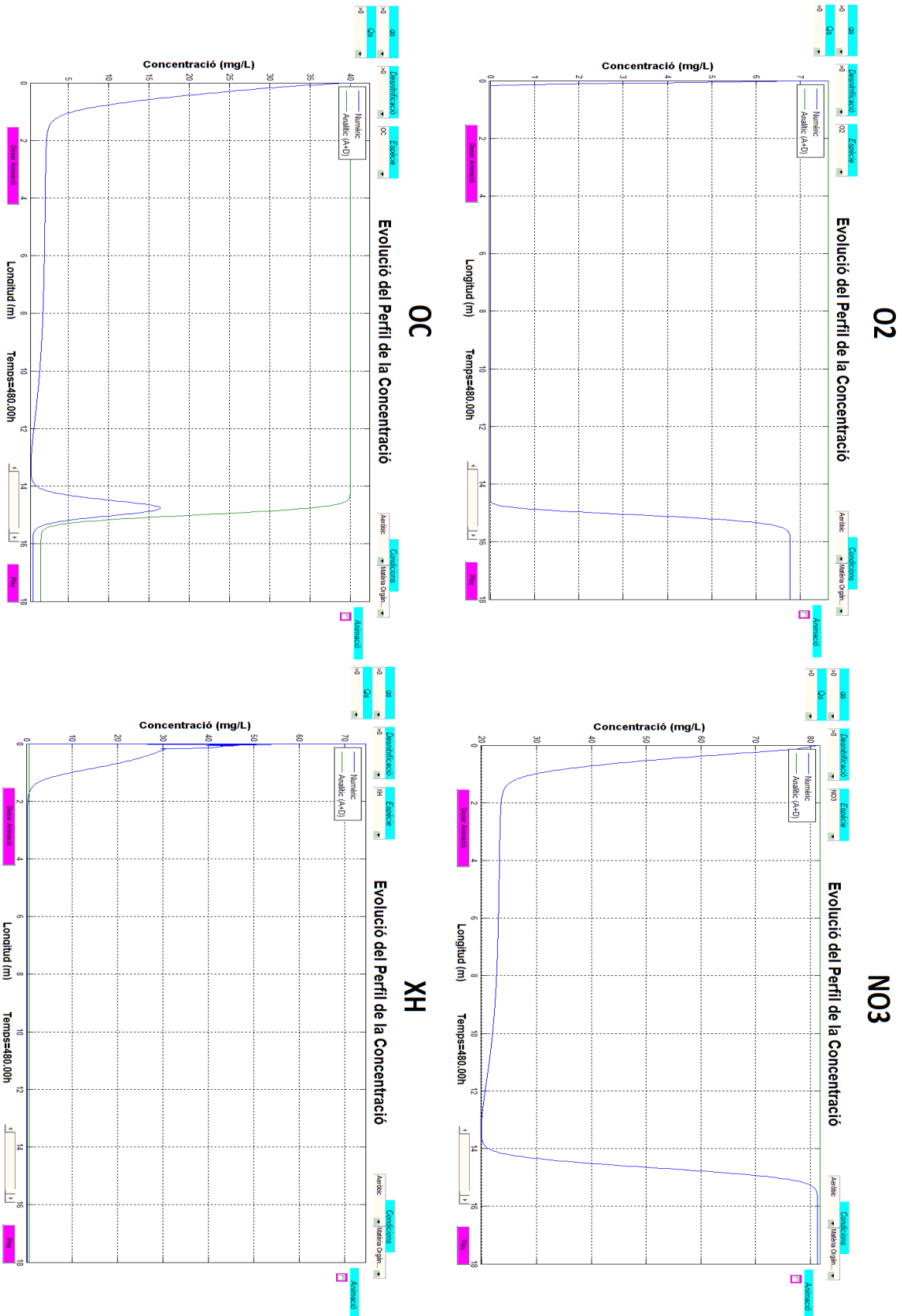


Figura E.9. Evolucions dels perfils de les concentracions OC = 40mg/L, simulació 40OC



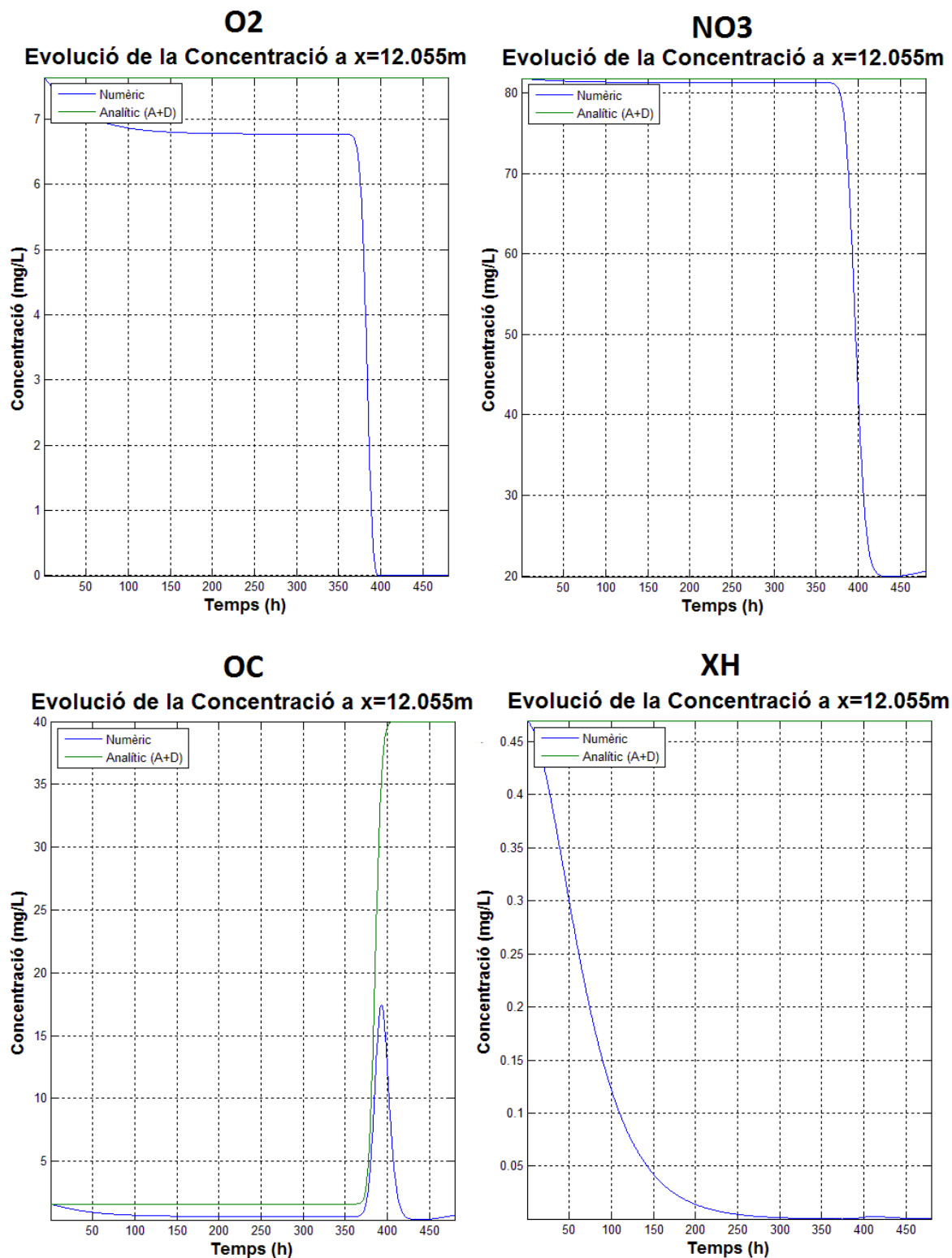


Figura E.10. Evolucions de les concentracions a x=12m i OC=40mg/L, simulació 40OC



## E.6. Simulació 80OC

Taula amb els paràmetres de la simulació 80OC on es considera una injecció de matèria orgànica a l'aqüífer de 80mg/L. En verd són els paràmetres canviats respecte els de referència.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	80	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	0	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.6. Variables d'entrada de la simulació 80OC



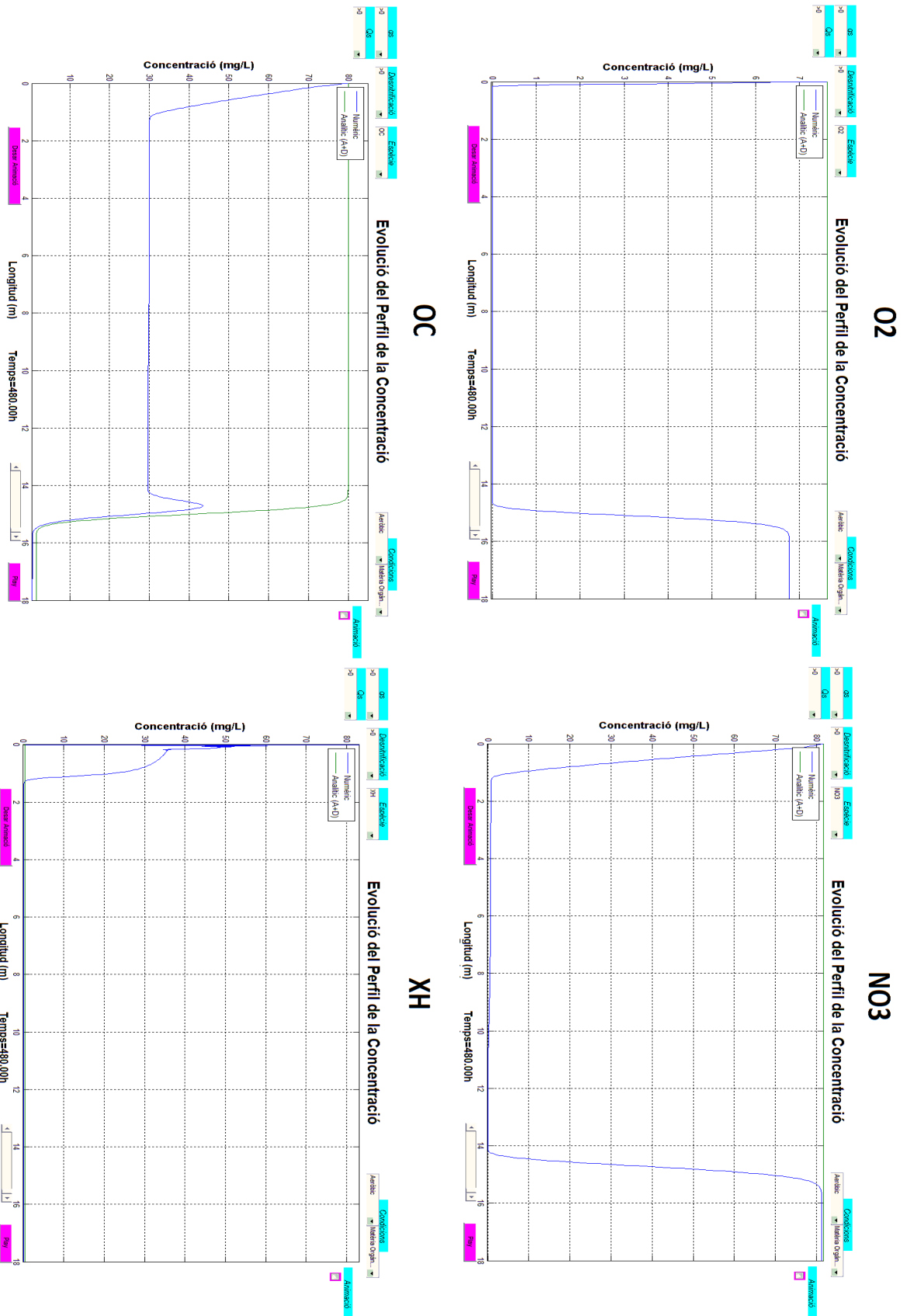
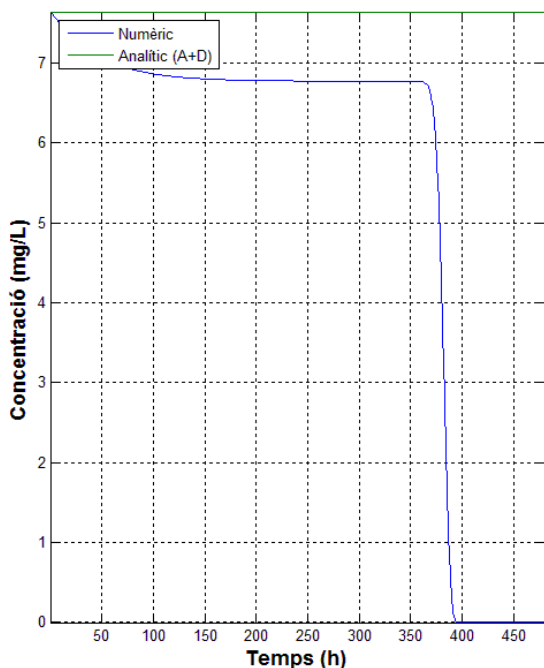


Figura E.11. Evolucions dels perfils de les concentracions OC = 80mg/L, simulació 80OC



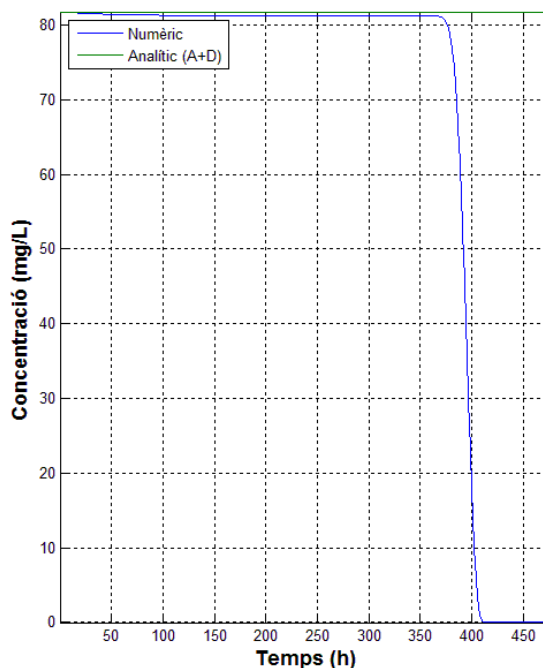
### O2

Evolució de la Concentració a x=12.055m



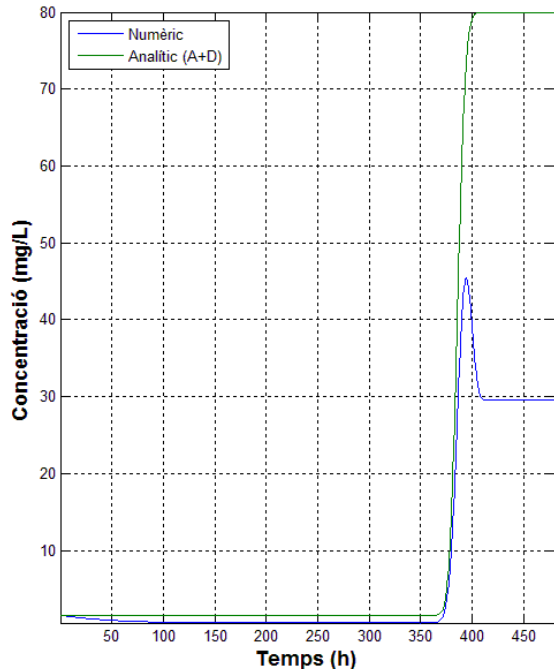
### NO3

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### OC

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### XH

Evolució de la Concentració a x=12.055m

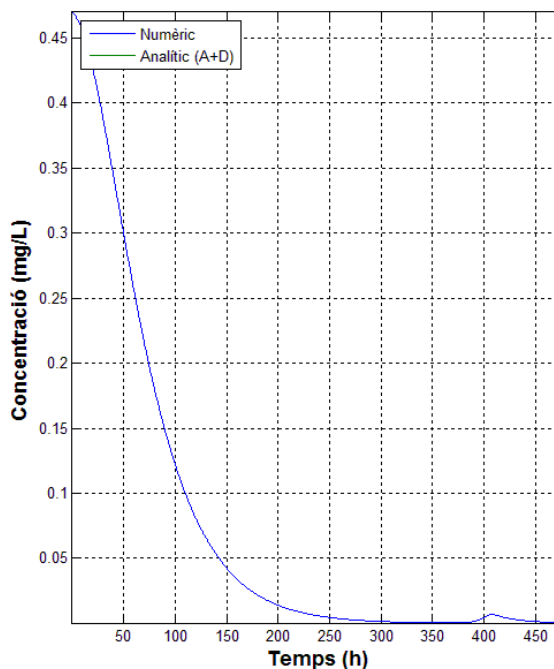


Figura E.12. Evolucions de les concentracions a x=12m i OC=80mg/L, simulació 80OC





## E.7. Simulació P1

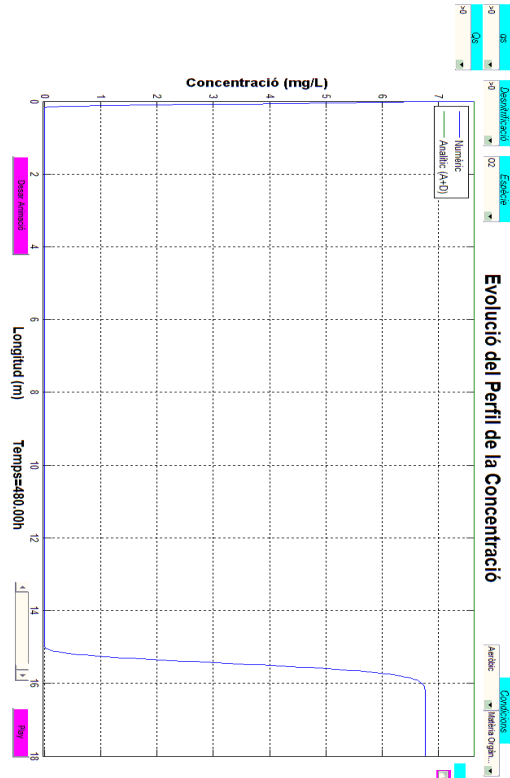
Taula amb els paràmetres de la simulació P1 on es considera que hi ha pluja ( $W \neq 0$ ) i es menysprea el segon terme advection  $C \cdot \delta v_x / \delta x$  de l'Eq. 3.3. En groc són els paràmetres canviats respecte els de referència.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	$6.7639 \cdot 10^{-7}$	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

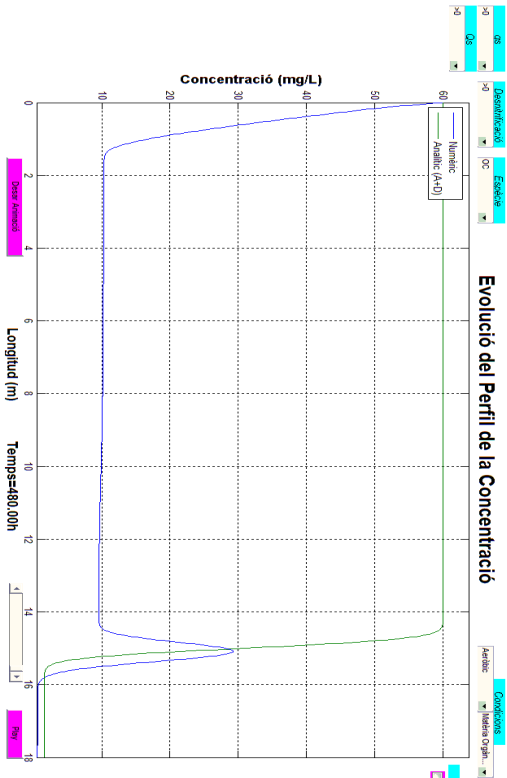
Taula E.6. Variables d'entrada de la simulació P1



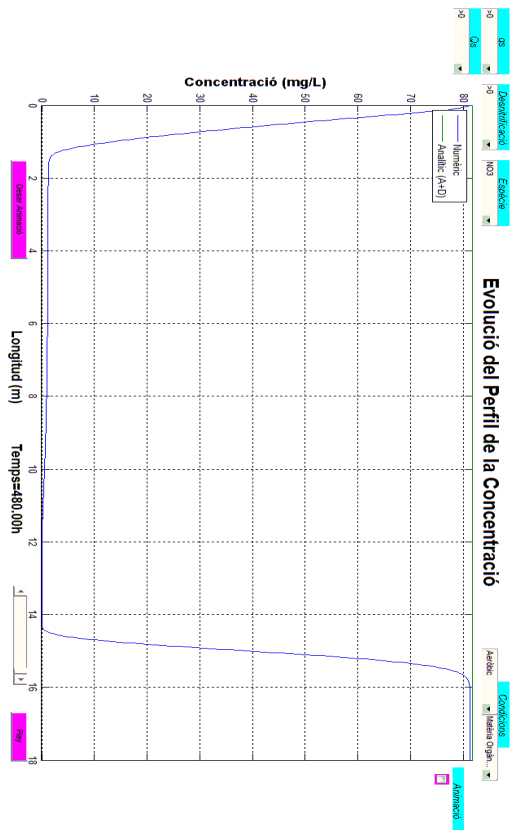
## 02



## OC



## NO3



## XH

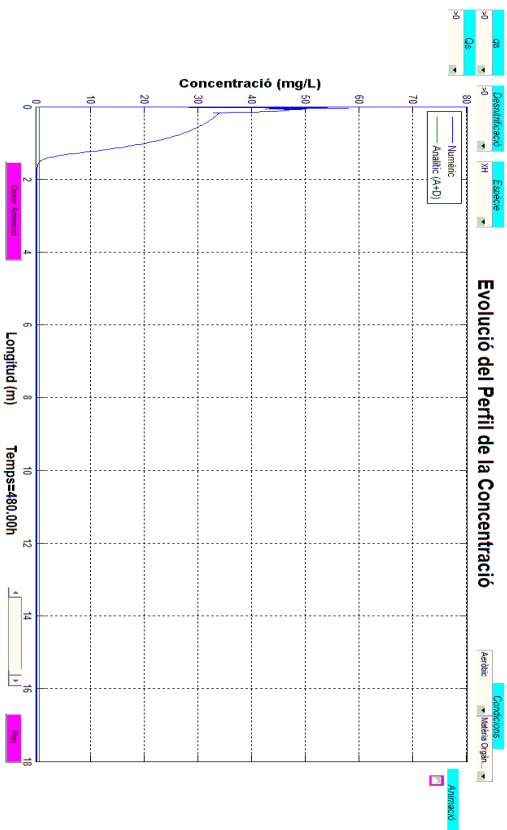


Figura E.13. Evolucions dels perfils de les concentracions amb pluja, simulació P1



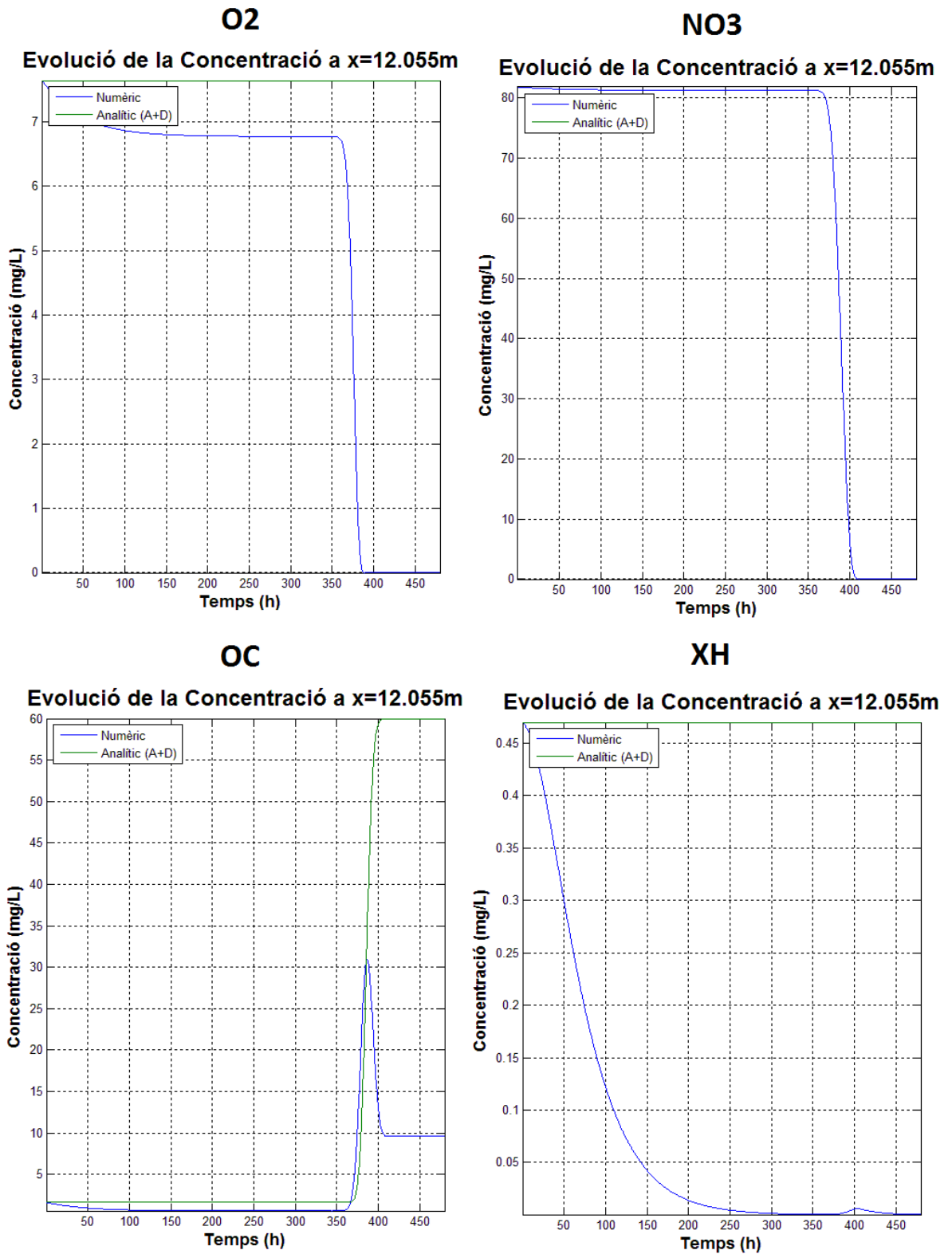


Figura E.14. Evolucions de les concentracions a  $x=12\text{m}$  i amb pluja, simulació P1



## E.8. Simulació P2

Taula amb els paràmetres de la simulació P2 on es considera que hi ha pluja ( $W \neq 0$ ) i es considera el segon terme advection  $C \cdot \delta v_x / \delta x$  de l'Eq. 3.4. En groc són els paràmetres canviats respecte els de referència.

Símbol	Variable	Valor	Unitats
$NO3_{t0}$	Concentració Nitrats a t=0	81.8	mg/L
$OC_{t0}$	Concentració Matèria Orgànica a t=0	1.6	mg/L
$O2_{t0}$	Concentració Oxigen a t=0	7.6424	mg/L
$XH_{t0}$	Concentració Microorganismes a t=0	0.47	mg/L
$NO3_0$	Concentració Nitrats a x=0	81.8	mg/L
$OC_0$	Concentració Matèria Orgànica a x=0	60	mg/L
$O2_0$	Concentració Oxigen a x=0	7.6424	mg/L
$XH_0$	Concentració Microorganismes a x=0	0	mg/L
$D_x$	Coefficient de Dispersió	$1.3333 \cdot 10^{-8}$	m <sup>2</sup> /s
$v_0$	Velocitat Mitjana a x=0	$4 \cdot 10^{-6}$	m/s
$K_x$	Conductivitat Hidràulica	$1.7361 \cdot 10^{-4}$	m/s
$n$	Porositat del sòl	0.25	-
$W$	Pluviositat	$6.7639 \cdot 10^{-7}$	m/s
$T$	Temperatura	18	°C
$K_b$	Coefficient d'Inhibició de Biomassa	12	mg/L
$L$	Longitud	18	m
$T$	Temps d'Integració	480	h

Taula E.6. Variables d'entrada de la simulació P2



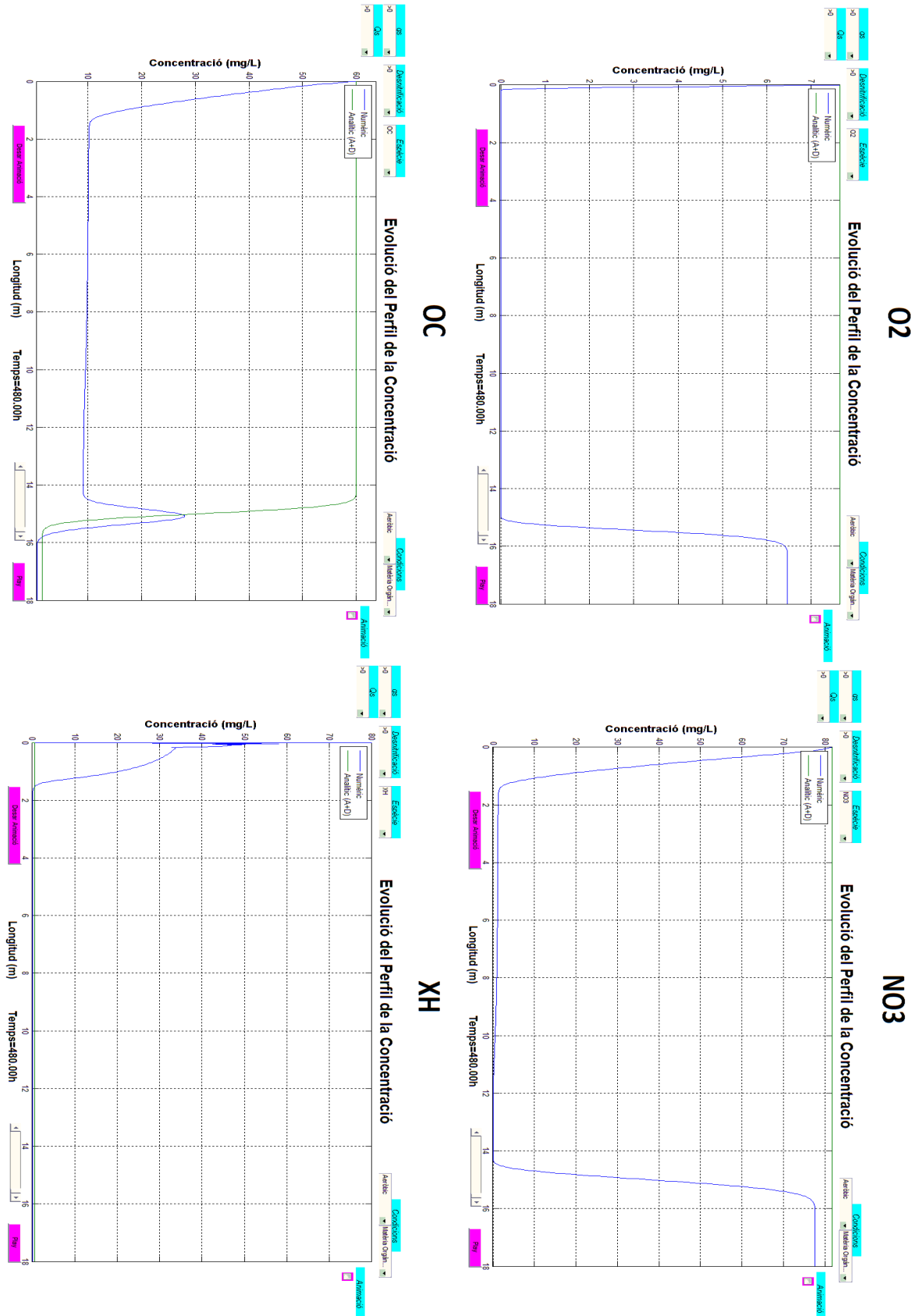
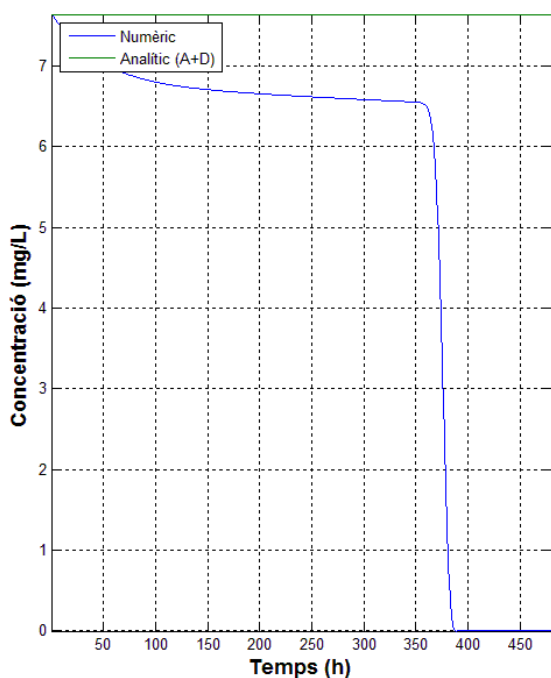


Figura E.15. Evolucions dels perfils de les concentracions amb pluja, simulació P2



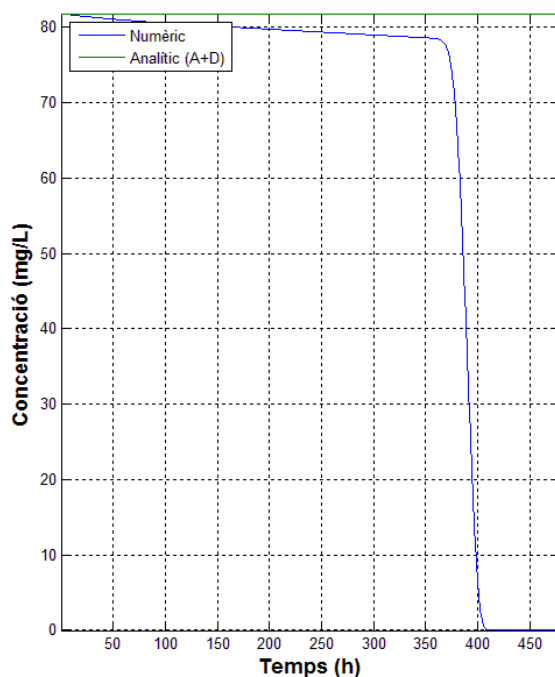
### O2

Evolució de la Concentració a x=12.055m



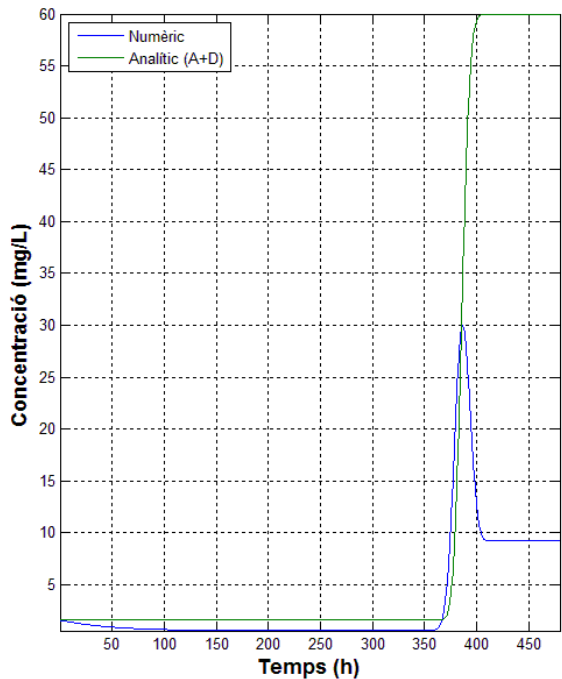
### NO3

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### OC

Evolució de la Concentració a x=12.055m



### XH

Evolució de la Concentració a x=12.055m

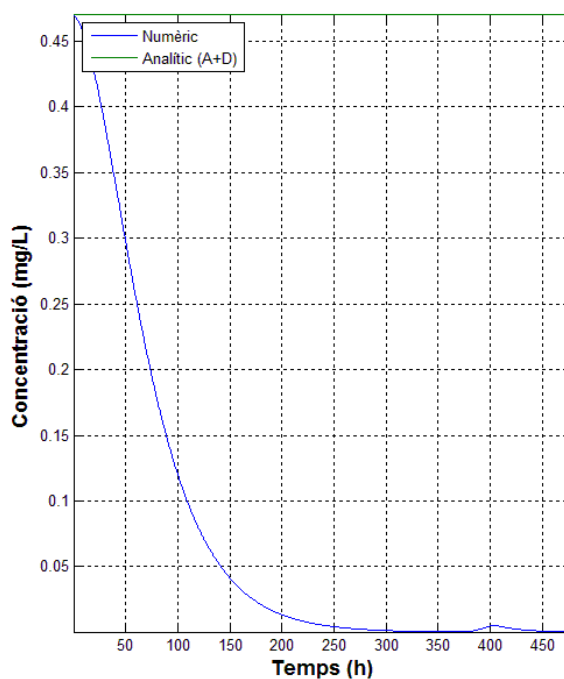


Figura E.16. Evolucions de les concentracions a x=12m i amb pluja, simulació P2



### E.9. Perfils de la velocitat mitjana i el nivell

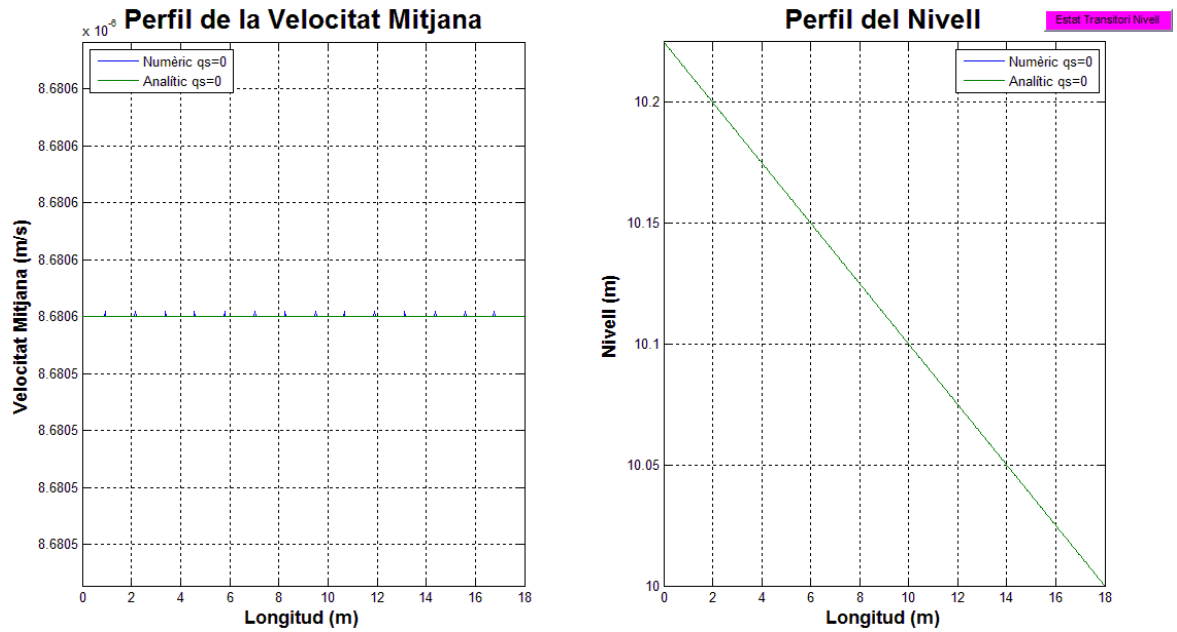


Figura E.17. Perfil de la velocitat mitjana i el nivell per les simulacions R, A, 8T, 27T, OC40 i 80OC

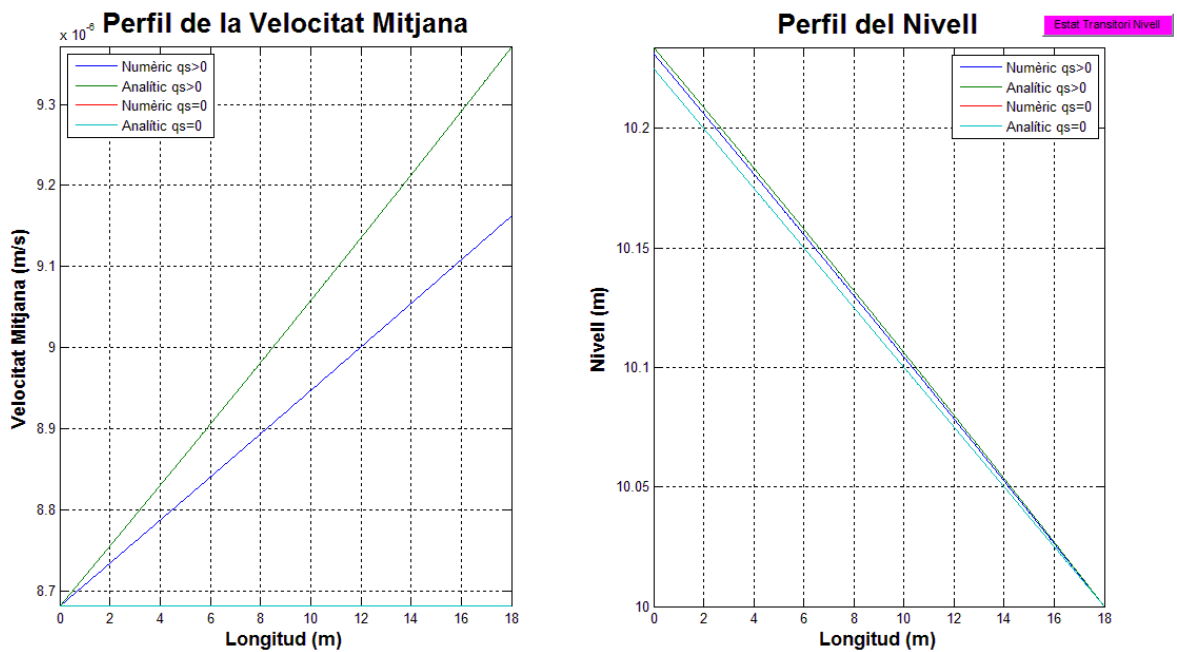


Figura E.18. Perfil de la velocitat mitjana i el nivell per les simulacions P1 i P2

