

Treball de Fi de Grau

Grau en Enginyeria en Tecnologies Industrials

Solucions teòriques a la dispersió de contaminants en medis porosos, amb o sense reacció química

MEMÒRIA

Autor/a: Mateo Kathrein

Director/a: Elisabeth Bou Petit

Convocatòria: Gener 2023



Escola Tècnica Superior
d'Enginyeria Industrial de Barcelona



Resum

L'estudi de la dispersió de contaminants permet saber quina és la concentració d'una substància en una regió en un temps i espai determinat. No obstant, la representació d'un model real (3-D) presenta una elevada complexitat matemàtica. Per resoldre l'equació diferencial és necessari utilitzar diversos mètodes de resolució matemàtics, com per exemple el Mètode de Funcions de Green, arribant a expressions que no es poden resoldre analíticament. D'aquesta forma les solucions són complexes d'obtenir i són només aproximacions que perden en precisió i permeten només obtenir un valor aproximat.

Per aquesta raó, habitualment s'estudia situacions més simplificades, considerant només una dimensió. Aquest és el cas que es presenta en l'assignatura de Tecnologia del Medi Ambient i Sostenibilitat.

Per tant, l'objectiu d'aquest treball és estudiar de forma molt més detallada aquest procés i trobar varies solucions davant l'equació diferencial que en l'assignatura de Tecnologia del Medi Ambient i Sostenibilitat s'estudia de forma simplificada. També s'ha optat per representar gràficament aquestes solucions per visualitzar-ne el seu comportament.

El treball consta d'un estudi teòric de les solucions a la dispersió de contaminants en medis porosos, amb o sense reacció química. Tenint en compte diferents condicions de treball, es parteix del cas més simple, equivalent a una font generadora puntual instantània, fins a solucions matemàticament més complexes, equivalent a fonts volumètriques contínues, tenint en compte un seguit de condicions de contorn, com podria ser el domini d'estudi que en tot moment es considera infinit en els eixos x i y i finit en l'eix z .

S'ha pogut trobar un total de quatre expressions que permeten representar la concentració del contaminant en un medi de 3-D en diferents condicions de treball. Per altra banda s'amplien les solucions ja existents, considerant casos sense reacció química i considerant un factor de retard. Obtenint un total d'onze expressions que permeten aproximar gairebé qualsevol model de transport de contaminant real a una de les solucions trobades. Cal destacar que aquestes són suficientment simplificades per tal de poder aplicar-les al contingut de l'assignatura de Tecnologies del Medi Ambient i Sostenibilitat.

Per cada una de les quatre solucions principals, s'ha graficat en 2-D el cas més generalitzat i els diferents casos particulars variant les condicions d'estudi. També es fa una comparativa gràfica de com varia el comportament considerant un tipus de font o altre, tal com representar com canvia el comportament de cada model en funció del temps.

Resumen

El estudio de la dispersión de contaminantes permite saber cuál es la concentración de una sustancia en una región, en un tiempo y espacio determinado. Sin embargo, la representación de un modelo real (3-D) presenta una elevada complejidad matemática. Para resolver la ecuación diferencial es necesario utilizar distintos métodos de resolución matemáticos, como por ejemplo el Método de Funciones de Green, llegando a expresiones que no se pueden resolver analíticamente. De esta forma, las soluciones son complejas de obtener y son solo aproximaciones que pierden en precisión y permiten solo obtener un valor aproximado.

Por esta razón, habitualmente se estudia situaciones más simplificadas. Considerando solo una dimensión. Este es el caso que se presenta en la asignatura de Tecnología del Medio Ambiente y Sostenibilidad.

Por lo tanto, el objetivo de este trabajo es estudiar de forma más detallada este proceso y encontrar varias soluciones a la ecuación diferencial que en la asignatura de Tecnología del Medio Ambiente y Sostenibilidad se estudia de forma simplificada. También se hará una representación gráfica de estas soluciones para visualizar su comportamiento

El trabajo consta de un estudio teórico de las soluciones a la dispersión de contaminantes en medios porosos, con o sin reacción química. Teniendo en cuenta diferentes condiciones de trabajo, se parte del caso más simple, equivalente a una fuente generadora puntual instantánea, hasta soluciones matemáticamente más complejas, equivalente a fuentes volumicas continuas, teniendo en cuenta diferentes condiciones contorno, como podría ser el dominio de estudio que en todo momento se considera infinito en los ejes x y y y finito en el eje z .

Se ha encontrado un total de cuatro expresiones que permiten representar la concentración del contaminante en una región de 3-D en diferentes condiciones de trabajo. Por otro lado, se amplían las soluciones ya existentes, considerando casos sin reacción química y considerando un factor de retardo. Se han obtenido un total de once expresiones que permiten aproximar casi cualquier modelo de transporte de contaminante real a una de las soluciones encontradas. Teniendo en cuenta que estas son suficientemente simplificadas para poder ser aplicadas en el contenido de la asignatura de Tecnologías del Medio Ambiente y Sostenibilidad.

Por cada una de las cuatro soluciones principales, se grafica en 2-D el caso más generalizado, tal como los diferentes casos particulares variando las condiciones de estudio. También se realiza una comparativa gráfica de como varía el comportamiento considerando un tipo de fuente u otro, como también representar como cambia el comportamiento de cada modelo en función del tiempo.

Abstract

The study of pollutant dispersion makes it possible to know the concentration of a substance in a given region, time and space. However, the representation of a real model (3-D) presents a high mathematical complexity. To solve the differential equation it is necessary to use different mathematical resolution methods, such as the Green's Function Method, arriving at expressions that cannot be solved analytically. In this way, the solutions are complex to obtain and are only approximations that lose in precision and allow only an approximate value to be obtained.

For this reason, more simplified situations are usually studied. Considering only one dimension. This is the case presented in the Environmental Technology and Sustainability course.

Therefore, the aim of this work is to study in more detail this process and find several solutions to the differential equation that in the subject of Environmental Technology and Sustainability is studied in a simplified form. A graphical representation of these solutions will also be made to visualize their behavior.

The work consists of a theoretical study of the solutions to the dispersion of pollutants in porous media, with or without chemical reaction. Taking into account different working conditions, we start from the simplest case, equivalent to an instantaneous point source, to mathematically more complex solutions, equivalent to continuous volumetric sources, taking into account different boundary conditions, such as the study domain, which at all times is considered infinite in the x and y axes and finite in the z axis.

A total of four expressions have been found to represent the concentration of the pollutant in a 3-D region under different working conditions. On the other hand, existing solutions are extended, considering cases without chemical reaction and considering a delay factor. A total of eleven expressions have been obtained that allow to approximate almost any real pollutant transport model to one of the solutions found. Taking into account that these are sufficiently simplified to be applied to the content of the Environmental Technologies and Sustainability course.

For each of the four main solutions, the most generalized case is plotted in 2-D, as well as the different particular cases varying the study conditions. A graphical comparison of how the behavior varies considering one type of source or another is also made, as well as a representation of how the behavior of each model changes as a function of time.

Sumari

RESUM	3
RESUMEN	4
ABSTRACT	5
GLOSSARI I NOMENCLATURA	9
1. PREFACI	10
1.1. Motivació	10
2. INTRODUCCIÓ	11
2.1. Abast del treball	11
2.2. Objectius del treball	11
3. CONTAMINACIÓ DE SÒLS I AIGÜES SUBTERRÀNIES	12
3.1. Sistema sòl	12
3.1.1. Estructura del sòl	12
3.2. Aigües subterrànies (aqüífers)	13
3.2.1. Tipus d'aqüífers	13
3.2.2. Estructura aqüífers	13
3.3. Fonts de contaminació	14
3.3.1. Fonts de contaminació geogèniques naturals	14
3.3.2. Fonts de contaminació antropogèniques	15
3.3.2.1. Fonts de contaminació per activitat industrial	15
3.3.2.2. Fonts de contaminació per mineria	15
3.3.2.3. Fonts de contaminació per infraestructures urbanes i de transports	16
3.3.2.4. Fonts de contaminació per generació i eliminació de deixalles i aigües residuals	16
3.3.2.5. Fonts de contaminació per activitat agrícola i ramadera	17
3.4. Tipus de contaminants	17
3.4.1. Contaminants inorgànics	18
3.4.1.1. Metalls pesants i metal·loides	18
3.4.1.2. Nitrogen i Fòsfor	18
3.4.2. Contaminants orgànics	19
3.4.2.1. Hidrocarburs aromàtics policíclics	19
3.4.2.2. Contaminants orgànics persistents (COPs)	19
4. Mecanismes de transport del contaminant	19
4.1 Advecció	20
4.1.1. Llei de Darcy	20
4.2. Difusió	21
4.2.1. 1 ^a Llei de Fick	21
4.2.2. 2 ^a Llei de Fick	23
4.3. Dispersió	23
4.4. Adsorció	26

4.4.1. Retard	27
4.6. Degradació	28
5. MODELS DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS	28
5.1 Model de transport 1-D	32
5.1.1. Efecte del retard o l'adsorció	35
5.2. Model de transport 3-D	36
6. PLANTEJAMENT MODEL DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS EN 3-D	36
6.1. Condicions de contorn	37
6.2. Font generadora	38
7. RESOLUCIÓ MODEL DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS EN 3-D AMB REACCIÓ QUÍMICA I FRENAT	38
7.1. Cas font generadora (r) com a condició de contorn	39
7.1.1.1. Cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn afectat pel retard	39
7.2. Cas font generadora (r) com a funció temporal	42
7.2.1. Font generadora (r) puntual instantània	42
7.2.1.1. Font generadora (r) puntual instantània afectada pel retard	43
7.2.2. Font generadora (r) volumètrica instantània	44
7.2.2.1. Font generadora (r) volumètrica instantània afectada pel retard	45
7.2.3. Font generadora (r) volumètrica contínua	46
7.2.3.1. Font generadora (r) volumètrica contínua afectada pel retard	47
8. RESOLUCIÓ MODEL DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS EN 3-D SENSE REACCIÓ QUÍMICA I FRENAT	47
8.1. Cas font generadora (r) com a condició de contorn	48
8.1.1. Cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn	48
8.2 Cas font generadora (r)	49
8.2.1. Font generadora (r) puntual instantània	49
8.2.2. Font generadora (r) volumètrica instantània	49
8.2.3. Font generadora (r) volumètrica contínua	50
9. RESOLUCIÓ MODEL DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS EN 3-D TENINT EN COMPTE LA POROSITAT	51
10. REPRESENTACIÓ GRÀFICA DEL MODEL DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS EN 3-D	52
10.1. Representació gràfica cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn	52
10.2. Representació gràfica cas font generadora com a funció temporal (r) puntual instantània	54
10.3. Representació gràfica cas font generadora com a funció temporal (r) volumètrica instantània	57

10.4. Comparació gràfica entre cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn i cas font generadora puntual (r) com a funció temporal	59
10.5. Comparació de l'advecció i dispersió dels diferents casos estudiats	61
10.6. Representació gràfica del comportament en funció del temps del contaminant	63
11. RESULTATS	70
12. PLANIFICACIÓ	72
13. ESTUDI ECONÒMIC	73
14. ESTUDI AMBIENTAL	74
15. ESTUDI SOCIAL	75
16. CONCLUSIONS	76
17. BIBLIOGRAFIA	77
18. ANNEXOS	81
18.1 Annex 1	81
18.2 Annex 2	82

Glossari i Nomenclatura

TFG: Treball de Fi de Grau

TMA: Tecnologies del Medi Ambient i Sostenibilitat

GFM: Mètode de Funcions de Green

1. Prefaci

En l'estudi de la dispersió de contaminants la representació d'un model real (3-D) presenta una gran dificultat. La resolució de l'equació diferencial és d'elevada complexitat matemàtica i dona lloc molts cops a expressions que no es poden resoldre analíticament. Per aquesta raó, habitualment s'estudia situacions més simplifiades, considerant només una dimensió. Aquest és el cas que es presenta en l'assignatura de Tecnologia del Medi Ambient i Sostenibilitat. És per aquest motiu que el professor responsable de l'assignatura va proposar la realització d'aquest treball amb l'objectiu d'obtenir una expressió matemàtica de mínima complexitat que representi el model de transport de contaminants en un aquífer subterrani en 3-D.

1.1. Motivació

En l'assignatura de TMA es presenten els processos d'advecció, dispersió, difusió i com afecten en el comportament del contaminant en el sòl o un aquífer. Els coneixements que es donen en l'assignatura són limitats, doncs es treballa només amb una aproximació en 1-D del comportament real d'un contaminant. Per millorar el contingut de l'assignatura es vol trobar una expressió matemàtica que representi el comportament del contaminant.

2. Introducció

Aquest Treball de Fi de Grau consisteix en un estudi bibliogràfic i la representació gràfica d'una equació que permeti calcular la concentració d'un contaminant que es mou a causa dels processos d'advecció, dispersió i difusió, en 3-D. No es tracta d'un estudi matemàtic, simplement de la comprensió i recopilació teòrica de diferents estudis ja existents.

D'aquesta forma el treball no consta de solucionar operacions matemàtiques complexes, simplement estudiar-ne els casos existents i extreure'n conclusions, tal com ampliar-les. Com també representar gràficament els casos estudiats per tal d'observar si les solucions trobades representen un comportament realista.

2.1. Abast del treball

Com ja s'ha mencionat prèviament, aquest treball es basa en la resolució d'una expressió diferencial. S'estudia el comportament d'un contaminant que es mou a causa dels processos d'advecció, dispersió i difusió, en 3-D, respecte el temps. També s'ha tingut en compte variables com el factor de retard i la degradació per reacció química. Tot i així, aquesta última només s'ha profunditzat fins a casos de reacció química màxim de primer ordre. Els casos de reaccions químiques d'ordre superior implicaven una complexitat matemàtica que quedava fora de l'abast de l'estudiant.

Cal destacar que al tractar-se d'un model en 3-D és possible fer-ne una representació gràfica en tres dimensions, tot i així, donada la complexitat per a fer aquesta representació, aquest estudi només realitza una representació del comportament en 2-D.

2.2. Objectius del treball

En primer lloc l'objectiu d'aquest estudi és trobar diverses solucions al model de transport de 3-D d'un contaminant per tal de poder aplicar el coneixement obtingut a l'assignatura de "TMA".

En segon lloc, es vol ampliar aquests resultats obtinguts amb la finalitat d'obtenir el major nombre de solucions possibles que s'adaptin al major nombre de possibles casos existents. Tenint en compte que els resultats han de tenir una complexitat matemàtica baixa per tal que sigui aplicable a l'assignatura de TMA.

Finalment, a partir dels resultats obtinguts es vol fer una representació gràfica en 2-D del comportament dels diferents casos estudiats, comparant-los entre ells, i també observar si les solucions trobades representen un comportament realista.

3. Contaminació de sòls i aigües subterrànies

3.1. Sistema sòl

La formació del sòl és un procés constant que involucra la interacció entre material parental, la biota, el clima, el relleu i el temps. El sòl és la capa externa que recobreix la superfície de la Terra i està compost per:

- **Matèria orgànica o humus:** microorganisme i matèria d'origen vegetal i animal, entre els quals destaquen per la seva importància les bactèries, els fongs, l'humus, els cucs i les formigues.
- **Matèria mineral o inorgànica:** formada per la degradació de la roca sobre la qual està el sòl. Ric en minerals com la sorra i l'argila.
- **Aire:** de vital importància per la respiració de les arrels de les plantes i dels microorganismes que viuen al sòl. Més del 20% del volum total del sòl ha d'estar ocupat per l'aire.
- **Aigua:** mitjà pel qual es dissolen els minerals del sòl convertint-se en substàncies útils per les plantes.

El sistema sòl està format doncs per restes d'éssers vius, sorra, minerals, aigua, plantes i animals petits. Serveix de substrat per a la vida animal, vegetal i humana i és on es formen els llacs i les aigües subterrànies, com també per on circulen els rius.

3.1.1. Estructura del sòl

El sòl s'estructura segons les següents capes:

- **Horitzó A:** conté una gran quantitat de matèria orgànica i és molt porós, té una profunditat d'uns centímetres i és on es localitzen les arrels de les plantes inferiors i la majoria dels microorganismes.
- **Horitzó B:** profunditat d'aproximadament 50 [cm] on la porositat disminueix, hi ha menys matèria orgànica, però conté una quantitat de nutrients apreciable que provenen d'espècies de l'horitzó A. Les plantes mitjanes arrelen fins l'horitzó B i encara hi viuen alguns microorganismes.

- **Horitzó C:** profunditat d'1 [m], semblant al B, però amb menys nutrients i menys porositat (s'ha compactat pel pes dels horitzons A i B). Els arbres arriben a arrelar fins aquesta zona i els microbis només hi viuen de forma parasitària a les arrels.
- **Horitzó R:** és la roca i el sòl inert. La seva porositat és quasi sempre inferior als horitzons A, B i C, encara que també pot ser roca fracturada. Acostuma a començar a uns 2 [m] de profunditat.

3.2. Aigües subterrànies (aqüífers)

L'aigua que cau en forma de pluja o neu i no es perd per evaporació ni transpiració de les plantes s'infiltra cap el subsòl fins que arriba a la capa impermeable en un procés anomenat percolació. En aquest procés l'aigua va omplint els porus buits successivament i va baixant per gravetat donant lloc a les aigües subterrànies. En funció de la porositat i l'estructura del sòl queda determinat el tipus d'aqüífer.

3.2.1. Tipus d'aqüífers

Depenent del seu origen de formació els aqüífers es poden dividir en:

- **Aqüífer d'infiltració:** resultat de la penetració en profunditat de les aigües meteòriques.
- **Aqüífer de condensació:** resultat de la condensació de l'aigua procedent de la boira nocturna. Es troba en zones climàtiques com els deserts.
- **Aqüífers congènits:** l'aigua es conserva en els sediments després de la transformació d'aquests en roques. Es troba en conques marines, lacustres i fluvials.
- **Aqüífers juvenils:** l'aigua provinent de molts manantials situats en regions d'activitat volcànica o provinent de muntanyes joves.

3.2.2. Estructura aqüífers

Els aqüífers es divideixen en diferents capes o zones que es classifiquen de la següent forma:

- **Zona vadosa o capa d'aeració:** capa superior, relativament seca, amb els porus plens d'aire (exceptuant els horitzons A i B edàfics, que contenen molta humitat).

- **Zona intermèdia de transició:** capa mullada, però no totalment saturada, que conté una certa quantitat d'aigua en els porus que ha pujat per capil·laritat.
- **Zona saturada (aquífer o aigua freàtica):** aigua subterrània pròpiament dita, així el terra està saturat d'aigua (els porus estan plens d'aigua). El nivell freàtic és aquell on comença la saturació.
- **Roca mare:** capa de roca impermeable que impedeix que l'aigua se'n vagi més avall.

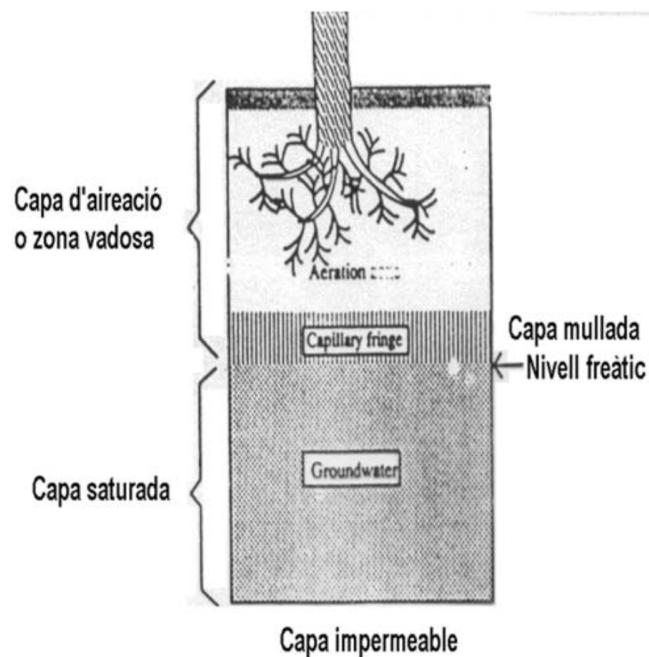


Figura 1. Estructura aquífers [17]

3.3. Fonts de contaminació

Existeixen diferents tipus de fonts de contaminació depenent del mètode de contaminació i de la naturalesa del contaminant. Tot i que normalment es relaciona la contaminació amb l'activitat humana, aquest no té perquè ser sempre el causant. A continuació es presenten els diferents tipus de font de contaminació, el seu origen i la gravetat del seu impacte en el medi ambient.

3.3.1. Fonts de contaminació geogèniques naturals

Diversos materials ubicats en el sòl són fonts naturals de metalls pesants i altres elements com els radionúclids i poden presentar un risc pel medi ambient i la salut humana en

concentracions elevades. La proporció d'aquests components pot tenir una gran variació, considerant la pròpia variació natural de la concentració d'elements traça segons els tipus de roca mare.

L'arsènic (As) és un dels principals contaminants d'aquest tipus. Existeixen diverses fonts naturals d'arsènic, originades per erupcions volcàniques, per meteorització de minerals que contenen arsènic, com també zones mineralitzades de forma natural d'arsenopirita, formades precisament per aquesta meteorització de roques. Tot i així, aquests estan ubicats en zones més profundes.

El Radó (Rn) és un gas radioactiu ubicat en el sòl i en les roques, la difusió del qual cap a l'exterior està controlat per l'estructura del sòl i la seva porositat [14].

Per altra banda, erupcions volcàniques o incendis forestals són altres possibles causants de contaminació natural, alliberant-se molts components tòxics com diferents tipus de dioxines i hidrocarburs aromàtics policíclics.

Tot i així, aquest tipus de contaminació natural, normalment no provoca problemes ambientals, degut a la capacitat regeneradora i la capacitat d'adaptació de les plantes. Els problemes s'originen quan aquests ecosistemes són alterats per factors externs, influenciant en la seva capacitat de resposta [20].

3.3.2. Fonts de contaminació antropogèniques

Les principals fonts de contaminació antropogèniques són els químics alliberats en activitats industrials, deixalles domèstiques, com les aigües residuals, els agroquímics i els productes derivats del petroli, com també fertilitzants i plaguicides utilitzats en l'agricultura i la ramaderia.

3.3.2.1. Fonts de contaminació per activitat industrial

L'activitat industrial és causant de diferents tipus de contaminació. Per una banda, els contaminants poden ser alliberats a l'atmosfera, com podrien ser gasos i radionúclids i poden tornar a la superfície terrestre com a pluja àcida o per deposició atmosfèrica. Aquest tipus d'activitat també descarrega les deixalles directament sobre el sòl i les aigües que l'envolten, contaminant-los de forma directa. Entre aquest tipus d'activitat destaquen per exemple les plantes tèrmiques o altres processos industrials on l'aigua és utilitzada per processos de refredament, i acaba sent abocada en llacs, rius o el mar, provocant una contaminació tèrmica en aquestes regions, com també arrossega metalls pesants i clorurs que afecten els ecosistemes aquàtics.

3.3.2.2. Fonts de contaminació per mineria

La mineria allibera grans quantitats de metalls pesants i altres contaminants tòxics al medi ambient els quals persisteixen durant períodes llargs. Aquest tipus d'activitat ha tingut un

gran impacte mediambiental i existeix una gran quantitat de documents que corroboren aquest impacte arreu del món [1]. Els contaminants es troben en forma de partícules fines que poden tenir diferents concentracions de metalls pesants i són dispersats per l'acció d'erosió hídrica i eòlica i poden arribar filtrar-se al sòl. Aquest tipus de situacions han estat registrades diverses vegades com per exemple el cas on aquest tipus de contaminants van acabar afectant sòls agrícoles com a Namíbia [21].

Pel que fa a la mineria, l'ús de roques de fosfat per la producció de fertilitzants, genera un subproducte anomenat guix fosforat que té propietats radioactives. Aquest tipus d'activitat suposa una gran amenaça pels ecosistemes que l'envolten [2].

Finalment, l'extracció de petroli i gas, en presència de vessaments de petroli cru i salmorres, també presenta una font de contaminació a causa dels nivells elevats de salinitat d'aquestes, com també traces tòxiques de materials radioactius que presenten naturalment.

3.3.2.3. Fonts de contaminació per infraestructures urbanes i de transports

A més de l'impacte obvi de les infraestructures urbanes i de transport per l'ocupació del sòl, cal destacar el vessament de contaminants que contribueix a la degradació ambiental. El mecanisme de contaminació es basa en les emissions dels motors de combustió dels vehicles de transport es dispersen fins a 100 [m] de distància per deposició atmosfèrica, en vessaments de petroli o en les esquitxades generades pel tràfic durant les pluges, doncs poden acumular partícules riques en metalls pesants procedents de la corrosió de les parts metàl·liques dels vehicles, dels pneumàtics, de l'abradió del paviment, com també altres contaminants com els hidrocarburs aromàtics policíclics, plom, el cautxú i els components derivats dels plàstics, que acaba afectant els ecosistemes.

3.3.2.4. Fonts de contaminació per generació i eliminació de deixalles i aigües residuals

Pel que fa a les infraestructures urbanes, en la majoria de països desenvolupats existeixen estrictes regulacions que controlen l'eliminació i el reciclat de deixalles. En canvi, països subdesenvolupats l'eliminació de deixalles municipals en abocadors i l'abocament d'aigües residuals no tractades, acaben sent fonts de contaminació de compostos orgànics poc biodegradables, com també de metalls pesants.

L'elevat creixement de la població i l'augment de la producció de deixalles i llot, i la falta de capacitat de gestió dels municipis, crea una problemàtica. La metodologia més comuna per eliminar aquest tipus de residus és mitjançant els abocadors i la incineració. Tanmateix, en ambdós casos, una gran quantitat de contaminants, com metalls pesants, hidrocarburs poliaromàtics o compostos farmacèutics, procedents dels abocadors o de la pluja de cendres de les plantes d'incineració acaben contaminant al sòl i les aigües subterrànies.

L'alta producció d'equips elèctrics i electrònics, fa que un cop acabada la vida útil d'aquests, es converteixen en deixalles que contenen substàncies perilloses, que s'alliberen per exemple en el procés de reciclatge. D'estaca el reciclatge de les bateries de plom, identificats com a principal font de contaminació del sòl del món, sobretot a Àfrica on la indústria de les bateries està altament estesa.

Per altra banda, l'ús de llots de depuradora com a esmena orgànica pot ser beneficiós per la matèria orgànica i els nutrients aportats al sòl, tot i així, si aquests llots no han estat prèviament tractats, existeix la possibilitat que metalls pesants puguin acumular-se al sòl i posteriorment filtrar-se als aqüífers.

3.3.2.5. Fonts de contaminació per activitat agrícola i ramadera

Entre les fonts de contaminació per activitat agrícola s'inclou per una part accidents d'hidrocarburs utilitzats com a combustibles per a maquinària, les conseqüències del vessament de les quals ja s'ha esmentat prèviament, tal com les deixalles com l'orina i els excrements no tractats correctament. Aquestes fonts inclouen productes agroquímics, com fertilitzants, fems dels animals i plaguicides. També s'ha de tenir en compte el tipus de font d'aigua que s'utilitza pel reg, ja que en funció si són aigües residuals agrícoles, industrials o urbanes, poden tenir efectes nocius en el medi ambient.

D'aquesta forma existeix el perill d'un ús excessiu de fertilitzants i fems provocant un possible excés de nitrogen (N), fòsfor (P) i metalls pesants que a part de ser una font de contaminació del sòl, són perjudicials per la salut.

L'ús excessiu de fertilitzants pot provocar la salinitat del sòl, l'acumulació dels metalls pesants tal com de radionúclids naturals, a l'eutrofització de l'aigua i a l'acumulació de nitrats. El N en excés també pot perdre's en l'atmosfera a través de les emissions de gasos d'efecte hivernacle.

Per altra banda, existeix l'ús de les plaguicides, substàncies o mescla de substàncies, destinades a destruir, prevenir o controlar qualsevol plaga que pugui destruir o afectar la producció d'aliments, productes agrícoles o producció de fusta. Seguint la mateixa dinàmica, un ús excessiu de plaguicides pot tenir efectes negatius sobre el medi ambient i la salut humana.

Així doncs, es pot observar que la majoria de fonts de contaminació són antropogèniques. L'activitat humana, sota condicions de descontrol és capaç de provocar efectes destructius gairebé irreversibles sobre la naturalesa i sobre la mateixa salut humana. Els diferents tipus de fonts de contaminació, dispersen diferents tipus de contaminants que es poden dividir en orgànics i inorgànics.

3.4. Tipus de contaminants

3.4.1. Contaminants inorgànics

Si es parla de contaminants inorgànics, es fa referència a contaminants metal·lúrgics, colorants, pigments farmacèutics, residus provinents d'activitats industrials o residus ramaders i agrícoles, com podrien ser els purins. Aquests, sota una situació de descontrol de la seva gestió poden provocar la contaminació del sòl i posteriorment de les aigües subterrànies. Les substàncies alliberades poden ser de diferents tipus.

3.4.1.1. Metalls pesants i metal·loides

Aquest tipus de substàncies fan referència a elements del grup de metalls i metal·loides com per exemple el plom (Pb), el cadmi (Cd), el coure (Cu), entre altres, que es caracteritzen per tenir una massa relativament elevada i són tòxics. Juntament amb els metalls pesants sovint es troben no-metalls com l'arsènic (As), l'antimoni (Sb) i el seleni (Se). Aquests elements són essencials per plantes, animals i humans, ja que són micronutrients, però en concentracions elevades en canvi, són perjudicials per a la salut degut a la seva naturalesa no biodegradable.

3.4.1.2. Nitrogen i Fòsfor

El Nitrogen (N) es troba de forma orgànica com de forma inorgànica i en diferents estats d'oxidació. És essencial en totes les estructures vives com poden ser les proteïnes, l'ARN, l'ADN, els enzims, les hormones i les vitamines. Les plantes l'absorbeixen en forma d'amoni (NH_4^+) i en forma de nitrat (NO_3^-), en canvi, els animals com a aminoàcids i àcids nucleics. Pel que fa al Fòsfor (P) també forma part de les molècules biològiques com l'ADN i l'ARN i és un dels principals macronutrients per tots els organismes vius.

Igual que moltes altres, aquestes dues substàncies es converteixen en contaminants quan són aplicats en excés en sòls, per exemple en zones agrícoles o àrees de ramaderia intensiva. Aquests sovint acaben sent filtrats a les aigües subterrànies, causant eutrofització o, en concentracions elevades, com per exemple de nitrats, problemes ambientals i de salut, com les aigües contaminades per nitrats a causa dels purins.

3.4.2. Contaminants orgànics

D'entre aquests possibles contaminants es troben el petroli, la gasolina o els productes fitosanitaris. Les fonts d'aquests productes poden ser molt diverses però destaquen les activitats humanes com la indústria, el transport i l'agricultura, entre d'altres. Els productes fitosanitaris solen provenir d'activitats agrícoles. En aquest tipus d'activitat s'utilitzen plaguicides, herbicides i fertilitzants amb la finalitat de protegir els cultius i millorar-ne la productivitat. D'aquesta forma existeix la possibilitat que els sòls siguin contaminants per derivats halògens, compostos organofosforats, carbamats, derivats d'urea i tiourea, i compostos heterocíclics, entre d'altres.

3.4.2.1. Hidrocarburs aromàtics policíclics

Els hidrocarburs aromàtics policíclics (HAP) són un grup de contaminants semivolàtils persistents. Els més freqüents són antracè, fluorantè, naftalè, fenantrè i benzopirè. Tenen una solubilitat en aigua molt baixa i una taxa de transferència de massa amb la fase sòlida molt lenta, limitant la seva disponibilitat pels microorganismes i impedit així l'atenuació natural per processos microbians. Així doncs, els HAP s'acumulen en el sòl degut a la seva persistència i hidrofobicitat i tendeixen a ser retinguts durant períodes temporals llargs. D'aquesta forma la majoria d'aquests són considerats contaminants orgànics persistents (COP) que es defineixen més endavant.

Destaquen per la seva alta toxicitat, la seva capacitat mutagènica i carcinògena i la seva àmplia presència en el medi ambient, com també per ser contaminants omnipresents en els sòls. Un cop hi entren poden ser atenuats o degradats per una sèrie de processos físics-químics i biològics com la volatilització i la foto-oxidació a l'atmosfera, la lixiviació a l'aigua subterrània, la pèrdua abiòtica, l'absorció per les plantes o la degradació microbiana.

3.4.2.2. Contaminants orgànics persistents (COPs)

Alguns contaminants orgànics tenen la característica de quedar retinguts en el sòl durant períodes temporals llargs. Són els anomenats contaminants orgànics persistents, els prèviament anomenats (COP). Existeix una gran varietat d'aquest tipus de contaminants i els seus orígens també són molt diversos des de l'agricultura fins a processos industrials. Inclouen compostos aromàtics clorats i bromats com els policlorobifenils (PCB), substàncies òrgano-clorades com el DDT o altres químics com les dioxines. Aquestes molècules pateixen bioacumulació a través de la cadena alimentària i tenen efectes adversos sobre la salut de la vida animals i sobre la naturalesa.

4. Mecanismes de transport del contaminant

Els diferents mecanismes de transport de contaminant es poden dividir en processos mecànics, químics i biològics.

Els processos mecànics són processos on el moviment dels contaminants és determinat únicament per mecanismes físics. Són per exemple l'advecció, la difusió o la dispersió. Per altra banda, en els processos químics com per exemple l'adsorció, les partícules de contaminant poden interaccionar amb el sol en funció de les seves característiques químiques fent que el transport d'aquests contaminants sigui modificat per les reaccions químiques que puguin patir. Per últim, els processos biològics, com la degradació, són aquells on el transport dels contaminants està afectat per l'acció de microorganismes presents al sol.

4.1 Advecció

L'advecció és procés d'arrossegament de la substància contaminant per l'aigua. Si només existís aquest fenomen, el contaminant viatjaria a la mateixa velocitat que l'aigua i l'extensió ocupada pel contaminant seria constant. Així doncs, l'advecció és el moviment de contaminants, en un medi porós, mitjançant un flux de massa a través d'una secció unitat perpendicular al flux.

4.1.1. Llei de Darcy

La Llei de Darcy és una relació matemàtica aplicable al flux de fluids en medis porosos permeables o porosos, com podria ser l'aigua que drena en la sorra. A mesura que el fluid avança pel medi porós, la seva pressió hidroestàtica va variant, augmenta en els punts més propers a la font i disminueix en els punts més propers al drenatge. Per aquesta raó, apareix el concepte de gradient hidràulic. També cal destacar que el medi porós es caracteritza per la seva conductivitat hidràulica (K). La Llei de Darcy es basa en la següent equació:

$$Q = K_i \cdot A \cdot \frac{\Delta h}{\Delta L} \quad [\text{eq. 1}]$$

on:

- Q és el cabal que travessa una àrea [m^3/s]
- A és l'àrea de medi porós [m^2]
- Δh és la longitud del medi porós [m]
- ΔL és gradient hidràulic del medi porós [m]
- K_i és la conductivitat hidràulica [m/s]

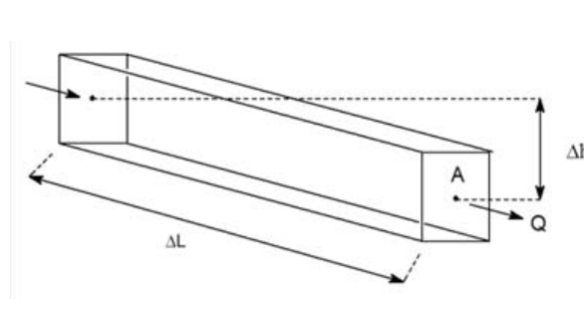


Figura 2. Descripció mecanisme advecció [17]

També diu que:

$$q_{fi} = Q/A \quad [\text{eq. 2}]$$

on:

- q_{fi} és el flux per unitat d'àrea [m/s]
- A és l'àrea de medi porós [m^2]
- Q és el cabal que travessa una àrea [m^3/s]

i que:

$$v_{fi} = q_{fi}/n = \frac{K_i \cdot (\frac{\Delta h}{\Delta L})}{n} \quad [\text{eq. 3}]$$

- v_{fi} és la velocitat lineal mitjana [m/s]
- n és la porositat
- K_i és la conductivitat hidràulica [m/s]

4.2. Difusió

La difusió és el procés de transport de massa a escala molecular en el qual els soluts (o contaminants) es mouen des de les àrees de major concentració a les àrees de menor concentració.

4.2.1. 1ª Llei de Fick

Es tracta d'una llei quantitativa que descriu la difusió de matèria o energia en un medi on inicialment existeix un equilibri químic o físic. Estableix que en el cas d'existir diferents

concentracions d'una substància, aquesta passa de les regions de major a menor concentració.

Per tant, podem expressar la difusió d'un contaminant en 1-D mitjançant la 1^a Llei de Fick que diu:

$$f_x = - D_d \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \quad [\text{eq. 4}]$$

on:

- f_x és el flux de massa [$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$]
- D_d és el coeficient de difusió [m^2/s]
- $\frac{\partial C}{\partial x}$ és el gradient de concentració [$\frac{kg}{m^3 \cdot s}$]

De totes maneres aquesta fórmula només es compleix en un medi 100% líquid. Si el procés es dona en aigua en un medi porós s'ha de tenir en compte algunes especificacions relacionades amb el medi porós.

El coeficient de difusió efectiva (D^*) es calcula com [11] :

$$D^* = D_d \cdot m_e \cdot \delta / \tau^2 \quad [\text{eq. 5}]$$

on:

- m_e és la porositat eficaç
- τ és la tortuositat (longitud recorreguda)
- δ és el factor de constricció

Com normalment els coeficients δ i τ són desconeguts, es pot simplificar la relació com una funció de porositat eficaç:

$$D^* = D_d \cdot (m_e)^c \quad [\text{eq. 6}]$$

on:

- m_e és la porositat eficaç
- c és el coeficient (1.8 a 2.0 per materials consolidats; 1.3 per sorres no consolidades)

D'aquesta forma es pot reescriure la primera llei de Fick tenint en compte la porositat, quedant la següent expressió:

$$F = - D^* \cdot \frac{dC}{dx} \quad [\text{eq. 7}]$$

4.2.2. 2ª Llei de Fick

La 1ª Llei de Fick no considera la variable temps en la seva equació. Si es suposa que es té un punt amb concentració constant però desitgem saber com varia en funció del temps és necessari utilitzar la segona llei de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_m \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad [\text{eq. 8}]$$

Una de les possibles equacions davant aquesta equació per un medi porós va ser s'expressa mitjançant la següent expressió:

$$C(x, t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D^* \cdot t}} \quad [\text{eq. 9}]$$

on:

- C_0 és la concentració inicial del contaminant, que es manté constant
- $C(x, t)$ és la concentració a una distància x transcorregut un temps t
- erfc és la funció error complementària, tabulada

4.3. Dispersió

La dispersió mecànica és la provocada pel moviment del fluid a través del medi porós, pot ser longitudinal o transversal.

La dispersió longitudinal és deguda a:

- El retrocés de les molècules que troben camins més tortuosos.
- L'avançament ràpid de les molècules que troben camins més amples.

- L'avançament ràpid de les molècules que circulen pel centre dels canals intergranulars a diferència dels que circulen a prop del gra.

Plasmant això en un medi heterogeni, augmentarà la dispersió, endarrerint les molècules que trobin zones més permeables.

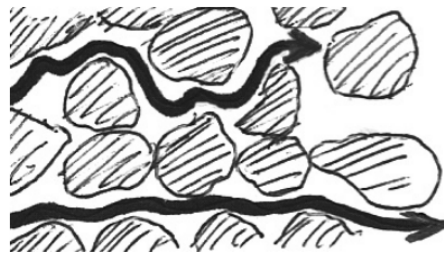


Figura 3. Dispersió longitudinal per la tortuositat [28]

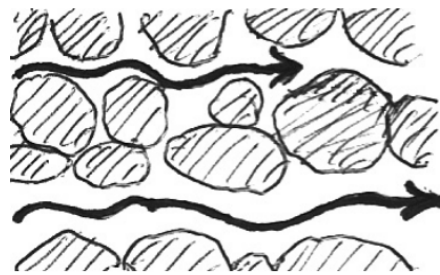


Figura 4. Dispersió longitudinal per l'amplitud dels canals [28]

La dispersió transversal és deguda a la constant bifurcació dels camins que troba el fluid.

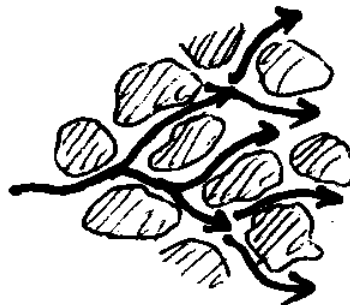


Figura 5. Dispersió transversal [28]

La dispersió longitudinal sempre és major que la transversal, per aquesta raó la taca del contaminant té una forma més allargada.

La capacitat que presenta un medi porós per dispersar mecànicament un fluid es representa a partir del coeficient de dispersivitat dinàmica (α) el qual depèn de la porositat, de la tortuositat, la forma dels grans, etc. Relacionant-ho amb els punts explicats anteriorment, aquest coeficient es distingeix entre el coeficient de dispersivitat dinàmica longitudinal (α_L) i el de dispersivitat transversal (α_T).

Per tenir en compte la velocitat del fluid, apareix el concepte de la dispersió mecànica, que s'expressa de la següent forma:

$$\text{Dispersió mecànica} = \alpha \cdot v \quad [\text{eq. 10}]$$

on:

- α és la dispersivitat dinàmica [L]
- v és la velocitat lineal mitjana [L/t]

Els conceptes de difusió i el de dispersió mecànica no es poden considerar de forma independent, d'aquesta forma combinant-los neix el concepte de la dispersió hidrodinàmica (D). S'expressa de la següent forma:

$$D = \text{dispersió mecànica} + \text{coeficient de difusió} \quad [\text{eq. 11}]$$

si ara també tenim en compte la direcció de flux, obtenim:

$$D_L = \alpha_L \cdot v + D^* \quad [\text{eq. 12}]$$

on:

- D_L és el coeficient de dispersió hidrodinàmica longitudinal
- α_L és el coeficient de dispersivitat dinàmica longitudinal
- v és la velocitat lineal mitjana (velocitat de Darcy/porositat efectiva)
- D^* és el coeficient de difusió efectiva

i

$$D_T = \alpha_T \cdot v + D^* \quad [\text{eq. 13}]$$

on:

- D_T és el coeficient de dispersió hidrodinàmica transversal
- α_T és el coeficient de dispersivitat dinàmica transversal
- v és la velocitat lineal mitjana (velocitat de Darcy/porositat efectiva)
- D^* és el coeficient de difusió efectiva

Combinant aquests conceptes es pot observar com un contaminant es va ampliant i difuminant a mesura que circula en el flux subterrani.

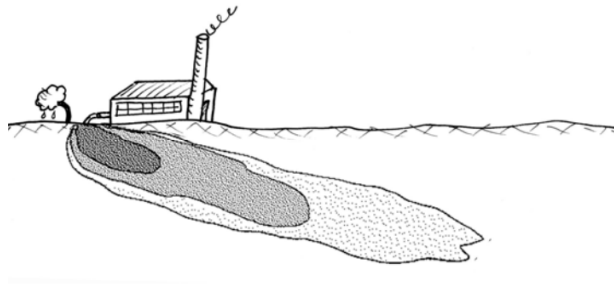


Figura 6. Comportament d'un contaminant tenint en compte la difusió i advecció, davant una font contínua [28]

4.4. Adsorció

Donat un fluid que transporta una substància, aquesta substància quan queda immobilitzada al sòl, com per exemple quedant adherida en un gra de sorra, dona lloc al concepte de l'adsorció. Així doncs, es pot calcular la concentració del contaminant de la següent forma:

$$C_{sòl} = K_d \cdot C \quad [\text{eq. 14}]$$

on:

- $C_{sòl}$ és la concentració de contaminant en el sòl [Kg/Kg sòl]
- $K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$ i K_d és la constant de distribució [m^3/Kg]
- C és la concentració de contaminant en l'aigua [Kg/m^3]
- K_{oc} és la constant de distribució entre la matèria orgànica i aigua [m^3/Kg]

· f_{oc} és la fracció de contingut orgànic del sòl

4.4.1. Retard

El procés de retard és conseqüència de l'adsorció. Quan un contaminant es desplaça per un medi i a causa de l'adsorció les seves molècules queden adherides als minerals del terreny, aquest contaminant a posteriori es desenganxa del mineral gràcies al fluid, repetint-se el procés on queda adherit en un altre mineral o gra. Aquest procés es va repetint, provocant que el contaminant s'incorpori posteriorment al flux, causant d'aquesta forma un procés de retard. Aquest es pot quantificar de la següent forma:

$$V_c = \frac{V_a}{R_f} \quad [\text{eq. 15}]$$

on:

- V_c és la velocitat del contaminant
- V_a és la velocitat del fluid
- R_f és el factor de retard

Obtenint el factor de retard R_f de la següent forma:

$$R_f = \left(1 + \frac{\rho_p}{n} K_d \right) \quad [\text{eq. 16}]$$

on:

- ρ_p és la densitat aparent
- n és la porositat total

Com que el factor de retard afecta a la velocitat d'avançament del contaminant, la manera d'incloure el coeficient en una equació de moviment, és dividint la velocitat i el coeficient de dispersió entre el factor de retard, v/R_f i D/R_f .

4.6. Degradació

Fent referència al procés de degradació cal remarcar la diferència entre la degradació aeròbia i anaeròbica. Pel que fa a l'aeròbia és la descomposició dels contaminants orgànics per part dels microorganismes en presència d'oxigen. En canvi, l'anaeròbica és un procés biològic en absència d'oxigen que consisteix en una sèrie de processos microbiològics que converteixen compostos orgànics en metà i diòxid de carboni.

5. Models de transport de contaminants

Un cop definits els conceptes d'advecció, difusió i dispersió es pot representar el model de transport de contaminants mitjançant una expressió que es basa en l'estudi d'un diferencial de volum, sobre el qual es realitza un balanç diferencial de matèria d'un component on intervenen mínim quatre factors:

- Les entrades i sortides de matèria degudes als cabals que entren a l'element diferencial (depenen de les velocitats).
- Les entrades i sortides de matèria degudes als processos de dispersió i difusió (depenen dels coeficients de dispersió i difusió).
- Les generacions o desaparicions per reaccions químiques.
- Les acumulacions o canvis en les concentracions en l'element diferencial

Així doncs, es suposa un diferencial de volum (ΔV) (Vegeu Figura 7), en el qual entra una certa concentració de matèria $C [Kg/m^3]$, amb una certa velocitat $v_f [m/s]$, d'aquesta matèria una part sortirà del ΔV i la resta s'acumularà en l'interior, seguint la llei de conservació o la primera llei de la Termodinàmica que diu que la matèria i l'energia no es creen ni es destrueixen, sinó que es transformen [16]. El balanç equivalent és el següent:

$$ENTRADA = SORTIDA + ACUMULACIÓ \quad [\text{eq. 17}]$$

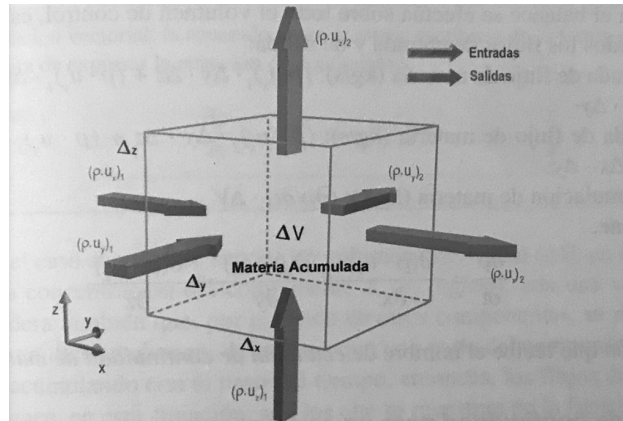


Figura 7. Entrada, sortida i acumulació de matèria en el ΔV d'estudi [16]

Per simplificar el balanç es parteix de la suposició que només hi ha flux de matèria en una direcció, en aquest cas la direcció x . Aleshores obtenim els següents fluxos de matèria:

$$FLUX ENTRADA = FLUX SORTIDA + ACUMULACIÓ MATÈRIA \quad [eq. 18]$$

Aquesta expressió es pot reescriure especificant les diferents components:

$$(C \cdot v_{fx})_1 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z = (C \cdot v_{fx})_2 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z + \frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta V \quad [eq. 19]$$

on el producte entre $\Delta_y \cdot \Delta_z$ representa el diferencial de superfície ΔS el qual travessa el flux i ΔV equival al producte entre $\Delta_x \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z$.

Doncs es pot reescriure l'expressió aïllant cada dimensió i simplificant els diferencials de la següent manera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{(C \cdot v_{fx})_1 - (C \cdot v_{fx})_2}{\Delta_x} \quad [eq. 20]$$

Aplicant el concepte del límit quan $\Delta_x \rightarrow 0$ obtenim:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \lim_{\Delta_x \rightarrow 0} \frac{(C \cdot v_{fx})_1 - (C \cdot v_{fx})_2}{\Delta_x} = \frac{\partial(C \cdot v_{fx})}{\partial x} \quad [eq. 21]$$

Aplicant aquest mateix procediment a la resta d'expressions s'obté:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(C \cdot v_{fy})}{\partial y} \quad [\text{eq. 22}]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(C \cdot v_{fz})}{\partial z} \quad [\text{eq. 23}]$$

i el nou balanç de matèria es pot escriure de la següent forma:

$$(C \cdot v_{fx})_1 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z + (C \cdot v_{fy})_1 \cdot \Delta_x \cdot \Delta_z + (C \cdot v_{fz})_1 \cdot \Delta_x \cdot \Delta_y = (C \cdot v_{fx})_2 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z + (C \cdot v_{fy})_2 \cdot \Delta_x \cdot \Delta_z + (C \cdot v_{fz})_2 \cdot \Delta_x \cdot \Delta_y + \frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta V \quad [\text{eq. 24}]$$

Quedant simplificat de la següent forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(C \cdot v_{fx})}{\partial x} + \frac{\partial(C \cdot v_{fy})}{\partial y} + \frac{\partial(C \cdot v_{fz})}{\partial z} \quad [\text{eq. 25}]$$

on l'expressió obtinguda rep el nom de *Equació de continuïtat de matèria total*.

Com que $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ és l'operador matemàtic nabra (∇) podem reescriure l'expressió de la següent forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (\nabla \cdot C \cdot v_f) \quad [\text{eq. 26}]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = C \cdot \frac{\partial v_{fx}}{\partial x} + C \cdot \frac{\partial v_{fy}}{\partial y} + C \cdot \frac{\partial v_{fz}}{\partial z} + v_{fx} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + v_{fy} \cdot \frac{\partial C}{\partial y} + v_{fz} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \quad [\text{eq. 27}]$$

Partint del cas anterior, si la substància que entra al sistema, per reacció d'altres components, produeix una generació en aquest volum, el balanç es pot expressar de la següent forma (Vegeu Figura 8):

$$ENTRADA + GENERACIÓ = SORTIDA + ACUMULACIÓ \quad [\text{eq. 28}]$$

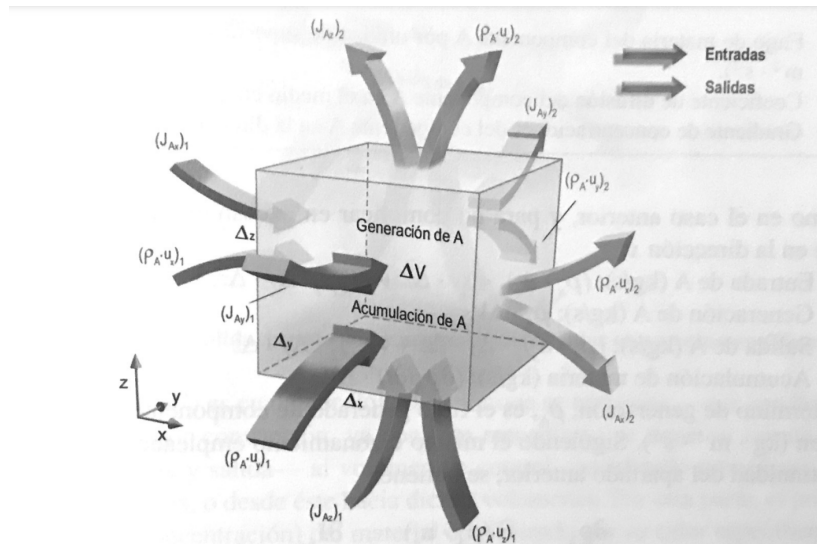


Figura 8. Entrada, generació, sortida i acumulació de matèria en el ΔV d'estudi [16]

Considerant el flux per difusió produït a causa de la diferència de concentracions i aplicant la primera llei de Fick les components dels balanços són les següents:

Tenint en compte només la direcció x:

$$\text{Flux entrada} = (C \cdot v_{fx})_1 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z \cdot (J_x)_1 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z$$

$$\text{Generació} = \dot{C} \cdot \Delta_z$$

$$\text{Flux sortida} = (C \cdot v_{fx})_2 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z \cdot (J_x)_2 \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z$$

$$\text{Acumulació} = \frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta V$$

on \dot{C} és el flux de generació [$\text{Kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$], obtenint:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(C \cdot v_{fx})}{\partial x} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \dot{C} \quad [\text{eq. 29}]$$

Tenint en compte tot el diferencial de volum aquesta expressió s'expressa com:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(C \cdot v_{fx})}{\partial x} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial(C \cdot v_{fy})}{\partial y} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial(C \cdot v_{fz})}{\partial z} + \frac{\partial J_z}{\partial z} + \dot{C}$$

$$[\text{eq. 30}]$$

com també:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[v_{fx} \frac{\partial C}{\partial x} + v_{fy} \frac{\partial C}{\partial y} + v_{fz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \dot{C} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

[eq. 31]

A l'assignatura de Tecnologia del Medi Ambient i Sostenibilitat s'estudia aquest model de comportament d'un contaminant [eq. 31] aplicant les següents hipòtesis per tal per tal de simplificar-la i donant lloc a [eq. 32].

- Medi porós és homogeni.
- Aplicació de la llei de Darcy.
- El flux està descrit per una velocitat lineal mitjana constant que transporta els contaminants dissolts per advecció. Si l'advecció és l'únic mecanisme de transport, els soluts conservatius es mouran d'acord amb un flux pistó.
- Existeix un mecanisme addicional de barreja, dispersió, que és causada per les variacions de velocitat en cada canal de porus i entre canals. La dispersió és utilitzada per estimar el transport addicional causat per les variacions de velocitat de camp.
- No hi ha afecta de la generació.

Doncs l'equació queda:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[v_{fx} \frac{\partial C}{\partial x} + v_{fy} \frac{\partial C}{\partial y} + v_{fz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] = \frac{\partial C}{\partial t} \quad [\text{eq. 32}]$$

5.1 Model de transport 1-D

La solució analítica d'aquesta expressió [eq. 32], considerant l'efecte de la dispersió i difusió conjuntament és complexa, pel que es fa una primera aproximació, simplificant-ho a una dimensió. Obtenint la següent expressió:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_{fx} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad [\text{eq. 33}]$$

S'agafa com a referència d'estudi un canal considerant-lo com un tub ple de sorra i considerant un flux constant [28] (vegeu Figura 9).

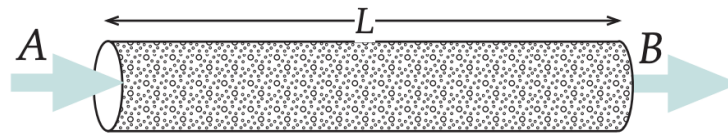


Figura 9. Tub ple de sorra, considerant flux constant [28]

Si es considera C_0 la concentració inicial i s'estudia la concentració al final d'aquest, s'arriba a les següents conclusions:

Si no existís difusió ni dispersió, el flux seguiria un moviment bàsic corresponent al d'un moviment rectilini uniforme, obtenint així doncs el temps de sortida com es veu a la Figura 10. Ara bé, traslladant aquesta situació a la realitat, degut a l'efecte de la dispersió hidrodinàmica, la sortida del fluid és gradual com mostra la Figura 11 .

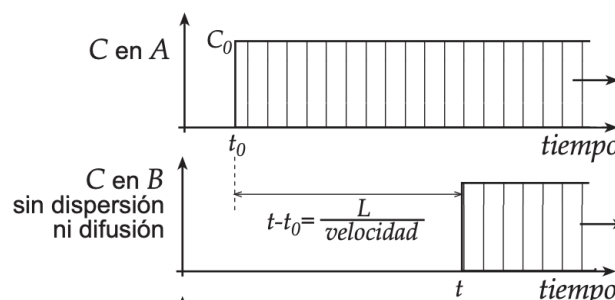


Figura 10. Concentració del contaminant d'un flux tenint en compte la variable temps [28]



Figura 11. Concentració del contaminant d'un flux tenint en compte la variable temps, considerant l'efecte de la dispersió i difusió [28]

Tenint en compte la variable temps i considerant l'efecte de la dispersió i difusió es pot calcular la concentració a una distància determinada transcorregut un temps determinat d'una font continua mitjançant la solució a l'equació [eq. 33] tal com Paladino *et al.* [24]:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) + \exp \left(\frac{v \cdot x}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) \right] \quad [\text{eq. 34}]$$

on:

- C_0 és la concentració inicial del contaminant
- $C(x, t)$ és la concentració a una distància x transcorregut un temps t
- erfc és la funció error complementària, tabulada
- D_L és la dispersió hidrodinàmica longitudinal
- v és la velocitat lineal mitjana

Si el temps, la velocitat o la distància són molt grans ($\frac{v \cdot x}{D_L} \leq 500$), aquesta equació es pot simplificar, resultant:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) \right] \quad [\text{eq. 35}]$$

Quan un contaminant es mou a través dels porus és gairebé inevitable que no interaccioni amb el medi. Aquest tipus de processos poden ser molt diversos, des de processos d'adsorció i absorció, fins a la biodegradació i reaccions químiques com podrien ser les d'oxidació-reducció, produint-se efectes de retard, de transformació o d'atenuació.

En la Figura 12 es pot veure representat el comportament d'un contaminant sota diferents condicions. Suposant un altre cop un canal com un tub ple de sorra i una injecció puntual, es pot observar com la sortida passa a ser gradual si es tenen en compte la dispersió i la difusió. En la següent, considerant un retard del contaminant, fent que aquest es desplaci més lentament. Per últim, suposant una atenuació, hi ha una disminució de la concentració de substància.

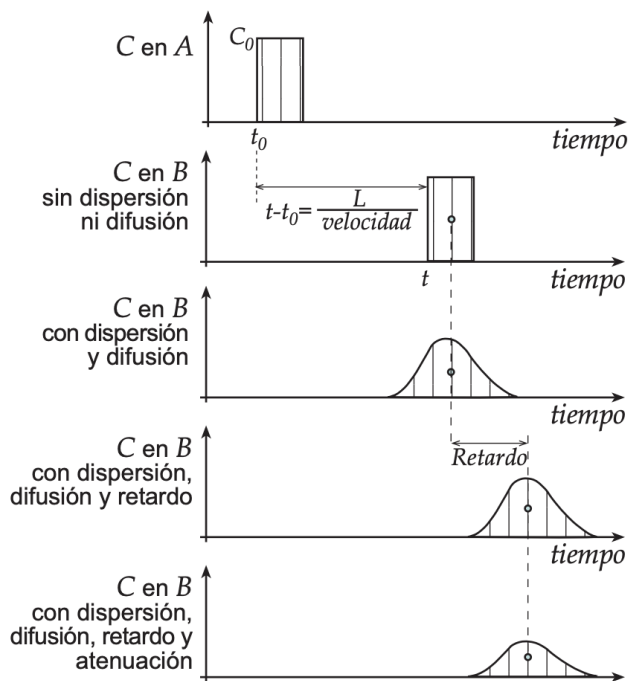


Figura 12: Comportament del contaminant al llarg del temps considerant diferents factors [28]

5.1.1. Efecte del retard o l'adsorció

Tal com s'ha esmentat prèviament, l'adsorció és un procés pel qual un contaminant queda retingut pel sòl. A nivell pràctic, aquest comportament afecta a l'equació 1-D [22] presentada anteriorment, quedant modificada de la següent forma:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{R_f \cdot x - v \cdot t}{2 \sqrt{R_f \cdot D \cdot t}} \right) + \exp \left(\frac{v \cdot x}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{R_f \cdot x + v \cdot t}{2 \sqrt{R_f \cdot D \cdot t}} \right) \right] \quad [\text{eq. 36}]$$

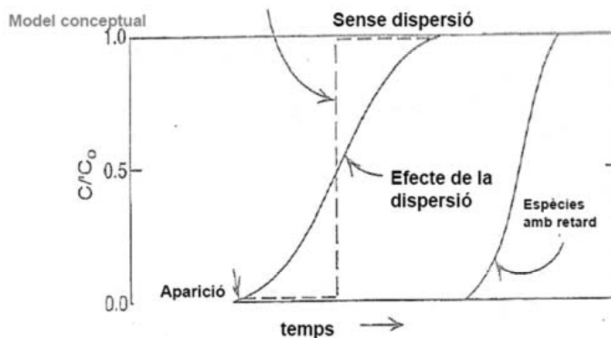


Figura 13. Comparació gràfica del comportament d'un contaminant sota l'efecte de la dispersió i el retard [17]

5.2. Model de transport 3-D

En els apartats anteriors s'ha donat una base teòrica de l'origen de l'equació [eq. 32] i les diferents hipòtesis i suposicions necessàries per arribar a aquesta. Si es vol estudiar una situació més realista s'ha de considerar un sistema en 3-D en lloc de la simplificació de la resolució del problema en 1D.

El cos i la finalitat del treball, consta doncs de trobar i estudiar una solució que permet fer un estudi en tres dimensions (3D), sense necessitat de simplificar [eq. 32].

6. Plantejament model de transport de contaminants en 3-D

Per estudiar un model més generalitzat, es presenten lleugeres modificacions en [eq. 32]. Tenint en compte el factor de degradació de primer ordre (λ) i el factor de retenció o retard R_f i que la velocitat del contaminant és unidireccional, el model en 3-D es pot expressar de la següent forma [24]:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_{fx} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t} \quad [\text{eq. 37}]$$

Els estudis [7], [20], [29] són exemples de les diferents solucions que s'han publicat els darrers anys. En aquest treball doncs, es fa un estudi de la solució presentada per diferents estudis, en especial [25].

Si en [eq. 37] es té en compte el factor R_f , l'expressió resultant és:

$$\frac{D_x}{R_f} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_y}{R_f} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{D_z}{R_f} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{v_{fx}}{R_f} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot C = \frac{\partial C}{\partial t} \quad [\text{eq. 38}]$$

Aquesta equació parteix de les següents condicions:

- Medi homogeni i porós.

- Velocitat constant existent només en una direcció, x.
- Domini en x i y infinit i finit en z.
- Font regular o irregular puntual, lineal, plana o volumètrica.

Cal remarcar que es considera només una direcció en la velocitat del contaminant. Això no implica el contaminant només es desplaça en una direcció, sinó que es pot aproximar a una velocitat unidireccional, mentre existeix l'efecte de la dispersió i difusió, a causa del qual el contaminant es veurà desplaçat en totes direccions.

També és important remarcar que el factor de degradació (λ) es considera de primer ordre al ser la velocitat de reacció, directament proporcional a la concentració del contaminant. Com que aquest treball es basa en la recopilació de diferents estudis, els quals tots coincideixen amb aquesta hipòtesi, no es considerarà en cap cas una reacció de segon ordre.

L'absència d'un estudi amb una reacció de segon ordre, probablement és causada pel fet que la velocitat de reacció seria proporcional al quadrat de la concentració del contaminant, donant lloc a una equació diferencial molt difícil de solucionar.

Sota les condicions citades és possible obtenir una solució utilitzant el Mètode de Funcions de Green (GFM) per a la resolució de les equacions diferencials (Vegeu Annex 1).

6.1. Condicions de contorn

Les condicions presentades a continuació són les diferents condicions de contorn utilitzades pels diferents casos particulars.

- $C(x, y, z, t)|_{t=0} = 0; \quad (1)$

- $C(x, y, z, t)|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0, t > 0; \quad (2)$

- $C(x, y, z, t)|_{y \rightarrow \pm\infty} = 0, t > 0; \quad (3)$

- La concentració de la font generadora r pot ser expressada com a condició de contorn [30];

$$\Rightarrow C(x, y, z, t)|_{x=0} = \{C_0 f(t) \text{ si } y, z \in \text{font}, t > 0; 0 \text{ altrament}\} \quad (4)$$

i $f(t)$ és una funció temporal adimensional.

- $C(x, y, z, t)|_{z \rightarrow \pm\infty} = 0, t > 0; \quad (5)$

- $C(x, y, z, t)|_{z=0} = \{C_0 f(t) \text{ si } x, y \in \text{font}, t > 0; 0 \text{ altrament}\}; \quad (6)$

i $f(t)$ és una funció temporal adimensional.

- $\frac{\partial C}{\partial z}|_{z=0} = \frac{\partial C}{\partial z}|_{z=b} = 0, -\infty < x, y < \infty, t > 0 \quad [30] \quad (7)$

6.2. Font generadora

La font generadora es pot expressar com una funció temporal:

$$r = \{r_0 f(t) \text{ si } 0 < x < x_0, y_1 < y < y_2, z_1 < z < z_2; 0 \text{ altrament}\} \quad [\text{eq. 39}]$$

on r és una funció dels eixos x, y, z i pot ser lineal o no lineal en el temps, r_0 és la massa inicial alliberada per la font per unitat de temps i $f(t)$ és una funció adimensional [25].

7. Resolució model de transport de contaminants en 3-D amb reacció química i frenat

La resolució del model de transport en 3-D recopila les solucions proposades en diferents estudis basats en les mateixes condicions de contorn i dominis d'estudi (x, y i z) [7], [20], in [29]. Així doncs, en tot moment es considera un domini infinit en les direccions x i y , mentre que el domini z és finit. Coherent amb les condicions d'un aquífer real, el qual té un domini z limitat, a causa del nivell de la capa freàtica i dominis en x i y molt grans, considerant-los infinits.

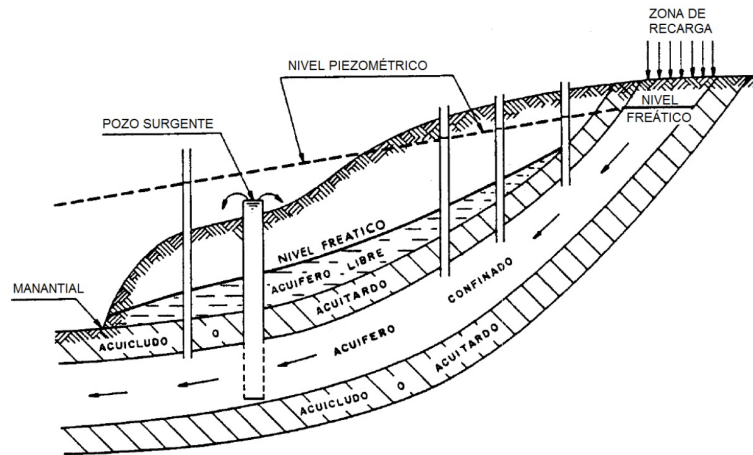


Figura 14. Esquema d'un aqüífer subterrani [4]

En els apartats anteriors s'ha presentat la font de contaminació de dues formes diferents, per una part com a condició de contorn (Vegeu punt 6.1, condició (4)) o com una funció temporal [eq. 39].

D'aquesta forma, considerant aquestes dues possibilitats es presentaran diverses solucions per cada un dels casos.

7.1. Cas font generadora (r) com a condició de contorn

En aquest apartat es considera la font de contaminació com a condició de contorn.

7.1.1. Cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn

Al tractar la font generadora com a condició de contorn (4), la solució de l'equació diferencial canvia. L'equació [eq. 38] es pot escriure com un operador lineal de la massa inicial alliberada per la font per unitat de temps i $f(t)$ és una funció adimensional [25]:

$$L [C (x , y , z , t)] = 0 \quad [\text{eq. 40}]$$

S'apliquen les condicions de contorn (1), (2), (3), (4), (5 o 7) on s'inclou la font generadora, sent C_0 la concentració de la font i seguint els límits establerts per (1). Sabent que una funció de Green qualsevol:

$$G(x, y) \sim L^{-1} i u(x) = \int G(x, y) f(y) dy \quad [\text{eq. 41}]$$

(Vegeu Annex 1)

i utilitzant novament les funcions de Green [21], [26], es pot expressar la solució com [31]:

$$C = C_0 \int_0^t \exp(-\lambda \cdot t') \cdot G_x(x, t') \cdot G_y(y, t') \cdot G_z(z, t') \frac{dt'}{t'} \quad [\text{eq. 42}]$$

on les funcions $G_x(x, t')$, $G_y(y, t')$ i $G_z(z, t')$ són les funcions de Green i s'expressen com [31]:

$$G_x(x, t') = \frac{x}{2\sqrt{\pi \cdot D_x \cdot t'}} \exp\left[-\frac{(x-v \cdot t')^2}{4 \cdot D_x \cdot t'}\right] \quad [\text{eq. 43}]$$

$$G_y(y, t') = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) \right] \quad [\text{eq. 44}]$$

$$G_z(z, t') = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z-z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z+z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) \right] \quad [\text{eq. 45}]$$

Podent-se expressar de la següent forma [32]:

$$C = \frac{C_0 \cdot x'}{8\sqrt{\pi \cdot D_x}} \int_0^t \exp\left[-\lambda \cdot t' - \frac{(x'-v \cdot t')^2}{4 \cdot D_x \cdot t'}\right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z-z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z+z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) \right] \cdot \frac{dt'}{\sqrt{t'^3}} \quad [\text{eq. 46}]$$

on $t' = t - t_0$ i $x' = x - x_0$ i els punts x', y', z' són les coordenades on el contaminant és alliberat en l'instant t' ; x_0, y_0 i z_0 són les respectives coordenades mitjanes del domini de la font. S'observa que l'expressió [eq. 46] compleix la condició de contorn (1), doncs és vàlida per $x' > 0$.

De totes formes [eq. 46] no es pot resoldre analíticament. D'aquesta forma la solució d'aquesta integral és una aproximació que perd en precisió i permet només obtenir un valor aproximat.

$$C = \frac{C_0}{8} \cdot \left\{ \exp\left[\frac{(v-u) \cdot x'}{2 \cdot D_x}\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x' - u \cdot t}{2 \sqrt{D_x \cdot t}}\right) + \exp\left[\frac{(v+u) \cdot x'}{2 \cdot D_x}\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x' + u \cdot t}{2 \sqrt{D_x \cdot t}}\right) \right\}$$

$$\cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - y_0}{2 \sqrt{D_y \cdot t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y + y_0}{2 \sqrt{D_y \cdot t_m}}\right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z - z_0}{2 \sqrt{D_z \cdot t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z + z_0}{2 \sqrt{D_z \cdot t_m}}\right) \right]$$

[eq. 47]

on $u = \sqrt{v^2 + 4 \cdot \lambda \cdot D_x}$, $t_m = x/v$.

Tot i no estar inclosa en aquest estudi, existeix una solució proposada per Wang et al. [30] que consisteix en discretitzar l'interval temporal en N passos i en aproximar el valor del producte entre $G_y(y, t')$ i $G_z(z, t')$ a un valor mitjà [33].

7.1.1.1. Cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn afectat pel retard

Tal com s'ha esmentat prèviament, el retard per adsorció és un procés pel qual un contaminant queda retingut pel sòl. A nivell pràctic, aquest comportament afecte a l'equació lleugerament, quedant modificada de la següent forma:

$$C = \frac{C_0}{8} \cdot \left\{ \exp\left[\frac{\left(\frac{v}{R_f} - u\right) \cdot x'}{2 \cdot \frac{D_x}{R_f}}\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x' - u \cdot t}{2 \sqrt{\frac{D_x}{R_f} \cdot t}}\right) + \exp\left[\frac{\left(\frac{v}{R_f} + u\right) \cdot x'}{2 \cdot \frac{D_x}{R_f}}\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x' + u \cdot t}{2 \sqrt{\frac{D_x}{R_f} \cdot t}}\right) \right\}$$

$$\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f}t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f}t_m}}\right) \right] \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z-z_0}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f}t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z+z_0}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f}t_m}}\right) \right]$$

[eq. 48]

$$\text{on } u = \sqrt{\left(\frac{v}{R_f}\right)^2 + 4\lambda\frac{D_x}{R_f}}, t_m = xR_f/v$$

7.2. Cas font generadora (r) com a funció temporal

En aquest apartat es considera la font de contaminació com una funció temporal.

7.2.1. Font generadora (r) puntual instantània

S'escriu [eq. 38] com a operador lineal (Vegeu Annex 1) i s'obté:

$$L[C(x, y, z, t)] = r \quad [\text{eq. 49}]$$

Es consideren les condicions de contorn (2), (3), (5 o 7) i que el principi de superposició permet expressar les funcions de Green com la suma d'una solució fonamental i causal [25]. Es pot solucionar [eq. 38] sota condicions de contorn homogènies amb una font de generació, r , de la següent manera:

$$r = r_0 \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \delta(t - t_0) \quad [\text{eq. 50}]$$

Seguint la metodologia de les funcions de Green (Vegeu Annex 1) es pot expressar l'operador lineal de la següent forma:

$$L(C) = r_0 \cdot \delta(x - x', y - y', z - z', t - t') \quad [\text{eq. 51}]$$

on la funció de Green corresponent és:

$$L^*(G) = \delta(x - x', y - y', z - z', t - t') \quad [\text{eq. 52}]$$

Tal com mostra l'exemple de l'Annex 1, $L^*(G)$ correspondria doncs a:

$$L^*(G) = - \frac{\partial G}{\partial t'} - D_x \frac{\partial^2 G}{\partial x'^2} - v \frac{\partial G}{\partial x'} - D_y \frac{\partial^2 G}{\partial y'^2} - D_z \frac{\partial^2 G}{\partial z'^2} + \lambda G \quad [\text{eq. 53}]$$

on:

- G és la funció de Green
- r_0 és la massa alliberada instantàniament en els punts x', y', z' en l'instant t'
- δ és la delta de Dirac

Sabent que una funció de Green qualsevol:

$$G(x, y) \sim L^{-1} \quad [\text{eq. 54}]$$

i

$$u(x) = \int G(x, y) f(y) dy \quad [\text{eq. 55}]$$

(Vegeu Annex 2)

es pot solucionar [eq. 53] aplicant el mateix procediment que [eq. 42], obtenint:

$$C(x, y, z, t) = \frac{r_0}{8\sqrt{\pi^3 \cdot D_x \cdot D_y \cdot D_z \cdot (t-t')^3}} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t - t')] \cdot \exp\left\{-\frac{[(x-x') - v(t-t')]^2}{4 \cdot D_x \cdot (t-t')}\right\} \\ \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4 \cdot D_y \cdot (t-t')}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4 \cdot D_z \cdot (t-t')}\right\} \quad [\text{eq. 56}]$$

7.2.1.1. Font generadora (r) puntual instantània afectada pel retard

Aplicant el factor de retard l'equació resultant és la següent:

$$C(x, y, z, t) = \frac{r_0}{8\sqrt{\pi^3 \cdot \frac{D_x}{R_f} \cdot \frac{D_y}{R_f} \cdot \frac{D_z}{R_f} \cdot (t-t')^3}} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t - t')] \cdot \exp\left\{-\frac{[(x-x') - \frac{v}{R_f}(t-t')]^2}{4 \cdot \frac{D_x}{R_f} \cdot (t-t')}\right\} \\ \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4 \cdot \frac{D_y}{R_f} \cdot (t-t')}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4 \cdot \frac{D_z}{R_f} \cdot (t-t')}\right\} \quad [\text{eq. 57}]$$

7.2.2. Font generadora (r) volumètrica instantània

A partir de la solució per una font puntual [eq. 55], és possible obtenir la solució per una font volumètrica. En aquest cas la solució analítica depèn fortament del domini a estudiar i de les condicions de la font generadora. Com que la font volumètrica no és estrictament igual en tota situació donada, es suposa un volum en forma de paral·lelepípede. Variant aquestes condicions és possible obtenir un seguit de solucions adaptades a cada situació en particular, recopilades per Wang et al. [31].

Tanmateix, partint d'una geometria paral·lelepípede les dimensions de la font generadora són les següents:

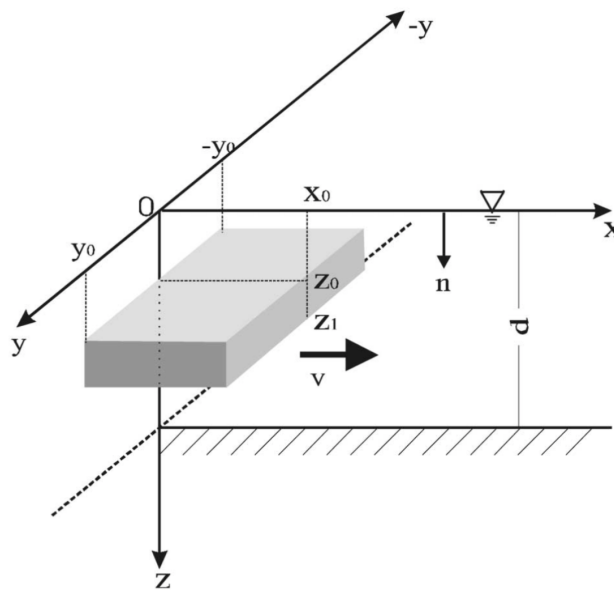


Figura 15. Font generadora volumètrica [26]

on $x \in [0, x_0]$, $y \in [-y_0, y_0]$ i $z \in [z_0, z_1]$.

Aleshores l'equació a resoldre passa a ser la següent:

$$C(x, y, z, t) = \frac{r_0}{8\sqrt{\pi^3 \cdot D_x \cdot D_y \cdot D_z} \cdot (t-t')^3} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t-t')] \cdot \int_0^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \int_{z_0}^{z_1} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-v(t-t')]^2}{4 \cdot D_x \cdot (t-t')}\right\} \\ \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4 \cdot D_y \cdot (t-t')}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4 \cdot D_z \cdot (t-t')}\right\} \cdot dx' \cdot dy' \cdot dz'$$

[eq. 58]

on r_0 és la massa volumètrica alliberada instantàniament a l'instant t' .

La solució a aquesta integral [30] permet obtenir l'equació davant una font generadora volumètrica instantània:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t - t')] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v(t-t') - x_0}{2\sqrt{D_x(t-t')}} \right) \right. \\
 & - \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v(t-t')}{2\sqrt{D_x(t-t')}} \right) \left. \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y(t-t')}} \right) \right] \\
 & \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z + z_0}{2\sqrt{D_z(t-t')}} \right) \right] \quad [\text{eq.59}]
 \end{aligned}$$

7.2.2.1. Font generadora (r) volumètrica instantània afectada pel retard

Aplicant el factor de retard, l'equació resultant és la següent:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t - t')] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{v}{R_f}(t-t') - x_0}{2\sqrt{\frac{D_x}{R_f}(t-t')}} \right) \right. \\
 & - \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{v}{R_f}(t-t')}{2\sqrt{\frac{D_x}{R_f}(t-t')}} \right) \left. \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f}(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f}(t-t')}} \right) \right] \\
 & \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f}(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z + z_0}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f}(t-t')}} \right) \right] \quad [\text{eq. 60}]
 \end{aligned}$$

7.2.3. Font generadora (r) volumètrica contínua

De la mateixa manera, utilitzant les GFM i utilitzant el mètode de principi de superposició existeix una solució davant una font generadora volumètrica contínua [31]. Aquesta es basa en integrar analíticament respecte al temps el cas d'alliberació instantània. D'aquesta forma donada [eq. 61] que es pot trobar resolta a Wang and Wu et al. [30]:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8} \cdot \int_0^t f(t - t') \exp[-\lambda \cdot t'] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt' - x_0}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right. \\
 & - \left. \operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt'}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) \right] \\
 & \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_1}{2\sqrt{D_z t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z t'}} \right) \right] \quad [\text{eq. 61}]
 \end{aligned}$$

Considerant una font generadora r volumètrica contínua en forma de paral·lelepípede, la solució és la següent [31]:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{1}{8} \cdot \int_0^t r(t - t') \exp[-\lambda \cdot t'] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt' - x_0}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right. \\
 & - \left. \operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt'}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) \right] \\
 & \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_1}{2\sqrt{D_z t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z t'}} \right) \right] \cdot dt' \quad [\text{eq. 62}]
 \end{aligned}$$

7.2.3.1. Font generadora (r) volumètrica contínua afectada pel retard

Aplicant el factor de retard, l'equació resultant és la següent:

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) = & \frac{1}{8} \cdot \int_0^t r(t - t') \exp[-\lambda \cdot t'] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{v}{R_f} t' - x_0}{2\sqrt{\frac{D_x}{R_f} t'}} \right) \right. \\
 & - \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{v}{R_f} t'}{2\sqrt{\frac{D_x}{R_f} t'}} \right) \left. \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f} t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f} t'}} \right) \right] \\
 & \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_1}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f} t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{\frac{D_z}{R_f} t'}} \right) \right] \cdot dt' \quad [\text{eq. 63}]
 \end{aligned}$$

8. Resolució model de transport de contaminants en 3-D sense reacció química i sense frenat

La font de contaminació es pot considerar de dues formes diferents: com a condició de contorn i com a funció temporal. En aquest cas, donats aquests dos casos, les solucions presentades no inclouen l'efecte de reaccions químiques ni l'efecte del retard o adsorció.

El procés de resolució d'aquest cas particular no s'especifica extensament doncs, és el mateix al vist als apartats anteriors, tenint en compte que no existeix frenat o retard i que el factor de degradació de primer ordre (λ) associat a la reacció química és nul, $\lambda = 0$.

8.1. Cas font generadora (r) com a condició de contorn

En aquest apartat es considera la font de contaminació com a condició de contorn.

8.1.1. Cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn

Seguint els mateixos passos que en l'apartat 7 equivalent i utilitzant novament les funcions de Green [21], [26] es pot expressar la solució com [31]:

$$C = C_0 \int_0^t G_x(x, t') \cdot G_y(y, t') \cdot G_z(z, t') \frac{dt'}{t'} \quad [\text{eq. 64}]$$

on les funcions $G_x(x, t')$, $G_y(y, t')$ i $G_z(z, t')$ són les funcions de Green igual que en [eq. 43], [eq. 44] i [eq. 45].

Per tan, C es pot expressar com:

$$C = \frac{C_0 \cdot x'}{8\sqrt{\pi \cdot D_x}} \int_0^t \exp\left[-\frac{(x' - v \cdot t')^2}{4 \cdot D_x \cdot t'}\right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t'}}\right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z + z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t'}}\right) \right] \cdot \frac{dt'}{\sqrt{t'^3}} \quad [\text{eq. 65}]$$

i integrant s'obté:

$$C = \frac{C_0}{8} \cdot \left\{ \operatorname{erfc}\left(\frac{x' - v \cdot t}{2\sqrt{D_x \cdot t}}\right) + \exp\left[\frac{v \cdot x'}{D_x}\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x' + v \cdot t}{2\sqrt{D_x \cdot t}}\right) \right\} \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y \cdot t_m}}\right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z + z_0}{2\sqrt{D_z \cdot t_m}}\right) \right] \quad [\text{eq. 66}]$$

8.2 Cas font generadora (r)

En aquest apartat es considera la font de contaminació com a funció temporal.

8.2.1. Font generadora (r) puntual instantània

Aplicant el mateix procediment que a l'apartat equivalent 7.2.1, s'obté:

$$C(x, y, z, t) = \frac{r_0}{8\sqrt{\pi^3 \cdot D_x \cdot D_y \cdot D_z} \cdot (t-t')^3} \cdot \exp\left\{-\frac{[(x-x')-v(t-t')]^2}{4 \cdot D_x \cdot (t-t')}\right\} \\ \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4 \cdot D_y \cdot (t-t')}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4 \cdot D_z \cdot (t-t')}\right\} \quad [\text{eq. 67}]$$

8.2.2. Font generadora (r) volumètrica instantània

Disposant de la solució per una font puntual [eq. 67], és possible obtenir la solució per una font volumètrica. Es suposa un volum en forma de paral·lelepípede, en un domini d'estudi infinitament llarg i ample [31]. De manera que $x \in [0, x_0]$, $y \in [-y_0, y_0]$ i $z \in [z_0, z_1]$.

Aleshores, l'equació passa a ser la següent:

$$C(x, y, z, t) = \frac{r_0}{8\sqrt{\pi^3 \cdot D_x \cdot D_y \cdot D_z} \cdot (t-t')^3} \cdot \int_0^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \int_{z_0}^{z_1} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-v(t-t')]^2}{4 \cdot D_x \cdot (t-t')}\right\} \\ \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4 \cdot D_y \cdot (t-t')}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4 \cdot D_z \cdot (t-t')}\right\} \cdot dx' \cdot dy' \cdot dz'$$

[eq. 68]

on M_v és la massa volumètrica alliberada instantàniament a l'instant t' .

La solució a aquesta integral permet obtenir l'equació davant una font generadora volumètrica instantània:

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8} \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v(t-t') - x_0}{2\sqrt{D_x(t-t')}} \right) \right. \\
& - \left. \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v(t-t')}{2\sqrt{D_x(t-t')}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y(t-t')}} \right) \right] \\
& \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z(t-t')}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z + z_0}{2\sqrt{D_z(t-t')}} \right) \right]
\end{aligned}$$

[eq. 69]

8.2.3. Font generadora (r) volumètrica contínua

Repetint el mateix procediment que en l'apartat 7.2.3., utilitzant les GFM i utilitzant el mètode de principi de superposició, es pot trobar una solució davant una font generadora volumètrica contínua. D'aquesta forma donada la següent expressió:

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8} \cdot \int_0^t f(t-t') \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt' - x_0}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right. \\
& - \left. \operatorname{erfc} \left(\frac{x - vt'}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y - y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) \right] \\
& \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_1}{2\sqrt{D_z t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{D_z t'}} \right) \right]
\end{aligned} \quad [\text{eq. 70}]$$

i seguint el mateix procediment al respectiu punt 7., s'obté:

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{1}{8} \cdot \int_0^t r(t-t') \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x-vt'-x_0}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right. \\
& - \left. \operatorname{erfc} \left(\frac{x-vt'}{2\sqrt{D_x t'}} \right) \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{y-y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y+y_0}{2\sqrt{D_y t'}} \right) \right] \\
& \cdot \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z-z_1}{2\sqrt{D_z t'}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z-z_0}{2\sqrt{D_z t'}} \right) \right] \cdot dt' \quad [\text{eq. 71}]
\end{aligned}$$

9. Resolució model de transport de contaminants en 3-D tenint en compte la porositat

Fins ara no s'ha fet referència a com afecta la porositat al model de transport. Si es desitja incloure aquest factor (n) a qualsevol equació obtinguda, al tractar-se d'una constant, s'inclouria tal com diu Want et al. [31] en el denominador com una constant, de manera que la solució es veu afectada com el següent exemple:

$$L[C(x, y, z, t)] = r/n \quad [\text{eq. 72}]$$

Seguint els passos [eq. 50 - eq. 55] s'obté la següent solució:

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{r_0}{8 \cdot n \cdot \sqrt{\pi^3 \cdot D_x \cdot D_y \cdot D_z \cdot (t-t')^3}} \cdot \exp[-\lambda \cdot (t-t')] \cdot \exp \left\{ -\frac{[(x-x')-v(t-t')]^2}{4 \cdot D_x \cdot (t-t')} \right\} \\
& \exp \left\{ -\frac{(y-y')^2}{4 \cdot D_y \cdot (t-t')} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{(z-z')^2}{4 \cdot D_z \cdot (t-t')} \right\} \quad [\text{eq. 73}]
\end{aligned}$$

D'aquesta forma la concentració del contaminant en un determinat punt i temps es veurà lleugerament afectat per la porositat de l'aqüífer al què es troba.

10. Representació gràfica del model de transport de contaminants en 3-D

Un cop trobades les solucions dels diferents casos exposats és possible graficar-les. Al tractar-se d'equacions on intervenen quatre variables (x, y, z i $C(x, y, z)$), per tal de representar-ho en dues dimensions és necessari fixar-ne dues d'elles. Es fixa el valor de la variable z de manera que els gràfics obtinguts representaran el comportament en el pla $z = 0$. També es fixa el valor de la concentració (C), imposant diferents valors per tal d'obtenir corbes de nivell per diferents graus de concentració. D'aquesta forma per poder graficar correctament les expressions és necessari aïllar la variable y en funció de x ($y(x)$).

Es representen [eq. 48], [eq. 57] i [eq. 60]. D'aquests casos deriven els casos particular on no es considera el factor de retard. També es representen els casos on no es considera retard ni tampoc degradació química [eq. 66], [eq. 67] i [eq. 69], amb la finalitat de visualitzar com afecten aquests paràmetres al comportament del contaminant.

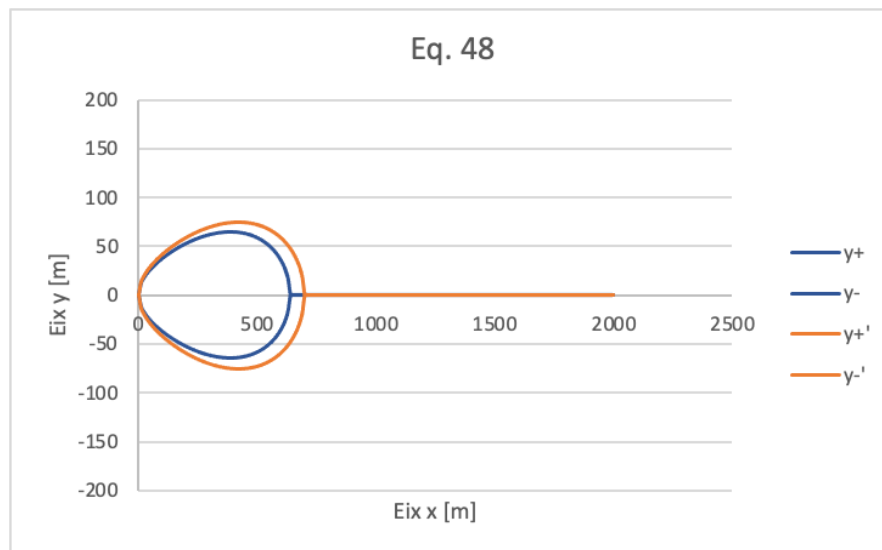
10.1. Representació gràfica cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn

Per representar [eq. 48] com ja s'ha dit prèviament s'han fixat les variables z i $C(x, y, z)$ per tal d'obtenir corbes de nivell que representin el comportament en 2-D del contaminant en funció de x i y . Per tal de poder aïllar la variable y és necessari fer una aproximació de la funció error complementària tal que:

$$\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - y_0}{2 \cdot \sqrt{\frac{D_y}{R_f} \cdot t_m}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y + y_0}{2 \cdot \sqrt{\frac{D_y}{R_f} \cdot t_m}}\right) \right] \approx \frac{4 \cdot y_0}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{2 \cdot D_y \cdot t_m}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{y^2}{2 \cdot D_y \cdot t_m}\right) \quad [\text{eq. 74}]$$

Aleshores utilitzant [eq. 48] i l'aproximació [eq. 74] és possible aïllar la variable y .

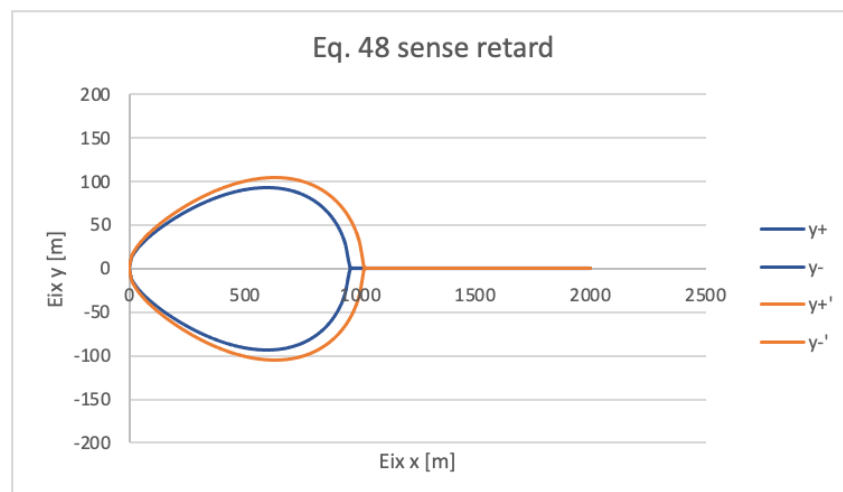
Finalment, per obtenir el gràfic desitjat es fixen els paràmetres de l'expressió obtenint finalment $y(x)$. De tal manera que el model queda representat de la següent forma:



Gràfic 1. Representació [eq. 48] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

En el Gràfic 1 es pot observar com en el pla $z = 0$ el contaminant es distribueix en el domini $x - y$. Les corbes de color blau i taronja representen respectivament les corbes de nivell a diferents concentracions, de manera que com més petita sigui la corba més gran és la seva concentració, ja que, com més a prop de l'origen de la font s'estigui, més contaminant hi haurà. Mitjançant el gràfic es pot justificar que efectivament la direcció on més es dispersa és x , coincidint amb la direcció de la velocitat del fluid. També es pot observar com clarament existeix una dispersió en l'eix y malgrat saber que la velocitat es pot aproximar a una velocitat unidireccional.

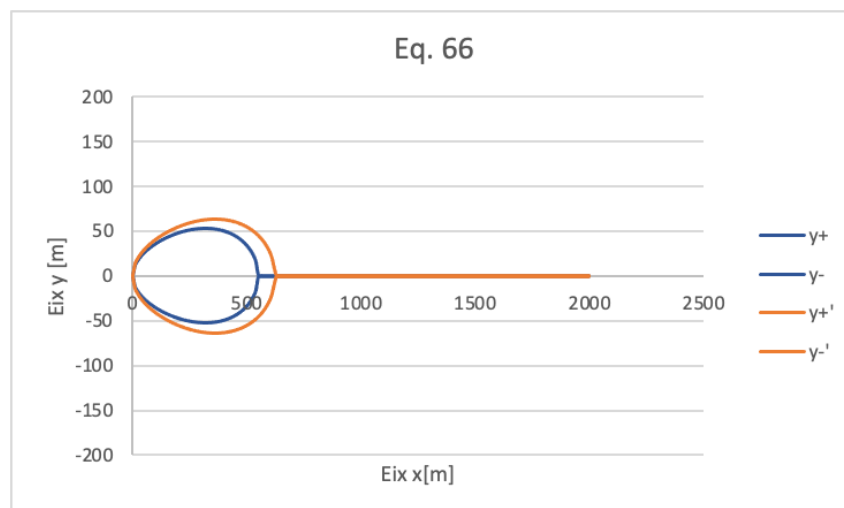
Considerant el mateix cas amb les mateixes condicions però sense considerar el coeficient de retard es pot observar un canvi en el comportament, resultant el següent gràfic:



Gràfic 2. Representació [eq. 48] sense retard amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Es pot observar clarament com les corbes de nivell d'aquest model tenen una forma més allargada i ample. Això és degut a que el contaminant no es veu retingut durant el seu desplaçament, de manera que avança més fàcilment pel medi escampant-se més en totes les direccions.

Finalment si es considera el cas de [eq. 66] on no es té en compte el retard ni tampoc la degradació química es pot observar un canvi en el comportament, resultant el següent gràfic:



Gràfic 3. Representació [eq. 66] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

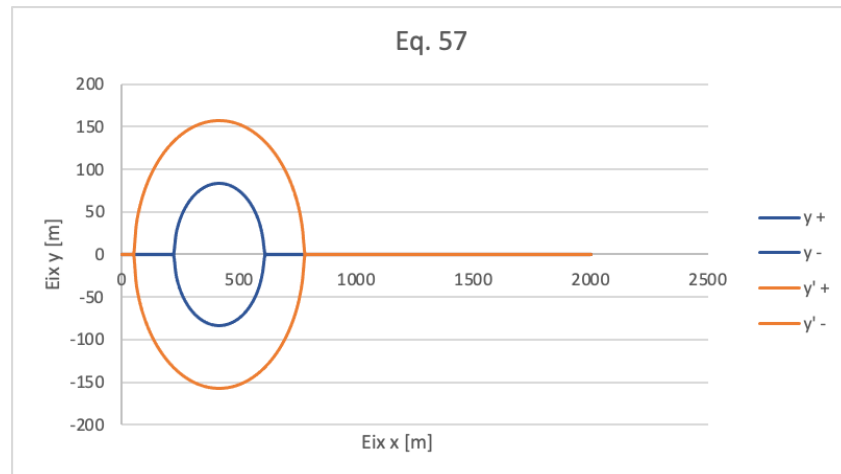
La representació gràfica de [eq. 66] presenta un comportament on el contaminant s'ha repartit menys que als casos anteriors. Això implica que els resultats són contradictoris respecte al comportament real que hauria de tenir ja que, teòricament el contaminant s'hauria de repartir per dominis majors.

10.2. Representació gràfica cas font generadora com a funció temporal (r) puntual instantània

Per representar [eq. 57] s'han tornat a fixar les variables z i $C(x, y, z)$ per tal d'obtenir corbes de nivell que representin el comportament en 2-D del contaminant en funció de x i y .

En aquest cas, com l'equació [eq. 57] està formada per funcions exponencials, no és necessari aplicar cap aproximació i es pot aïllar fàcilment la variable y .

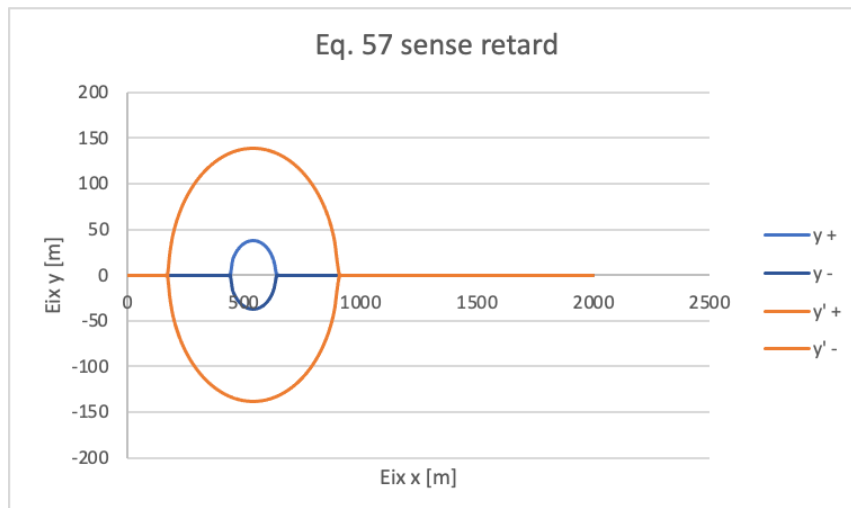
Per obtenir el gràfic desitjat es fixen els paràmetres de l'expressió obtenint la funció $y(x)$. De tal manera que el model queda representat de la següent forma:



Gràfic 4. Representació [eq. 57] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

En el Gràfic 4 es pot observar com en el pla $z = 0$ el contaminant es distribueix en el domini $x - y$. Igual que en el cas anterior les corbes de color blau i taronja representen respectivament les corbes de nivell a diferents concentracions. De nou, mitjançant el gràfic es pot justificar un altre cop que efectivament la direcció on més es dispersa és x , coincidint amb la direcció de la velocitat del fluid. També es pot observar com clarament existeix una dispersió en l'eix y malgrat saber que la velocitat es pot aproximar a una velocitat unidireccional.

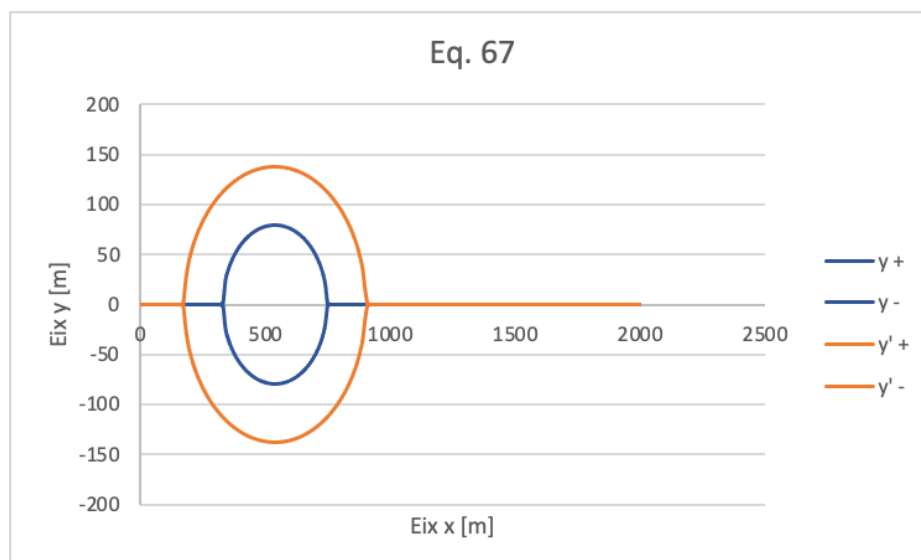
Considerant el mateix model, sense considerar que existeix retard s'obté el següent gràfic:



Gràfic 5. Representació [eq. 57] sense retard amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

En aquest cas es pot observar com el contaminant al no veure's frenat, a una determinada distància x igual al cas anterior, presenta corbes de nivell més petites. Com el contaminant s'ha desplaçat més, també s'haurà dispersat més i, en conseqüència, les corbes de nivell són més petites.

Finalment si es considera el cas [eq. 67] on no es té en compte el retard ni tampoc la degradació química el gràfic resultant és el següent:



Gràfic 6. Representació [eq. 67] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Aquest cas, on no es considera degradació química torna a ser contradictori davant el comportament real que hauria de tenir ja que teòricament el contaminant s'hauria de repartir per dominis majors, ja que al no desaparèixer per reacció química ni tampoc ser retingut, aquest s'hauria de dispersar-se més fàcilment.

10.3. Representació gràfica cas font generadora com a funció temporal (r) volumètrica instantània

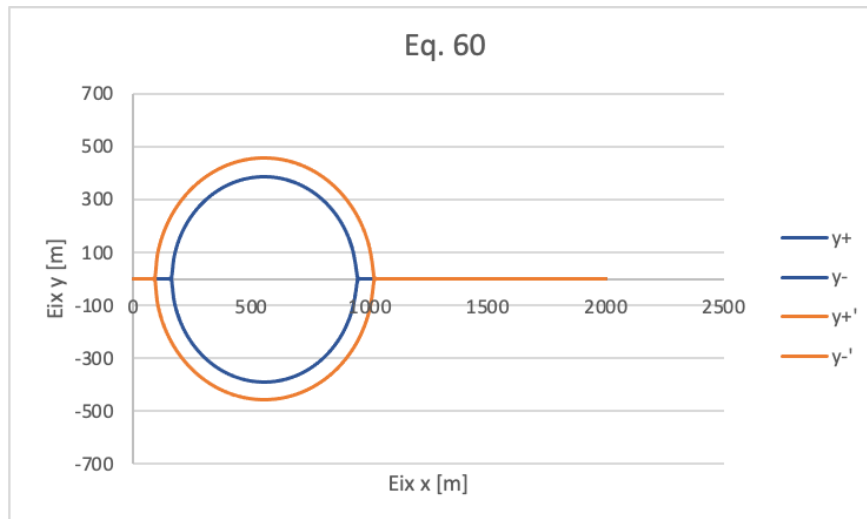
Per representar el comportament de [eq. 60] corresponent a una font volumètrica instantània que considera la font generadora com a font temporal, s'utilitza el mateix procediment que a l'apartat 10.1. Per tant, per tal de poder aïllar la variable y és necessari fer una aproximació de la funció error complementària tal que:

$$\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f} \cdot (t-t')}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+y_0}{2\sqrt{\frac{D_y}{R_f} \cdot (t-t')}}\right) \right] \approx \frac{4 \cdot y_0}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{2 \cdot D_y \cdot (t-t')}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{y^2}{2 \cdot D_y \cdot (t-t')}\right)$$

[eq. 75]

Aleshores utilitzant [eq. 60] i l'aproximació [eq. 75] és possible aïllar la variable y .

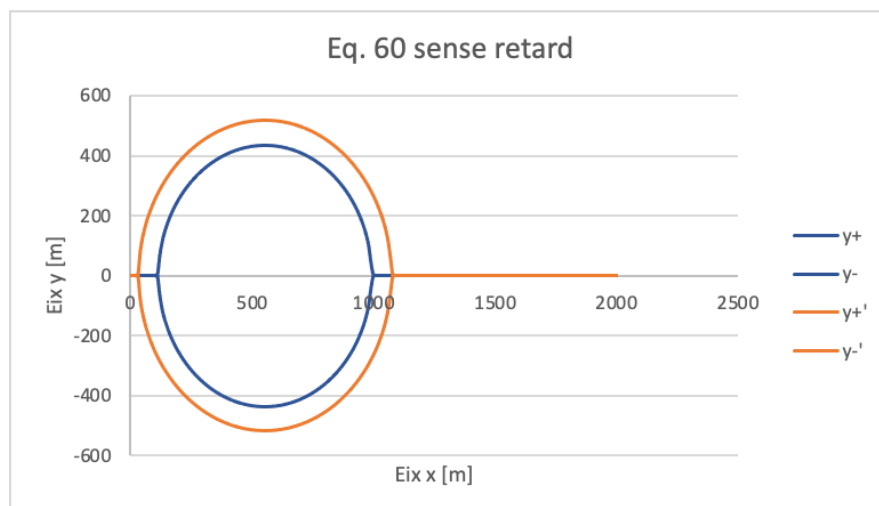
Finalment per obtenir el gràfic desitjat es fixen els paràmetres de l'expressió obtenint finalment $y(x)$. De tal manera que el model queda representat de la següent forma:



Gràfic 7. Representació [eq. 60] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

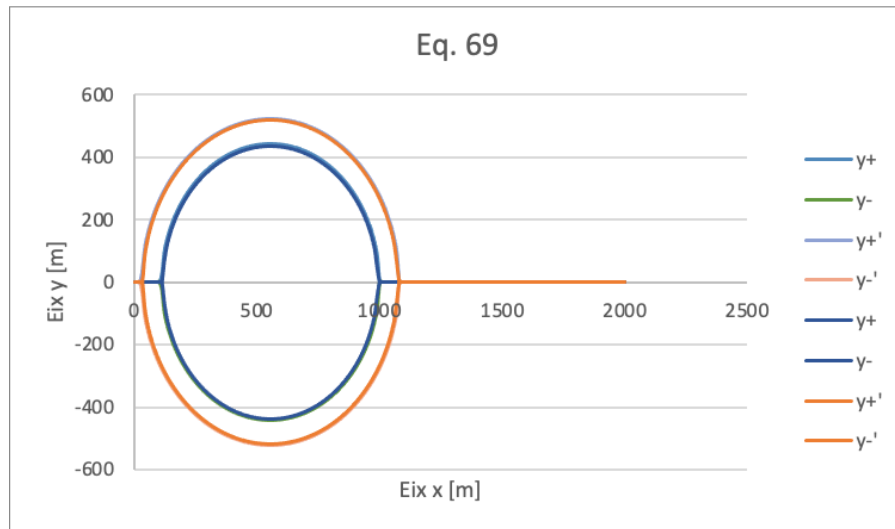
A partir d'aquest gràfic es pot observar que la direcció on més es dispersa és x , coincidint amb la direcció de la velocitat del fluid. També es pot observar com clarament existeix una dispersió en l'eix y malgrat saber que la velocitat es pot aproximar a una velocitat unidireccional.

Representant els següents casos, on el primer equival a [eq. 60] sense considerar factor de retard, i el segon representa [eq. 69] on no es considera ni retard ni degradació química, es pot observar el següent comportament:



Gràfic 8. Representació [eq. 60] sense retard amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

En aquest cas podem observar com el contaminant únicament s'ha desplaçat una mica més horitzontalment respecte al cas amb retard.

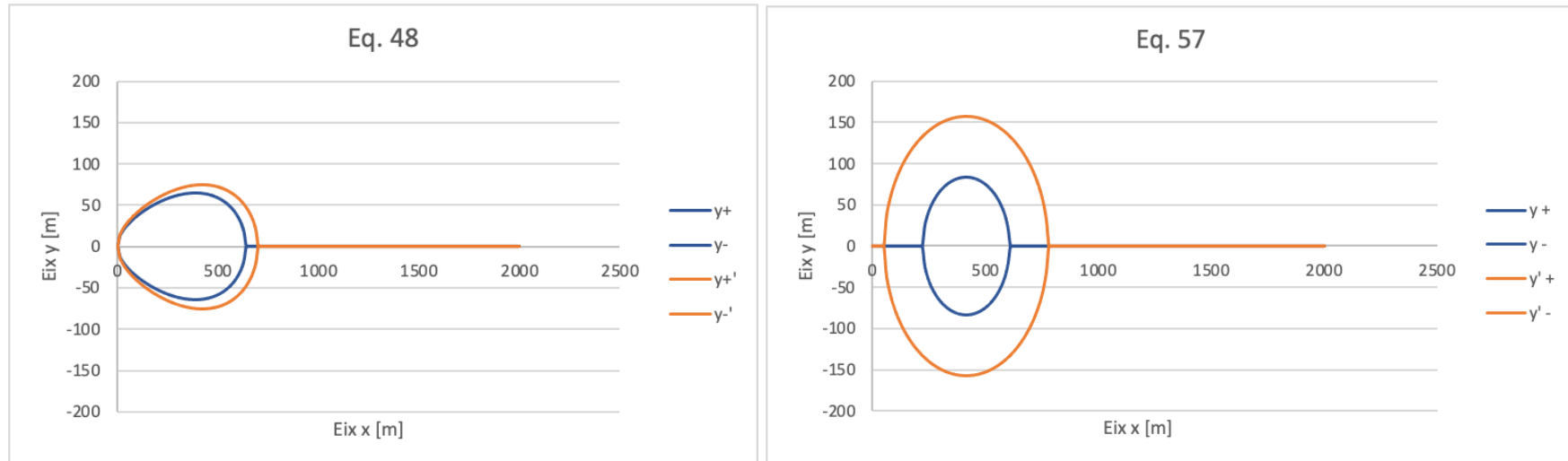


Gràfic 9. Representació [eq. 69] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Aquest cas torna a ser contradictori davant el comportament real que hauria de tenir ja que el contaminant s'hauria de repartir per dominis majors.

10.4. Comparació gràfica entre cas font generadora puntual (r) com a condició de contorn i cas font generadora puntual (r) com a funció temporal

En aquest apartat es vol fer una comparació directa a com afecta en el model del contaminant si es considera que aquest actua com a una font generadora temporal o com a condició de contorn. Utilitzant els mateixos paràmetres i comparant gràficament [eq. 48] i [eq. 57] en la mateixa escala s'obtenen els següents gràfics:

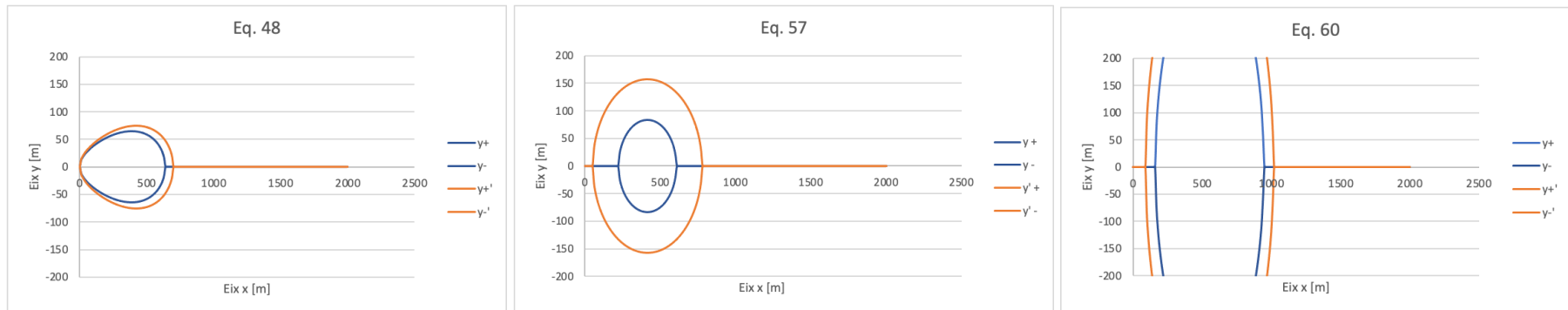


Gràfic 10. Comparació del comportament entre [eq. 48] i [eq. 57] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Al suposar que el contaminant és una condició de contorn ([eq. 48]), s'està considerant que les coordenades inicials d'aquest son fixes i només s'escampa pel domini. En canvi, si es considera que és una funció temporal ([eq. 57]) es pot veure com la font del contaminat es trasllada juntament amb el fluid mentre es va repartint en totes les direccions. Tal com s'ha definit prèviament, com més petita és la corba de nivell més alta és la concentració, de tal manera que en el cas [eq. 48] com que es considera que el contaminant està en les coordenades inicials, en aquells punts la concentració serà molt més elevada que en el cas [eq. 57] on el contaminant es trasllada i les corbes de nivell de la concentració són més petites.

10.5. Comparació de l'advecció i dispersió dels diferents casos estudiats

Aquest apartat consta en comparar l'advecció i la dispersió dels models [eq. 48], [eq. 57] i [eq. 60]. Representant els tres casos sota les mateixes condicions i en la mateixa escala s'obté:



Gràfic 11. Comparació gràfica en la mateixa escala dels models [eq. 48], [eq. 57] i [eq. 60] amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

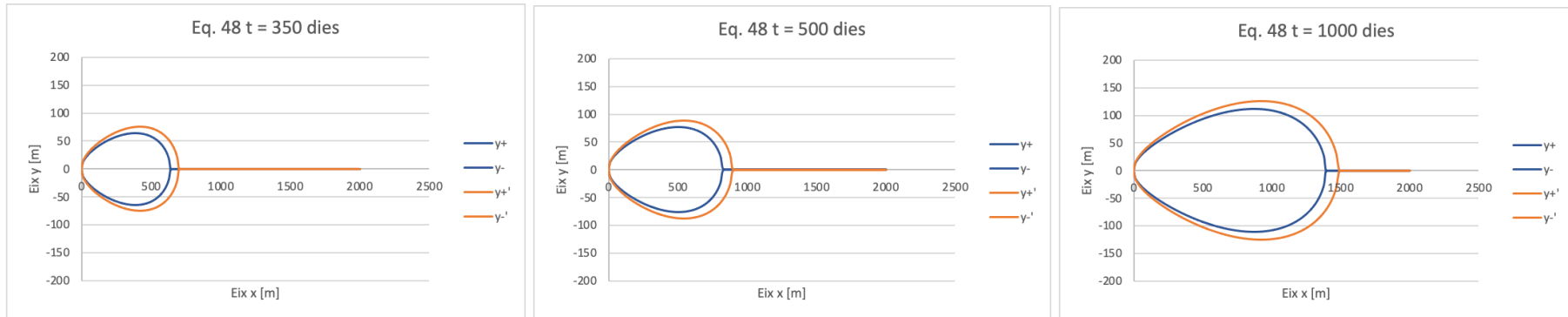
En els casos [eq. 57] i [eq. 60] el contaminant es representa mitjançant una funció temporal, a diferència al cas [eq. 48] on el font del contaminant ve representat com a condició de contorn. Considerant el contaminant com a condició de contorn, s'està considerant fix en les coordenades inicials. En canvi, considerant-lo com a funció temporal, es considera el contaminant com una font que es desplaça juntament amb el fluid. Aleshores en els casos [eq. 57] i [eq. 60] l'efecte de l'advecció comporta que el contaminant s'hagi desplaçat més horitzontalment. Per altra banda, per la mateixa raó, es pot observar com es dispersa més en l'eix vertical.

El cas [eq. 60] representa un model amb una font volúmica, en comparació a les altres dues que representen fonts puntuals. D'aquesta forma té sentit que al tractar-se d'una font de major dimensió, la dispersió i la translació siguin majors i el contaminant s'expandeixi més en el domini $x - y$.

10.6. Representació gràfica del comportament en funció del temps del contaminant

En aquest apartat es vol il·lustrar el moviment del contaminant respecte el temps.

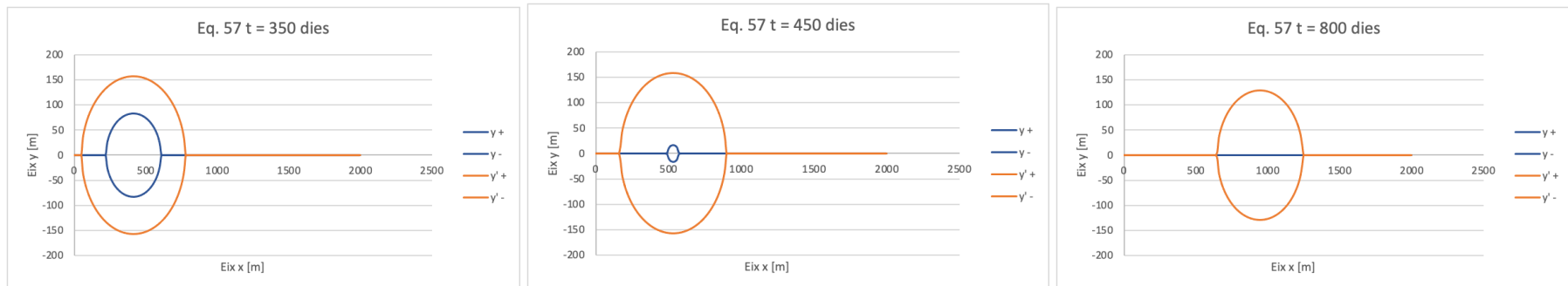
Primerament s'escull el cas [eq. 48] i s'obtenen els següents gràfics:



Gràfic 12. Representació del model [eq. 48] davant diferents instants temporals amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Es pot observar com a mesura que avança el temps, el contaminant cada cop es dispersa més, de manera que com més temps passa, a distàncies majors hi haurà la mateixa concentració de contaminant, sent les coordenades inicials els punts on major concentració hi ha.

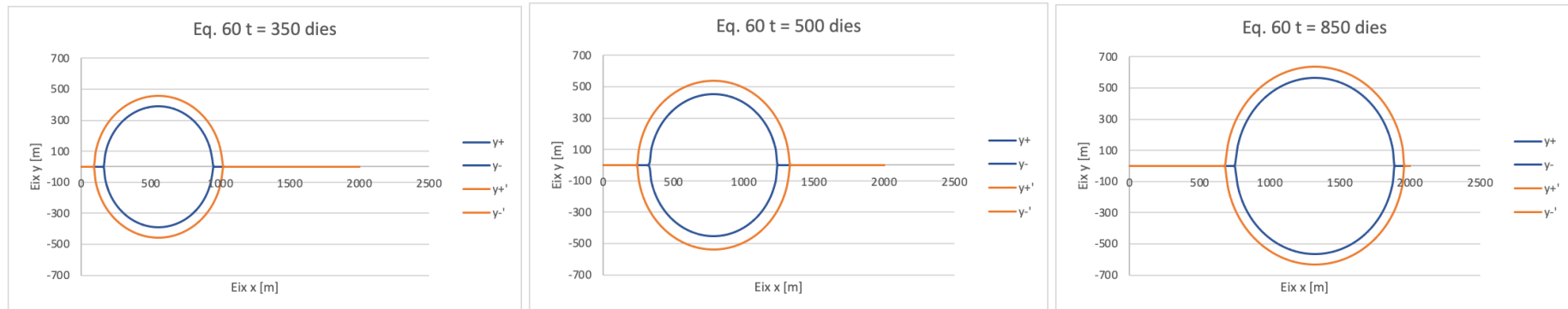
Considerant el cas [eq. 57] per representar gràficament com varia el comportament del contaminant a mesura que avança el temps s'obté:



Gràfic 13. Representació del model [eq. 57] davant diferents instants temporals amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

En aquest gràfic es pot observar, com a diferència del cas anterior, a mesura que avança el temps el contaminant es veu desplaçat en l'eix x . En conseqüència, la dispersió serà cada cop més petita i a mesura que augmenta el valor de la coordenada horitzontal més petites seran les concentracions en aquell punt.

Finalment considerant el cas [eq. 60] es representa gràficament el seu comportament respecte al temps de manera que:



Gràfic 14. Representació del model [eq. 60] davant diferents instants temporals amb la corba blava equivalent a una $C = 0,1 \text{ g/m}^3$ i la taronja $C = 0,04 \text{ g/m}^3$

Es pot observar com, a diferència del cas anterior, a mesura que avança el temps, el contaminant cada cop es desplaça i es dispersa més. Per tant, com més temps passi, a distàncies majors hi haurà la mateixa concentració de contaminant.

11. Resultats

S'ha pogut trobar un total de quatre expressions que permeten representar la concentració del contaminant en un medi de 3-D en diferents condicions de treball. S'han tingut en compte diferents condicions de treball, es parteix del cas més simple, equivalent a una font generadora puntual instantània, fins a solucions matemàticament més complexes, equivalent a fonts volumètriques contínues, tenint en compte un seguit de condicions de contorn, com podria ser el domini d'estudi que en tot moment es considera infinit en els eixos x i y i finit en l'eix z . Per altra banda s'han ampliat les solucions ja existents, considerant casos sense reacció química i considerant un factor de retard. Obtenint un total d'onze expressions que permeten aproximar gairebé qualsevol model de transport de contaminant real a una de les solucions trobades.

Les diferents expressions obtingudes mostren que el resultat és altament dependent de les condicions sota les quals s'està realitzant l'estudi. És a dir, depèn del domini d'estudi, que s'ha considerat que és el més realista i s'ha mantingut durant tot l'estudi, com també de les condicions de contorn, el tipus de font i el tipus de generació.

Donada una situació real, es podria aproximar a qualsevol dels models presentats, obtenint una aproximació molt precisa del seu comportament.

Cal remarcar que es treballa amb els coeficients de dispersió (D_x, D_y i D_z) tot i haver definit prèviament que els conceptes de difusió i el de dispersió mecànica no es poden considerar de forma independent i unint-los en el concepte de la dispersió hidrodinàmica. La raó per la qual no es treballa amb el coeficient de dispersió hidrodinàmica, és que el procés de difusió és menyspreable davant la dispersió mecànica. És a dir, el moviment del contaminant a causa de la difusió és tan petit respecte al moviment degut a la dispersió, que es considera menyspreable.

També és important aclarir que malgrat que es considera que el flux té una velocitat unidireccional, el contaminant es desplaça en totes les dimensions a causa de la dispersió. Per tant, s'obtenen velocitats en les coordenades y i z de valors negligibles, però que apareixen de forma indirecta en els coeficients de dispersió [eq. 10]. Per aquesta raó, quan es consideren els casos particulars amb efecte del retard, es considera que aquest afecta en totes les direccions. D'aquesta forma, es considera que la dispersió té lloc no només en la direcció principal en la qual es desplaça el fluid, sinó en totes direccions.

S'ha observat que la majoria d'expressions, com s'especifica en el punt 7.1.1., no es poden resoldre analíticament, aleshores es tracta de resolucions que perden en precisió i permeten només obtenir un valor aproximat. No obstant, està corroborat que aquestes representen de

forma eficient el comportament real que tindria una contaminant tal i com es pot observar a l'apartat 10, on es representa gràficament en 2-D les solucions aproximades obtingudes.

Com s'ha mencionat prèviament, el resultat depèn fortament de les condicions d'estudi. S'observa que en el cas particular on es considera la font com una funció temporal i on es considera una font generadora volumètrica i contínua no s'ha obtingut un resultat exacte. Segurament la causa és que al tractar-se d'una font volumètrica i no puntual, el resultat de la integral depèn del tipus de comportament de la font, és a dir, de la funció temporal que descriu la font. Com que la funció temporal és particular per cada situació, la integral no queda resolta completament.

Els resultats gràfics obtinguts es pot afirmar que aquests són representatius d'un model real. Malgrat que per solucionar el model és necessari fer una aproximació matemàtica i que per representar-lo s'ha aproximat el valor de la funció d'error, els gràfics mostren clarament com afecta la dispersió i l'advecció al contaminant del contaminant en un domini 2-D, representant de forma realista el seu comportament. Cal destacar que aquestes corbes de nivell obtingudes coincideixen amb les estudiades en [25], de forma que es considera vàlides les aproximacions i la metodologia emprada.

Pel que fa a la representació gràfica de les expressions que no tenen en compte la degradació química, els resultats obtinguts són contradictoris al comportament real esperat. És possible que això sigui degut a un error de la pròpia solució obtinguda per Paladino *et al.* [24]. D'aquesta forma es considera que aquests gràfics no són representatius i seria necessari estudiar-ne l'origen d'aquesta contradicció. Pel que fa la resta de resultats, es pot assegurar que compleixen un comportament realista.

13. Estudi econòmic

En aquest apartat es presenta el cost econòmic que ha implicat aquest estudi. Es tracta d'un treball gairebé completament teòric, doncs, les hores invertides són en gran part treballades en un escriptori. Doncs el cost resultant serà l'equivalent al total d'hores invertides. La taula que es veu a continuació mostra el diferent tipus de tasques relacionades amb el treball, tal com el seu cost.

Pel que fa al transport de l'estudiant implicat en el treball (especificat a la Taula 3), es parteix de la següent informació:

- Una distància recorreguda per cada reunió de 6,8 [Km]
- Un total de 5 reunions
- Una Scooter de 125 CC com a vehicle de transport
- Una despesa aproximada de 4 [L] per cada 100 [Km]
- Un preu aproximat de la gasolina de 1,796 €/L.
-

Cal remarcar que es parteix d'un cost per hora invertida de 8 [€/h], agafant així el salari mínim establert per la Universitat Politècnica de Catalunya per un becari.

Taula 3. Full de càlcul de l'estudi econòmic

Tasca	Preu/hores (€/h) IVA inclòs	Hores (h)	Preu total (€) IVA inclòs
Recerca bibliogràfica	8	150	1.200
Redacció	8	180	1.440
Reunions de tutoria	8	3,5 (5 tutories)	28
Transport (gasolina del vehicle)	-	-	$\frac{6.8 \times 4 \times 1.796 \times 5}{100} = 2,44$
TOTAL	-	-	2.670,44

14. Estudi ambiental

En aquest apartat es fa un estudi de l'impacte mediambiental que ha provocat aquest treball. Es tracta d'un estudi teòric on s'han destinat la majoria de hores en un escriptori. D'aquesta forma l'impacte vindrà donat pel consum elèctric de les bombetes on s'ha redactat el treball, el consum del propi ordinador i pels gasos contaminants del vehicle de transport.

Pel que fa al transport de l'estudiant implicat en el treball, es parteix de la següent informació:

- Una distància recorreguda per cada reunió de 6,8 [Km].
- Un total de 5 reunions.
- Una Scooter de 125 CC com a vehicle de transport.
- Emissió aproximada de 0,060 [KgCO₂ / Km].

La recerca bibliogràfica i la redacció de la memòria s'han dut a terme en una habitació amb el següent consum elèctric:

- Dues bombetes amb un consum de 0,1[kWh] cada una.
- Un MacBook Pro connectat a la corrent la meitat de l'estona amb un consum de 0,150 [kWh]

Tenint en compte que el Mix elèctric peninsular l'any 2022 és de 0,259 KgCO₂ / kWh, s'obté la següent taula:

Taula 4. Full de càlcul estudi ambiental

Tasca	Especificació	Total KgCO ₂
Consum bombetes	2 x 0,1kWh x 330h x 0,259 KgCO ₂ / kWh	17,094
Consum ordinador	0,150kWh x 320h x 0,259 KgCO ₂ / kWh	12,432
Emissions vehicle de transport	5 x 6.8Km x 0.060 KgCO ₂ / Km	2,04
TOTAL	-	31,566

Cal considerar també la petjada hídrica que indirectament comporta la realització d'aquest treball. El total de kWh segons [3] implica aproximadament un consum de 70.224 [L] d'aigua considerant que aproximadament una central tèrmica té una petjada de 616 [L/kWh].

15. Estudi social

Aquesta part del treball té en compte les possibles desigualtats per sexe, per raons ideològiques o per recursos disponibles que pot provocar aquest estudi.

El professorat que ha donat suport en aquest treball ha estat format per l'Elisabeth Bou Petit i en Jordi Bou. L'ajuda i la influència del professorat ha estat independent del sexe dels professors.

Pel que fa la memòria escrita es considera que el contingut no té cap efecte discriminatori al tractar-se d'un estudi completament objectiu.

Cal remarcar, que per desenvolupar aquest treball ha estat necessari fer una llarga cerca bibliogràfica utilitzant portals i pàgines web a les quals es tenia accés gràcies a ser estudiant de l'Universitat Politècnica de Catalunya. Es considera que existeix una petita desigualtat social davant una tercera persona que tingui l'objectiu de fer la mateixa recerca bibliogràfica, ja que es pot trobar amb l'inconvenient de no tenir els mateixos recursos disponibles.

A la majoria d'estudis en els quals s'ha basat aquest treball, només hi tenen accés gratuït alumnes vinculats a un cert nombre d'universitats, doncs, es considera que no existeix una plena igualtat per poder realitzar aquest estudi.

16. Conclusions

Un cop finalitzat el treball es pot concloure que els resultats han estat satisfactoris. S'ha pogut trobar un total de quatre expressions que permeten representar la concentració del contaminant en un medi de 3-D en diferents condicions de treball. A més, tenint en compte el factor de retard i considerant que no hi ha reacció química, es pot observar com a partir de quatre models complexos obtinguts, deriven diferents situacions particulars molt senzilles d'obtenir matemàticament, obtenint un total d'onze expressions.

Per tant, es considera que els resultats obtinguts compleixen l'objectiu de trobar una solució que representi el comportament de transport en 3-D d'un contaminant de forma suficientment simplificada per tal de poder aplicar el coneixement obtingut a l'assignatura de TMA. També es compleix de forma satisfactòria l'objectiu d'ampliar les solucions trobades amb casos particulars a desitjar, sense necessitat de realitzar operacions matemàtiques complexes.

D'aquesta forma, una situació real es podria aproximar a qualsevol dels models presentats, obtenint una aproximació molt precisa del seu comportament. Cal recordar que les expressions obtingudes són només aproximacions que només permeten obtenir un valor aproximat, a causa de la complexitat matemàtica en la resolució.

També s'ha complert de forma satisfactòria la representació gràfica dels diferents models a partir de les aproximacions emprades, obtenint comportaments realistes. Es veuen clarament els diferents tipus de comportament que tenen els diferents casos estudiats, com també com afecten els paràmetres del retard i la degradació química al model.

17. Bibliografía

- [1] ALLOWAY, B. J. (2013). *Heavy Metals in Soils : Trace Metals and Metalloids in Soils and their Bioavailability*. Dordrecht: Springer Netherlands.
- [2] BOLÍVAR, J. P., García-Tenorio, R., & García-León, M. (1995). Enhancement of natural radioactivity in soils and salt-marshes surrounding a non-nuclear industrial complex. *Science of the Total Environment*, 173-174, 125–136.
[[https://doi.org/10.1016/0048-9697\(95\)04735-2](https://doi.org/10.1016/0048-9697(95)04735-2)]
- [3] CABAÑES, J. L. C. (2016, September 5). La Huella Hídrica de la vida diaria de una persona.[<https://www.comunidadism.es/la-huella-hidrica-de-la-vida-diaria-de-una-persona>, 5 de gener de 2023]
- [4] CONCEPTOS BÁSICOS DEL AGUA EN MEDIO POROSO – EL BLOG DE VÍCTOR YEPES.[<https://victoryepes.blogs.upv.es/2020/03/22/conceptos-basicos-del-agua-en-medio-poroso/>, 25 de setembre de 2022]
- [5] CORREA, P. F. (2017, September 30). El suelo y sus etapas de formación. Retrieved from Entre el espacio y el tiempo website:
[<https://entreelespacioyeltiempo.wordpress.com/2017/09/30/el-suelo-y-sus-etapas-de-formacion/>, 23 de novembre de 2022]
- [6] COUTELIERIS, F. A., & Delgado, J. M. P. Q. (2012). Modeling of Transport Processes in Porous Materials. *Advanced Structured Materials*, 87–121.
[https://doi.org/10.1007/978-3-642-27910-2_5]
- [7] DOMENICO, P. A. (1987). An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. *Journal of Hydrology*, 91(1-2), 49–58.
[[https://doi.org/10.1016/0022-1694\(87\)90127-2](https://doi.org/10.1016/0022-1694(87)90127-2)]
- [8] DOMENICO, P. A., & Robbins, G. A. (1985). A New Method of Contaminant Plume Analysis. *Ground Water*, 23(4), 476–485.
[<https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1985.tb01497.x>]
- [9] ESTEFANI T., CCente, K., Dagoberto, L., Garcia, D., Gustavo, E., & Carhuapoma, E. (2021). *Para optar el Título Profesional de Ingeniero Ambiental Escuela Académico Profesional de Ingeniería Ambiental*. Retrieved from

[https://repositorio.continental.edu.pe/bitstream/20.500.12394/11368/2/IV_FIN_107_TE_Ccente_Garcia_Esteban_2021.pdf]

- [10] FACTOR DE EMISIÓN DE LA ENERGÍA ELÉCTRICA: EL MIX ELÉCTRICO. (n.d.). [https://canviclimatic.gencat.cat/es/actua/factors_demissio_associats_a_lenergia/, 10 de gener de 2022]
- [11] GRATHWOHL, P. (1998). Modelling of Diffusion Processes. *Diffusion in Natural Porous Media: Contaminant Transport, Sorption/Desorption and Dissolution Kinetics*, 43–81. [https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5683-1_3]
- [12] GREEN'S FUNCTIONS IN PHYSICS | BRILLIANT MATH & SCIENCE WIKI. (n.d.). [<https://brilliant.org/wiki/greens-functions-in-physics/>, 20 de setembre de 2022]
- [13] HAFEZ, Y. I., & Awad, E.-S. (2016). Finite element modeling of radon distribution in natural soils of different geophysical regions. *Cogent Physics*, 3(1). [<https://doi.org/10.1080/23311940.2016.1254859>]
- [14] HANSFORD T., S. (1984). *U.S. Geological Survey Circular*.
J, C. (1956). Diffusion and chemical reaction. *The Mathematics of Diffusion*, 326–351. [<https://cir.nii.ac.jp/crid/1572261549444694016>]
- [15] JOSEP ARNALDOS VIGER. (2004). *Manual de ingeniería básica para la prevención y extinción de incendios forestales*. Mundi-Prensa Libros.
- [16] JOSEP ARNALDOS VIGER. (2012). *Tecnologia del medi ambient i sostenibilitat*. Departament d'Enginyeria Química.
- [17] KIM, S., & CHOI, K. (2014). Occurrences, toxicities, and ecological risks of benzophenone-3, a common component of organic sunscreen products: A mini-review. *Environment International*, 70, 143–157. [<https://doi.org/10.1016/j.envint.2014.05.015>]
- [18] LA MOTO DENTRO DE LA MOVILIDAD SOSTENIBLE PROMOCIÓN, SEGURIDAD E INTERMODALIDAD. *Ayuntamiento de Sevilla*. [<https://revista.dgt.es/images/2-La-moto-dentro-de-la-mov.-sostenible.-Ayto-Sevilla.pdf>]
- [19] LEIJ, F. J., PRIESACK, E., & SCHAAP, M. G. (2000). Solute transport modeled with Green's functions with application to persistent solute sources. *Journal of Contaminant Hydrology*, 41(1), 155–173. [[https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(99\)00062-5](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(99)00062-5)]

- [20] MARTIN-HAYDEN, J. M., & ROBBINS, G. A. (1997). Plume Distortion and Apparent Attenuation Due to Concentration Averaging in Monitoring Wells. *Ground Water*, 35(2), 339–346. [<https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1997.tb00091.x>]
- [21] MILEUSNIC, M., MAPANI, B. S., KAMONA, A. F., RUZICIC, S., MAPAURE, I., & CHIMWAMUROMBE, P. M. (2014). Assessment of agricultural soil contamination by potentially toxic metals dispersed from improperly disposed tailings, Kombat mine, Namibia. *Journal of Geochemical Exploration*, 144, 409–420. [<https://doi.org/10.1016/j.gexplo.2014.01.009>]
- [22] OGATA, A., & BANKS, R. B. (1961). A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media. In *Google Books*. U.S. Government Printing Office. Retrieved from [https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=mDVEtSpqTSUC&oi=fnd&pg=PA1&dq=ogata+banks+equation&ots=boITkFOCPC&sig=IIJG7ygLcOqaliV_xnJyAKUXfAc#v=onepage&q=ogata%20banks%20equation&f=false]
- [23] ORIGEN Y FORMACIÓN DEL AGUA SUBTERRÁNEA. [<https://www.fundacionaquae.org/wiki/como-se-forma-agua-subterranea/>, 23 de noviembre de 2022]
- [24] PALADINO, O., MORANDA, A., MASSABÒ, M., & ROBBINS, G. A. (2017). Analytical Solutions of Three-Dimensional Contaminant Transport Models with Exponential Source Decay. *Groundwater*, 56(1), 96–108. [<https://doi.org/10.1111/gwat.12564>]
- [25] PARK, E., & ZHAN, H. (2001). Analytical solutions of contaminant transport from finite one-, two-, and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 53(1-2), 41–61. [[https://doi.org/10.1016/s0169-7722\(01\)00136-x](https://doi.org/10.1016/s0169-7722(01)00136-x)]
- [26] RUSS, & NUMER. (2010). A monotone nonlinear finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polyhedral meshes in 3D. *Anal. Math. Modelling*, 25(4), 335–358. [http://dodo.inm.ras.ru/vassilevski/wp-content/uploads/2015/01/rjnamm25_335-358.pdf]
- [27] SÁNCHEZ SAN RAMON, F. J. (2014). *Transporte de contaminantes*. [https://hidrologia.usal.es/temas/Transporte_de_contaminantes.pdf]
- [28] SRINIVASAN, V., CLEMENT, T. P., & LEE, K. K. (2007). Domenico Solution? Is It Valid? *Ground Water*, 45(2), 136–146. [<https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2006.00281.x>]

- [29] TEMA 4. LA VELOCIDAD DE CAMBIO QUÍMICO I. (n.d.).
[https://www.uv.es/tunon/pdf_doc/QAIBtema4.pdf, 3 de novembre de 2022]
- [30] WANF, H., LIU, J., ZHAO, Y., LU, W., & WU, H. (2011). Stepwise superposition approach for the analytical solutions of multi-dimensional contaminant transport in finite- and semi-infinite aquifers. *Journal of Contaminant Hydrology*, 125(1-4), 86–101. [<https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2011.05.003>]
- [31] WANG, H., & WU, H. (2008). Analytical solutions of three-dimensional contaminant transport in uniform flow field in porous media: A library. *Frontiers of Environmental Science & Engineering in China*, 3(1), 112–128.
[<https://doi.org/10.1007/s11783-008-0067-z>]
- [32] WEXLER, E. J. (1992). Analytical Solutions for One-, Two-, and Three-dimensional Solute Transport in Ground-water Systems with Uniform Flow. In *Google Books*. U.S. Government Printing Office.
[<https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=LTW8d0bfUZMC&oi=fnd&pg=PA1&dq=Wexler>]
- [33] ZAPATA, F. (2021, May 17). Ley de Darcy: ecuaciones, aplicaciones, limitaciones, ejercicio.[<https://www.lifeder.com/ley-darcy/>]

18. Annexos

18.1 Annex 1

Funcions de Green

El Mètode de Funcions de Green (GFM) és utilitzat per resoldre equacions diferencials. En el qual donada una expressió:

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + x^2 f(x) = 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2\right)f(x) = 0$$

Es defineix L com a operador diferencial tal que:

$$L[f(x)] = 0$$

Tal que la funció de Green és la inversa de l'operador diferencial:

$$G(x, y) \sim L^{-1} \sim \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2\right)^{-1}$$

Doncs la funció de Green inverteix l'operador, de manera que l'expressió inhomogènia $L[f(x)] = g(x)$, pugui res resolta per $f(x) = G(x, y)g(x)$, de manera que:

$$L f(x) \sim L[G(x, y)g(x)] \sim LL^{-1}g(x) = g(x)$$

Formalment, una funció és la inversa d'un operador lineal L , sent una funció de dues variables $G(x, y)$ que compleix la següent equació:

$$L[G(x, y)] = \delta(x - y)$$

on $\delta(x - y)$ és la delta de Dirac. Doncs la funció de Green es la solució davant l'equació diferencial. Això equival a agafar un nombre incomptable de solucions superposades a l'equació amb font puntual i adjuntant-la al terme arbitrari forçat. Això significa que la solució davant una funció lineal diferencial forçant un terme:

$$L[u(x)] = f(x)$$

és:

$$L[u(x)] = \int L[G(x, y)]f(y)dy = \int \delta(x - y) f(y)dy = f(x)$$

on:

$$u(x) = \int G(x, y)f(y)dy$$

De manera que les funcions de Green no són estrictament funcions, sinó distribucions, per lo qual poden ser integrades.

18.2 Annex 2

En aquest apartat s'adjunta el full de càlcul utilitzat per dibuixar les gràfiques.

[Excel TFG](#)