

TEMA 5

HIDROLOGIA SUPERFICIAL Y SUBTERRANEA

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA

IX CONGRESO NACIONAL

VALIDEZ DE LA SUPOSICION DE EQUILIBRIO EN MODELOS DE
TRANSPORTE DE SOLUTOS

Roberto Abelluk R.¹

RESUMEN

En estudios de infiltración de un soluto reactivo a través de un medio poroso, la mayoría de los autores han supuesto que rápidamente se logra un equilibrio entre la concentración de soluto en solución y la concentración o masa de soluto adsorbida por la matriz porosa. Se demuestra mediante un ejemplo numérico que la validez de esta suposición es cuestionable y que un modelo cinético puede emplearse para representar la misma información que un modelo de equilibrio y que por lo tanto se requiere establecer claramente bajo que condiciones existe equilibrio antes de emplear modelos que consideran esta suposición.

¹PhD. Ingeniero Ambiental., Profesor Escuela de Ingeniería, P. Universidad Católica de Chile, Casilla 6177, Stgo.

I. INTRODUCCION

En la actualidad existe una preocupación creciente acerca de la contaminación de las aguas subterráneas con diversas sustancias, algunas potencialmente tóxicas. De hecho, estadísticas recientes muestran que en los países altamente industrializados prácticamente no existen fuentes de agua subterránea que no estén afectas a algún grado de contaminación por sustancias químicas.

El origen de esta contaminación puede atribuirse a las descargas de residuos tóxicos en tranques no totalmente impermeables, a la aplicación indiscriminada de insumos agrícolas, tales como fertilizantes y plaguicidas y al mal manejo generalizado de los residuos industriales líquidos.

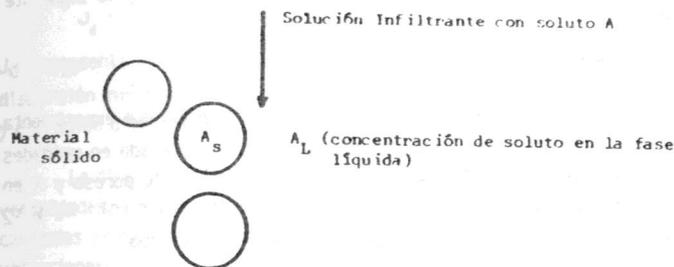
El estudio del problema de la contaminación de las aguas subterráneas ha concitado el interés de investigadores de diferentes áreas destacándose entre ellos ingenieros hidráulicos, químicos y especialistas en suelos. En general, el énfasis que se ha dado a este tipo de estudio puede agruparse en tres categorías.

- i) la conceptualización, o estudios fundamentales que permiten desarrollar modelos para simular el comportamiento de una sustancia contaminante a medida que penetra el suelo,
- ii) la determinación de parámetros mediante estudios experimentales en columnas de laboratorio, y
- iii) la solución numérica o analítica de los modelos conceptuales desarrollados.

2. TEORIA

Los modelos de transporte de sustancias reactivas a través del suelo, deben necesariamente incluir algunos términos que reflejen las transformaciones químicas o bacteriológicas o las interacciones físicas que pueden sufrir las sustancias a medida que atraviesan el material poroso. En general, se ha supuesto que las reacciones o interacciones pueden ser descritas mediante una condición de equilibrio localizado, en otras palabras que la reacción ocurre en forma tal que permite que se establezca un equilibrio entre las sustancias reaccionantes y el o los productos de la

reacción. Un ejemplo sencillo sirve para ilustrar el concepto de equilibrio. Suponiendo que una sustancia A es adsorbida por el material poroso, la condición de equilibrio implica que se establece una relación constante entre la concentración de la sustancia en la solución (agua infiltrante) y la matriz porosa (suelo). Gráficamente:



Se tiene entonces que:

$$A_s = K A_L \quad (1)$$

donde A_s representa el soluto en la fase sólida, A_L el soluto en la fase líquida y K una constante de equilibrio o coeficiente de distribución.

La preferencia por modelos de equilibrio vs modelos cinéticos ha sido fundamentalmente por razones prácticas más que por hechos comprobados. Los modelos de equilibrio son computacionalmente más simples y las constantes involucradas son de fácil evaluación experimental. Sin embargo en los últimos años se ha cuestionado el uso de modelos de equilibrio y se ha promovido el estudio de modelos cinéticos, es decir aquellos que consideran que no se alcanza un equilibrio entre la especie en fase líquida y la especie adsorbida como se ilustrara en el ejemplo anterior.

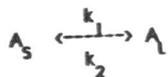
Existe una gran variedad de ejemplos de interacciones químicas o biológicas principalmente en las cuales resulta evidente que la condición de equilibrio es poco satisfactoria. Así, por ejemplo, las reacciones que involucran transformaciones biológicas son más bien de tipo cinética que de equilibrio.

3. DESARROLLO DE UN MODELO CINÉTICO DE TRANSPORTE DE SOLUTO

A modo de ilustración y sin perder generalidad, se supondrá que el soluto es adsorbido por la fase sólida pero que no logra alcanzar una situación de equilibrio. Esta situación puede ser descrita por la siguiente expresión:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_1 \frac{\theta}{r} C - k_2 S \quad (2)$$

donde $S = A_S$ y $C = A$. La diferencial representa la variación que experimenta la concentración adsorbida (debe notarse que S está expresado en unidades de masa de especie adsorbida por unidad de masa de medio poroso y A en unidades de masa de soluto por unidad de volumen de solución). k_1 y k_2 representan los coeficientes cinéticos de una reacción del tipo



La situación de equilibrio es sólo un caso especial de (2) ya que para $\partial S / \partial t = 0$ (equilibrio) se llega a:

$$k_1 \frac{\theta}{r} C = k_2 S \quad \text{o sea } S = KC (A_S = K A)$$

La derivación de un modelo generalizado de transporte de soluto se basa en la combinación de las ecuaciones de flujo advectivo (debido al movimiento del fluido) y de flujo dispersivo (debido a diferencias de velocidades en los poros con respecto a la velocidad media del fluido y a gradientes de concentración)

El flujo advectivo está dado por:

$$J_a = q \cdot C \quad (3)$$

donde J_a representa la tasa de desplazamiento del soluto en las direcciones de x , y y z por unidad de área perpendicular a la dirección del flujo, q es el flujo volumétrico y está relacionado con la velocidad macroscópica de Darcy

(una velocidad promedio) a través de la expresión $V = q/\theta$ con V igual a la velocidad aparente o velocidad promedio del fluido a través de la columna, θ representa la humedad volumétrica y C la concentración de soluto en la fase líquida.

El flujo dispersivo por otra parte está dado por:

$$J_d = -\theta D_p \text{ grad } C - \theta D_m \text{ grad } C \quad (4)$$

J_d representa el flujo dispersivo y D_p y D_m son iguales al coeficiente de dispersión mecánica y al coeficiente de difusión molecular en el líquido puro y corregido para un material poroso respectivamente

La dispersión mecánica se debe a una distribución no uniforme de las velocidades del fluido en los intersticios de los poros (Fried, 1975) causadas principalmente por efectos de las paredes de los granos, por variaciones de las dimensiones de los poros y por fluctuaciones de las direcciones del flujo en los poros con respecto a la dirección media de flujo. Por otra parte la difusión molecular es una consecuencia del gradiente de concentración que se produce al ingresar una solución de soluto al medio poroso exento de soluto o de concentración diferente a la infiltrante. Esta difusión se describe mediante la Ley de Fick y ocurre aún con el fluido en reposo. Desde el punto de vista experimental resulta difícil separar ambos efectos por lo cual comúnmente se combinan en uno denominado dispersión hidrodinámica.

Combinando (3) con (4) y considerando la dispersión hidrodinámica se obtiene:

$$J = q \cdot C - (\theta D_h (\theta, q) \text{ grad } C) \quad (5)$$

expresión que refleja la influencia de la humedad θ y de q en el coeficiente de dispersión hidrodinámica.

Las expresiones anteriores fueron derivadas para flujo estacionario. Para régimen transiente la variación de masa de soluto por unidad de tiempo en un volumen representativo del sistema debe ser igual a la diferencia entre lo que ingresa y lo que sale del elemento de volumen. Esto se expresa mediante la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial C \theta}{\partial t} = -\nabla J \quad (6)$$

La que combinada con (5) para flujo unidimensional en la dirección vertical Z (positiva del nivel del suelo hacia abajo) entrega:

$$\frac{\partial C \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q C}{\partial Z} - \frac{\partial}{\partial t} (\theta D_h (\theta, q)) \frac{\partial C}{\partial Z} \quad (7)$$

e introduciendo la ecuación de continuidad para el fluido:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial Z} \quad (8)$$

se obtiene

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} (D_h (\theta, q)) \frac{\partial C}{\partial Z} - q \frac{\partial C}{\partial Z} \quad (9)$$

La expresión (9), de uso generalizado en estudios de transporte unidimensional - vertical - de soluto, no incluye los efectos de posibles interacciones del material poroso con el soluto. En el caso de adsorción se llega a:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + r \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} (\theta D_h (\theta, q)) \frac{\partial C}{\partial Z} - q \frac{\partial C}{\partial Z} \quad (10)$$

donde el término adicional $\partial S / \partial t$ representa la tasa a la cual el soluto es adsorbido por el sólido del material poroso por unidad de tiempo y r es la densidad del medio poroso. Las unidades de S son masa soluto/masa de sólido y las de r masa de sólido por unidad de volumen de medio poroso. Análogamente las unidades de C son masa de soluto por unidad de volumen de solución y las de θ volumen de líquido - agua - por unidad de volumen de medio poroso por lo cual las unidades son consistentes.

El modelo de transporte para sustancias reactivas, incluye por lo tanto un término en $\partial S / \partial t$, estando éste en este caso dado por (2).

4. SOLUCION DEL MODELO DE TRANSPORTE PARA SOLUTOS REACTIVOS

El sistema de ecuaciones que representa el transporte de solutos reactivos a través del suelo es altamente no lineal y debe ser resuelto por

métodos numéricos. A continuación, se presenta una metodología de solución basada en el método de las diferencias finitas. En este caso se divide la columna en profundidades iguales estando cada una de ellas representada por I. La variable tiempo se representa por J con J = 1 igual a la condición inicial conocida.

Paso 1 Evaluación de la tasa de reacción para j = 1 - concentraciones conocidas - para todo I (ecuación (2))

$$\text{Tasa (1)} = \frac{\theta}{r} k_1 C_{1,1} - k_2 S_{1,1} \left(= \frac{\partial S}{\partial t} |_{1,1} \right)$$

y $S_{1,2} - S_{1,1} = \text{Tasa (1)} * \Delta t$ de donde se obtiene $S_{1,2}$

Paso 2 Solución de la ecuación de transporte de soluto para el próximo nivel de tiempo j = 2 y para Tasa (1).

$$\theta_{1,j+1/2} \frac{C_{1,2} - C_{1,1}}{\Delta t} = \frac{D_{1,j+1/2}}{\Delta Z} \frac{\theta_{1,j+1/2} - \theta_{1,j+1/2}}{2\Delta t} - \frac{\theta_{1,j+1/2}}{\Delta Z} \frac{\partial S}{\partial t} |_{1,1}$$

$$\frac{C_{1,j+1/2} - C_{1,j+1/2}}{2\Delta t} + D_{1,j+1/2} \frac{\theta_{1,j+1/2} - \theta_{1,j+1/2}}{(\Delta Z)^2} + \frac{C_{1,j+1/2} - 2C_{1,j+1/2} + C_{1,j+1/2}}{(\Delta Z)^2} -$$

$$q_{1,j+1/2} \frac{C_{1,j+1/2} - C_{1,j+1/2}}{2\Delta Z} - r \frac{\partial S}{\partial t} |_{1,1}$$

donde el subíndice j+1/2 representa el valor medio de la propiedad entre los puntos j=1 y j=2

Paso 3 Actualización del término tasa de reacción empleando el valor de C calculado en 2

$$\text{Tasa (1)} = \frac{k_1}{r} 0,5 (\theta_{1,1} C_{1,1} + \theta_{1,2} C_{1,2}) - k_2 0,5 (S_{1,1} + S_{1,2})$$

y $S_{1,2} - S_{1,1} = \text{Tasa (1)} * \Delta t$

y reevaluación de $C_{1,2}$ mediante la ecuación discretizada de transporte de soluto

Paso 4 Comparación entre los valores calculados de $C_{1,2}$ paso 2 con $C_{1,2}$ paso 3. Si el criterio de convergencia preestablecido se satisface, se aceptan los valores de $C_{1,2}$ y se reinicia el procedimiento en paso 1 para un $j=1$ igual a $j=2$. De lo contrario se retorna al paso 2.

5. APLICACION DE MODELO DESARROLLADO

El modelo descrito permite simular el transporte de un soluto reactivo a través de una columna de suelo. El modelo fue validado entregando resultados que concordaban con valores producidos por modelos similares.

Más que entregar una aplicación adicional del modelo se prefirió establecer las condiciones para las cuales un modelo de este tipo produce resultados similares a aquellos generados por un modelo que considera una situación de equilibrio. La pregunta resulta pertinente ya que es frecuente estimar mediante métodos de optimización los valores de los coeficientes de dispersión y aún los coeficientes cinéticos o los de equilibrio.

Los métodos de optimización comúnmente empleados se basan en

-Suponer que el modelo refleja adecuadamente la situación que se desea simular.

-Comparar, mediante una función objetivo los resultados experimentales con aquellos generados por el modelo.

De lo anterior se desprende que un conjunto de datos experimentales resultantes de una situación de equilibrio podrían en principio permitir estimar los parámetros de un modelo cinético y viceversa. Esto en principio tiene implicaciones serias ya que la determinación de parámetros dispersivos y cinéticos normalmente se realiza mediante técnicas de optimización.

5.1 Experimento numérico

Un primer experimento fue llevado a cabo con el objeto de comprobar las hipótesis enunciadas referentes a si los modelos de equilibrio y cinéticos pueden representar la misma información.

En este ejemplo se empleó un coeficiente D constante independiente de la velocidad y de la humedad y además se supuso régimen permanente. La ecuación relevante es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + r \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - v_0 \frac{\partial C}{\partial Z} \quad (11)$$

$$\text{con } \frac{\partial S}{\partial t} = K \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{modelo de equilibrio}$$

$$\text{y } \frac{\partial S}{\partial t} = k_1 r C - k_2 S \quad \text{modelo cinético}$$

En el experimento numérico se generó, empleando el modelo de equilibrio y tres valores de D , un conjunto de datos de concentración de soluto a una profundidad de 15 cm para un tiempo de infiltración de 0 a 80 horas. Los valores de D , v_0 y K se entregan en la Tabla 1 conjuntamente con las condiciones iniciales y de borde.

Tabla 1. Ejemplo numérico. Parámetros empleados

Parámetro	Valores		
D	1,5, 3,0 y 6,0		
v_0	3,0		
K	2,5		
Condición inicial	$C = C_0$	$0 < Z < L$	$t = 0$
Condiciones de borde	$v_0 C - D \partial C / \partial Z = v_0 C_0$	$Z = 0$	$t > 0$
	$\partial C / \partial Z = 0$	$Z = L$	$t > 0$
		$L = 30 \text{ cm}$	
	$C_0 = 1,0$ para las primeras 40 horas		
	$C_0 = 0,0$ para las siguientes 40 horas		

Los valores generados con el modelo de equilibrio y aquellos correspondientes al modelo cinético para distintas razones k_1/k_2 se ilustran en las Figuras 1, 2 y 3. En ellas se emplearon diferentes valores del coeficiente de dispersión D y se observa que para $D = 3,0$ (Figura 2) y $k_1/k_2 = 2,5$ y para $D = 6,0$ y $k_1/k_2 = 2,5$ (Figura 3) se obtiene una coincidencia casi perfecta entre ambos modelos. Estas curvas confirman lo que se señalara inicialmente en el sentido que un modelo cinético y un modelo de equilibrio pueden representar la misma información.

6. CONCLUSIONES

Los resultados del ejemplo numérico descrito en este trabajo y de otro realizado por el autor (Abelluk, 1987), muestran que bajo ciertas circunstancias un modelo de equilibrio y uno cinético entregan idénticos perfiles de concentración de soluto luego de un proceso de infiltración.

Estas observaciones han sido confirmadas por otros investigadores, insistiendo en que la situación de equilibrio no siempre aplica y debe por lo tanto recurrirse a un modelo cinético. James y Rubin (1979), en experimentos con columnas de intercambio iónico, determinaron rangos de velocidades de infiltración para los cuales la suposición de equilibrio localizado es válida. Estos autores concluyeron que sólo se puede suponer equilibrio cuando el coeficiente de dispersión mecánica tiene un valor cercano -al menos del mismo orden de magnitud- al coeficiente de difusión molecular. En otras palabras, sólo para velocidades pequeñas puede suponerse que se alcanza el equilibrio. Para velocidades mayores dentro del rango estudiado ($1,7 \times 10^{-5}$ a $1,8 \times 10^{-2}$ cm/s), debe suponerse un modelo cinético ya que la suposición de equilibrio pierde validez.

Jennings y Kirkner (1984) y Valocchi (1985) también cuestionaron la validez de la suposición de equilibrio y concluyeron que en ésta inciden factores tales como las velocidades de flujo y los valores de los coeficientes de dispersión/difusión y de distribución.

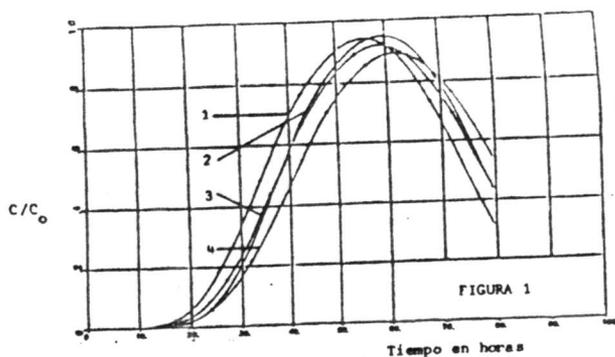
El presente trabajo permite confirmar las observaciones anteriores y por lo tanto caucionar a los investigadores en el sentido que no siempre, por deseable y ventajoso que sea, puede suponerse que en un proceso de infiltración de un soluto a través de un medio poroso se alcanza una situación de equilibrio.

7. REFERENCIAS

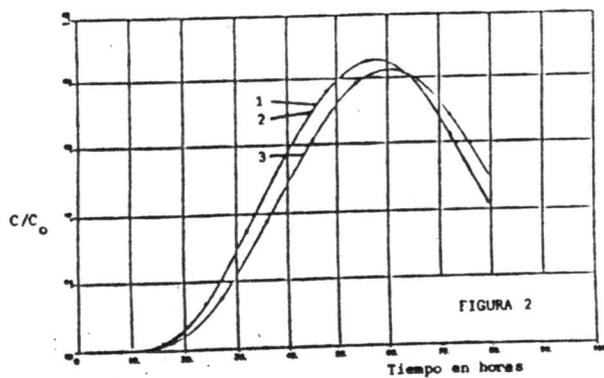
- Abelluk, R. (1987) Parameter Identification in Unsaturated Flow and Solute Transport Models. Tesis de PhD Universidad de Londres, Inglaterra.
- Fried, J.J. (1975). Groundwater Pollution Theory, Methodology, Modeling and Practical Rules. Development in Water Science, 4, Elsevier Scientific Publishing Co., Amsterdam.
- James, R.V. y Rubin, J. (1979) Applicability of the Local Equilibrium Assumption to Transport through Soils of Solutes Affected by Ion Exchange. En "Chemical Modeling in Aqueous Systems". E.A. Jenne Ed. ACS Washington DC, 225-235.
- Jennings, A.A. y Kirkner, D.J. (1984) Instantaneous Equilibrium Approximation Analysis. J. of Hydraulic Engineering, ASCE, 110, (12), 1700-1717.
- Valocchi, A.J. (1985) Validity of the Local Equilibrium Assumption for Modeling Sorbing Solute Transport through Homogeneous Soils. Water Resources Research, 21, (6), 808-820.

Agradecimientos

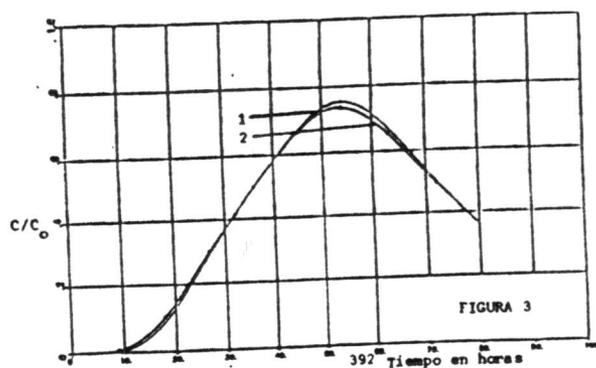
El autor agradece al FONDECYT (89/596) y al PNUD (CHI/88/020) el financiamiento a un proyecto de investigación relacionado con el transporte de solutos en medios permeables.



Curva	K_1/K_2
1	2,25
2	Equilibrio ($K=2,5$)
3	2,50
4	2,75



Curva	K_1/K_2
1	2,50
2	Equilibrio ($K=2,5$)
3	2,75



Curva	K_1/K_2
1	Equilibrio ($K=2,5$)
2	2,5

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA
IX CONGRESO NACIONAL

INFLUENCIA DE LOS FACTORES QUE INTERVIENEN
EN EL CALCULO DE ONDAS DE CRECIDA
POR EL METODO DEL HIDROGRAMA UNITARIO

ANDRES BENITEZ GIRON (1)

RESUMEN

En el cálculo de una onda de crecida intervienen varios factores que representan los distintos fenómenos hidrometeorológicos que influyen en su magnitud como la magnitud y distribución temporal de la precipitación, la altitud de la línea de nieve, la infiltración etc. Todos ellos pueden combinarse de distinta manera con lo cual se obtienen ondas de crecidas de muy dispar magnitud y forma. En este trabajo se estudia el caso particular del río Aconcagua en Chacabuquito, se analiza la influencia de cada factor que interviene en el cálculo y se recomienda como operar para no dejarse influir para obtener un valor que previamente puede haber sido supuesto.

(1) Ingeniero Civil U.CH. Profesor asociado Escuela de Ingeniería Universidad de Chile.