

## ***ANEXO PARTE II. CONCEPTOS GENERALES SOBRE LA DISPERSION***

***A.1. Introducción***

***A.2. Descripción de la dispersión***

***A.3. Representación conceptual de la dispersión. La ecuación general de la dispersión y limitaciones en su aplicación.***

***A.4. El problema especial de la intrusión en acuíferos costeros***

## A.1. INTRODUCCION

Puede definirse la teoría de la dispersión en medios porosos saturados como "la descripción cualitativa y la estimación cuantitativa del comportamiento de dos o más fluidos miscibles moviéndose conjuntamente en un medio poroso" (Fried, 1975).

Al ponerse en contacto dos fluidos miscibles (p.e. agua no contaminada, de  $c = 0$ , y agua contaminada con  $c = c_1$ , refiriéndose las concentraciones a una cierta especie química contaminante) se establece una zona de transición o de mezcla entre ambos en la cual se produce una variación gradual de las propiedades físicas de los fluidos (p.e. la concentración se incrementa gradualmente desde  $c = 0$  en la zona no contaminada a  $c = c_1$  en la zona contaminada). Estas diferencias en las propiedades físicas de ambos fluidos tienden a desaparecer con el tiempo debido a fenómenos físico-químicos como la difusión molecular o puramente físicos como la dispersión mecánica.

El desarrollo histórico de la teoría de la dispersión se ha producido en tres etapas, las dos primeras muy relacionadas entre sí.

- 1ª Etapa: de realización de experimentos de laboratorio en los que se investigaron los distintos mecanismos que rigen o afectan el transporte de solutos en medios porosos, así como los parámetros físicos o físico-químicos que intervienen en los citados mecanismos. Por ejemplo, y a nivel anecdótico, cabe citar que quizá haya sido Slichter (1905) el primero en reconocer la presencia de fenómenos de dispersión en su investigación del uso de sal como trazador en el flujo subterráneo; interesantes fueron las investigaciones de Scheideggfer (1954), Jong (1958) y Saffman (1959, 1960), por medio de la elaboración de modelos estadísticos que permitieron conocer la naturaleza de los denominados coeficientes de dispersión y llegar a expresiones de los mismos en función de características geométricas del medio poroso y de la velocidad del flujo.
- 2ª Etapa: de formulación matemática de los distintos mecanismos que afectan al transporte de solutos y por lo tanto, de elaboración de teorías que tratan de explicar sintéticamente los resultados de los experimentos de laboratorio. Esta etapa culmina con la elaboración del modelo matemático del fenómeno físico-químico del transporte de solutos en medios porosos.

3ª Etapa: de aplicación de los modelos matemáticos de forma operativa a los problemas reales de contaminación.

Como puede observarse, las dos primeras etapas se han desarrollado fundamentalmente en la segunda mitad de la década de los 50 y a lo largo de los 60. En esta última década comienza la 3ª etapa que, obviamente, alcanza hasta nuestros días. Como consecuencia de la aplicación de la teoría de la dispersión a problemas prácticos o reales, se han puesto de manifiesto ciertas discordancias entre los comportamientos reales observados y los calculados; cabría citar el efecto de escala observado en la magnitud de los coeficientes de dispersión determinados en laboratorio y los empleados en la realización de los modelos matemáticos (Fried - 1975, Anderson - 1979) y, por otra parte, la no validez en ciertos casos prácticos, del denominado "modelo de Fick" que rige el mecanismo de la dispersión hidrodinámica y, por consiguiente, la no validez de la ecuación convencional de la dispersión (Schwartz - 1977, Matheron y de Marsily - 1980, Gelhar y otros - 1979, Gelhar y Axness - 1983). A raíz de estas discrepancias, se desarrolla una cuarta etapa de nueva realización de experimentos de laboratorio y toma de datos en el campo que permita reelaborar nuevas teorías sobre el comportamiento de los solutos en los medios porosos.

## A.2. DESCRIPCION DE LA DISPERSION

A continuación se describen los distintos mecanismos que afectan y condicionan el transporte de solutos en medios porosos saturados:

- Advección: se denomina así a la componente del movimiento del soluto debido al flujo de agua subterránea. Está caracterizada por la velocidad media ( $\bar{v} = v/n$ , siendo  $v$  la velocidad de Darcy y  $n$  la porosidad eficaz) del flujo subterráneo; esta velocidad  $\bar{v}$  no representa la velocidad media de las partículas fluidas que viajan a través del medio poroso, cuyas velocidades reales se denominan velocidades microscópicas y serán generalmente mayores que  $\bar{v}$ , debido a que las trayectorias reales descritas por las partículas son más largas que la trayectoria lineal definida por  $\bar{v}$  (figura nº A-1). No obstante se considera que  $\bar{v}$  describe con suficiente aproximación este mecanismo del transporte. Dicho mecanismo suele ser denominado en la literatura como convección, si bien parece más correcto emplear el término advección, para reservar el primero al flujo subterráneo producido a consecuencia de la diferencia de temperaturas (Freeze-1979, Anderson-1979).

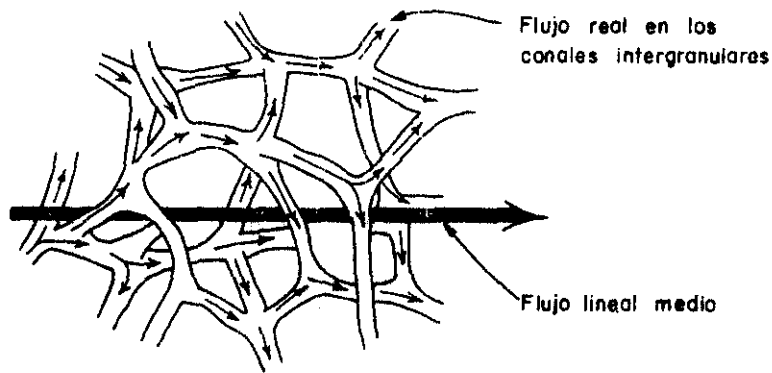


Fig. A-1. Velocidad lineal media (según Freeze, 1979)

- Dispersión hidrodinámica: es el mecanismo por el cual se producen fenómenos de dispersión o extensión de mezcla o dilución del soluto al moverse en el medio poroso (figura A-2). Consta a su vez de dos mecanismos que ocurren simultáneamente y que son claramente diferenciables:

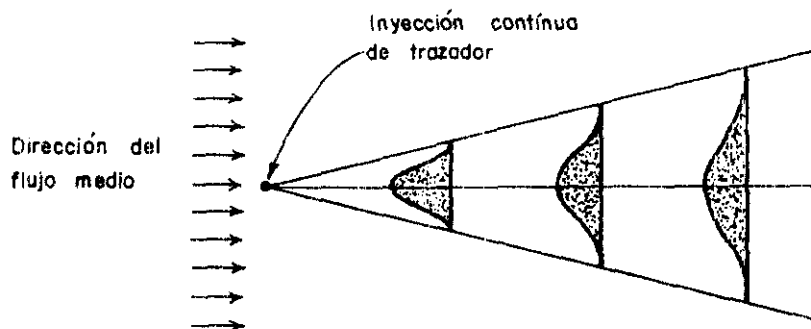


Fig. A-2. Representación esquemática del proceso de dilución causado por la dispersión hidrodinámica en medios porosos granulares (según Freeze, 1979)

- a) Dispersión mecánica: producida como consecuencia de las variaciones microscópicas de la velocidad real de las partículas dentro de cada canal intergranular, y de un canal a otro. Dichas variaciones se producen fundamentalmente de tres formas (figura A-3): primera, en cada sección de un canal intergranular se establece una variación de las velocidades de las partículas fluidas debido a su rozamiento con las superficies sólidas del medio; segunda, debido a que los diferentes canales intergranulares presentan distintos tamaños y rugosidades en sus paredes, se establecen velocidades diferenciales

entre ellos y, tercera, debido a la tortuosidad, ramificación e interferencia de los canales intergranulares.

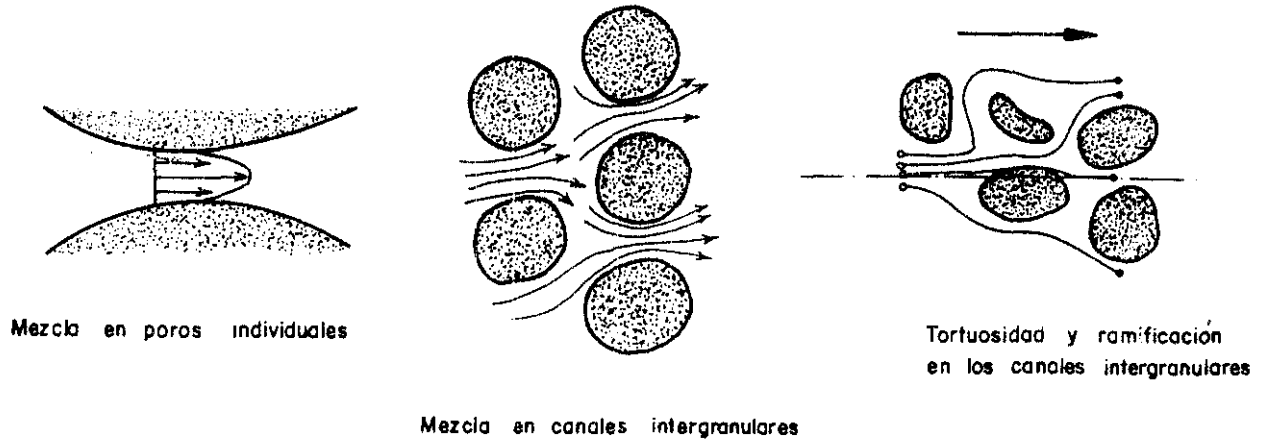


Fig. A-3. Procesos de dispersión mecánica (escala microscópica) (según Freeze, 1979)

- b) Difusión (molecular o iónica): es el mecanismo por el cual los constituyentes iónicos o moleculares de un soluto se mueven en la dirección decreciente del gradiente de sus concentraciones. La difusión se produce incluso si no hay movimiento de la solución. Este mecanismo (figura A-4) implica que a lo largo de un cierto tubo de corriente en el que exista un gradiente de concentraciones se producirá un movimiento tendente a neutralizarlo (difusión longitudinal); análogamente, si entre dos tubos de corriente existe un gradiente de concentraciones, se producirá un movimiento de moléculas e iones del soluto transversalmente a la dirección del flujo medio (difusión transversal). El mecanismo de difusión es dependiente del tiempo, sólo cesa cuando no hay gradientes de concentraciones y cobra mayor relevancia dentro de la dispersión hidrodinámica para pequeñas velocidades del flujo.

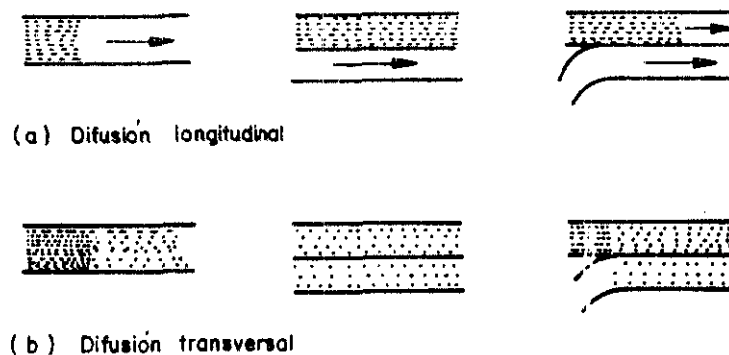


Fig. A-4. Difusión molecular o iónica

Para ilustrar el efecto que produce la dispersión hidrodinámica en el transporte de solutos en medios porosos y las zonas de preponderancia de la dispersión mecánica sobre la difusión, o viceversa, se presenta un experimento clásico (Freeze, 1979).

Se considera la inyección continua de agua con una concentración  $c_0$  de un cierto soluto no reactivo con el medio poroso en un flujo en régimen permanente a través de una columna que contiene un medio poroso granular y homogéneo (figura A-5a); se supone que la concentración del agua  $c$  antes de introducir el soluto es  $c = 0$  (figura A-5b). Una vez comenzada la inyección se obtienen las concentraciones del agua a la salida de la columna para distintos niveles de tiempo, obteniendo la denominada curva de penetración (concentraciones relativas  $c/c_0$  versus tiempo) representada en la figura A-5c. Como puede observarse ambos mecanismos provocan el hecho de que haya partículas de soluto que alcanzan la salida antes del tiempo  $t_2$  (caso en que no hay dispersión hidrodinámica y todas las partículas llegan al tiempo definido por  $\bar{v}$ ) y otras que la alcanzan para tiempos posteriores.

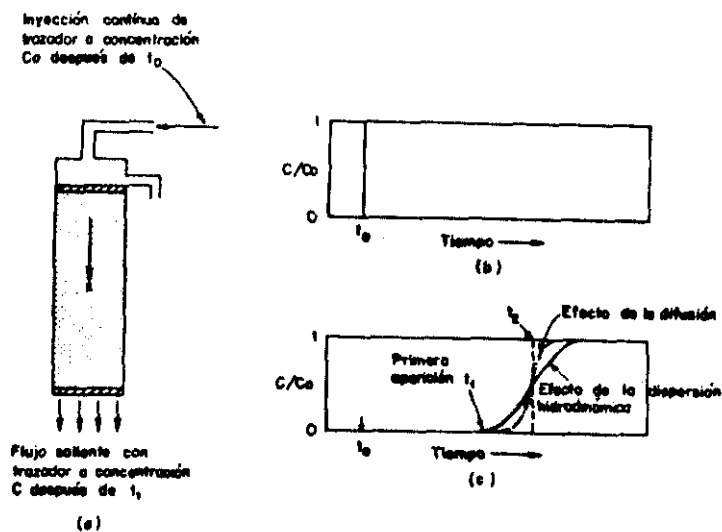


Fig. A-5. Dispersión longitudinal de un trazador pasando a través de una columna de medio poroso.

- Columna con flujo en régimen permanente e inyección continua de trazador después del tiempo  $t_0$
- Función escalón de la concentración de entrada del trazador
- Curvas de penetración:
  - sin dispersión hidrodinámica
  - con dispersión hidrodinámica
  - — — — contribución de la difusión

(según Freeze, 1979)

Por otra parte, la realización de ensayos de laboratorio como el citado anteriormente para materiales granulares y homogéneos, pone de manifiesto la validez de la expresión semiempírica (figura A-6):

$$\frac{D_L}{D^*} = \alpha \left( \frac{\bar{v}}{D^*} \right)^m + \beta$$

donde:

- $D_L$  : coeficiente de dispersión longitudinal
- $D^*$  : coeficiente de difusión aparente
- $\bar{v}/D^*$ : número de Peclet de la dispersión  $Pe_D$

Esta expresión permite distinguir los siguientes regímenes de dispersión:

1. Difusión molecular pura: se produce para  $\bar{v}$  bajas, siendo la difusión molecular el único proceso presente en la dispersión hidrodinámica; el cociente de  $D_L/D^*$  es constante (por ejemplo, en el caso de un medio construido con esferas idénticas la relación  $D_L/D^*$  es  $(D_L/D^*)_0 = 0,67$ ).
2. Superposición: no puede despreciarse la dispersión mecánica, si bien la difusión molecular sigue siendo el proceso dominante.
3. Influencia creciente de la dispersión mecánica: situación inversa a la anterior predominando ahora la dispersión mecánica, cuyo efecto es aumentado por la difusión molecular. Este régimen queda caracterizado por  $\alpha = 0,025$ ,  $m = 1,1$  y  $\beta = (D_L/D^*)_0$ .
4. Dispersión mecánica pura: en la que la influencia de la difusión molecular es despreciable; los coeficientes son análogos al régimen tipo 3 excepto  $m$  que ahora es igual a 1. Por consiguiente y despreciando el coeficiente  $\beta$ , puede escribirse:

$$\frac{D_L}{D^*} = \alpha \cdot \frac{\bar{v}}{D^*}, \text{ es decir } D_L = \alpha \bar{v}$$

5. **Dispersión mecánica:** en el que el flujo queda fuera del rango de validez de la ley de Darcy

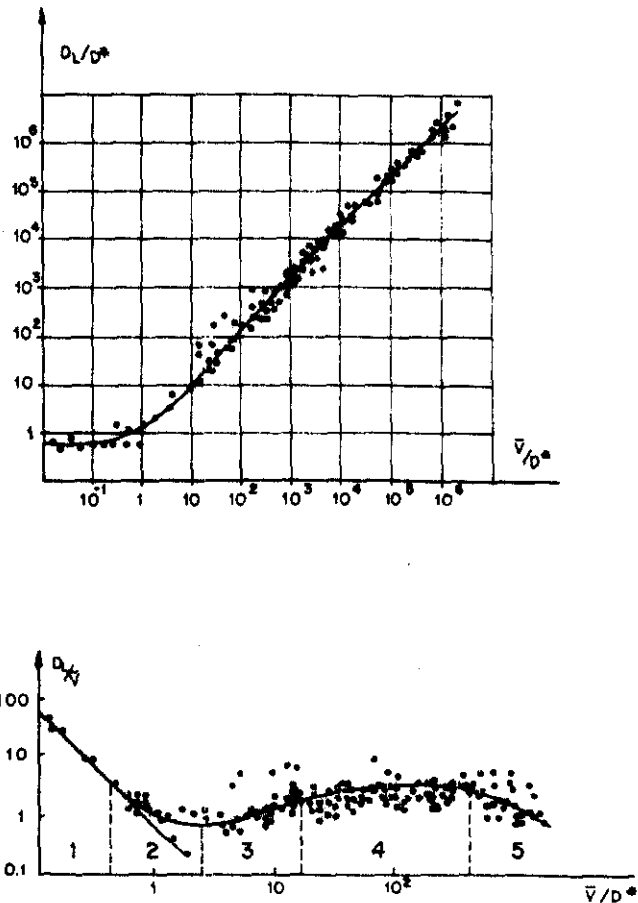


Fig. A-6. Regímenes de dispersión (según Fried, 1975)

- Difusión por turbulencias: se denomina así al proceso de mezcla debido al desplazamiento aleatorio de masa fluida como consecuencia de un régimen turbulento. Realmente este mecanismo sólo cobra especial importancia en casos muy concretos tales como medios muy fracturados o con gran tamaño de poros. En general, el pequeño tamaño de los poros y la existencia frecuente de bajos gradientes hidráulicos tiende a eliminar las turbulencias.

- Difusión macroscópica: es un mecanismo de mezcla aparente debido a la existencia de variaciones estructurales o heterogeneidades a gran escala en el medio poroso. Si bien al citar las distintas formas en que se producía la dispersión mecánica se entendía implícitamente el carácter microscópico de la misma, lo cierto es que la única dispersión que puede ser medida es la observable a escala macroscópica.



Estas variaciones estructurales controlan la dirección del movimiento de las partículas fluidas y por tanto si se considerase la concentración según el plano paralelo o perpendicular a la dirección del flujo, se observaría una mezcla a gran escala.

Estas heterogeneidades se refieren específicamente a la variabilidad o contrastes en la permeabilidad del medio poroso, teniendo gran importancia la agregación o modo de distribución espacial de los "elementos" de distinta permeabilidad en el medio; así una distribución de tipo aleatorio y una distribución regularizada de estos "elementos" de distinta permeabilidad producirán un comportamiento del mismo frente al transporte de masa completamente diferente, teniendo lugar una dispersión proporcional al contraste de permeabilidad existente.

La dispersión macroscópica tiene una especial importancia en la simulación matemática del transporte de solutos pues, como se indicará en la sección siguiente, no queda reflejada en la ecuación general de la dispersión (modelo determinístico). De hecho, y puesto que un conocimiento riguroso de las heterogeneidades del medio es puramente ilusorio, la única manera de modelar un sistema acuífero en el que la dispersión macroscópica sea mucho más importante que la microscópica es por medio de modelos probabilísticos, es decir, por medio de la aplicación de la teoría de probabilidades para predecir la distribución espacio-temporal de partículas de soluto transportadas a través del medio poroso.

- Reacciones químicas: otro de los mecanismos que con mayor frecuencia e importancia afecta al transporte de solutos, lo constituye la presencia de reacciones químicas que tienen lugar exclusivamente en la fase acuosa, o de reacciones con transferencia de soluto, o desde otras fases como la matriz sólida del medio poroso, o la fase gaseosa en la zona no saturada.

La gran cantidad de reacciones químicas que pueden tener lugar y que afectan a la concentración de un soluto determinado, se clasifican, de cara a su tratamiento matemático en los problemas de transporte de masa, en dos grandes grupos (figura A-7) que constituyen un primer nivel A de clasificación: primero, el grupo de reacciones reversibles "suficientemente rápidas", que consisten en cambios químicos reversibles con ratios grandes en comparación con los de otros procesos que también producen cambios en la concentración del soluto; puede suponerse cuando tienen lugar estas reacciones que existe siempre en cada punto del sistema un equilibrio local. Por el contrario, para el segundo grupo, el de reacciones "insuficientemente rápidas" no es usual hacer este

tipo de suposición. Esta diferencia entre ambos grupos es antes de tipo práctico que esencial. El siguiente nivel de clasificación, nivel B, presenta otros dos grupos: reacciones homogéneas, es decir, las que tienen lugar en una sola fase, y reacciones heterogéneas, es decir aquéllas que como mínimo envuelven dos fases. Para estas últimas se distingue otro nivel de clasificación (nivel C) constituido por dos grupos: reacciones de superficie (por ejemplo, reacciones de adsorción o de cambio iónico) y reacciones clásicas (por ejemplo, reacciones de precipitación-disolución, oxidación-reducción, complejación).

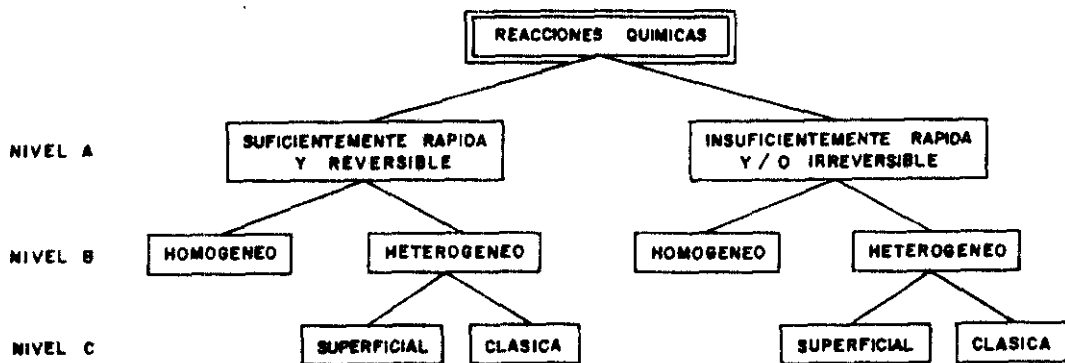


Fig. A-7. Clasificación de las reacciones químicas usuales en los problemas de transporte (Según Rubin 1983)

Es necesario comentar asimismo la existencia de solutos o contaminantes de carácter radiactivo cuya concentración se ve modificada por desintegración radiactiva, independientemente de otros mecanismos que también la puedan modificar.

En la sección siguiente se indica cómo afecta formalmente a la ecuación general de la dispersión la consideración de la existencia de reacciones químicas; dada la gran variedad de reacciones químicas que puede presentarse, se analiza sólo el caso de las reacciones de adsorción por su doble condición de frecuentes y suficientemente estudiadas en el transporte de masa en medios porosos.

**A.3. REPRESENTACION CONCEPTUAL DE LA DISPERSION. LA ECUACION GENERAL DE LA DISPERSION Y LIMITACIONES EN SU APLICACION.**

La formulación matemática de los distintos mecanismos que afectan al transporte de solutos en medios porosos, conduce a una ecuación diferencial en derivadas parciales de segundo orden conocida como ecuación general de la dispersión o ecuación de advección-dispersión según la cual se rige, con las limitaciones que se expondrán posteriormente, el comportamiento de solutos en medios porosos.

Los mecanismos que se tienen en cuenta (apartado 1º) para la obtención o derivación de la citada ecuación son la advección y dispersión hidrodinámica; a continuación (apartado 2º) se considera la presencia de reacciones químicas de adsorción en el sistema, analizándose cómo queda modificada la ecuación general. La consideración del mecanismo de dispersión macroscópica (apartado 3º) implica una limitación del uso de la ecuación general (modelo determinístico) y el empleo de otro tipo de modelos. Por último (apartado 4º) se analiza el fenómeno del transporte de solutos en medios fracturados y su modelación.

**1º Obtención de la ecuación general de la dispersión**

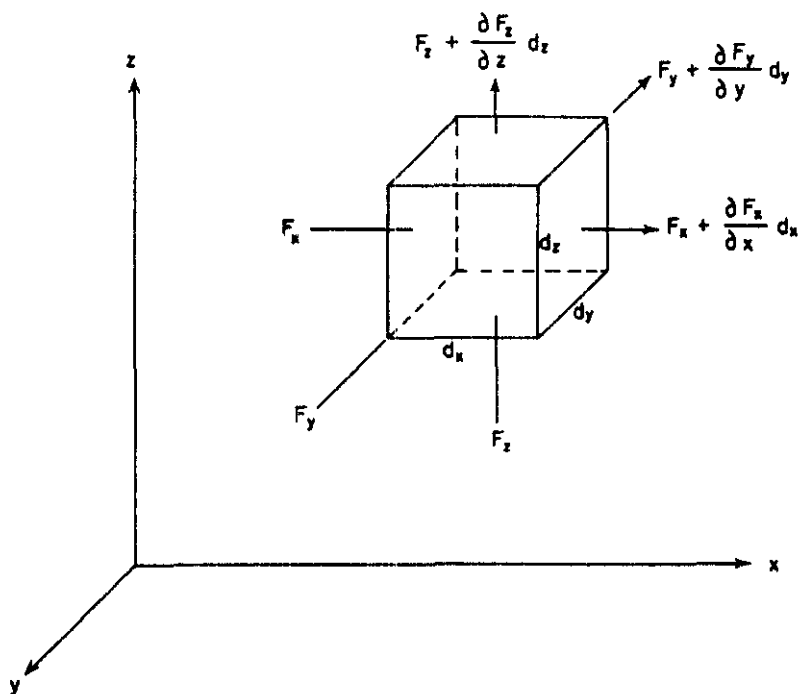


Fig. A-8. Balance de masa en un elemento de volumen diferencial (Según Ogata, 1970)

Se considera un elemento de volumen diferencial (figura A-8) en el seno de un medio poroso homogéneo e isótropo, saturado, atravesado por un flujo en régimen permanente que cumple la ley de Darcy. El soluto en estudio es no reactivo y presenta una concentración  $c$  definida como masa de soluto por unidad de volumen de solución siendo  $n \cdot c$  la masa de soluto por unidad de volumen del medio poroso (de porosidad  $n$ ).

Se supone además que el soluto no altera las propiedades de densidad y viscosidad dinámica del agua subterránea, es decir, no existen significativos contrastes de estas propiedades entre la solución contaminada y el agua sin contaminar y por consiguiente el soluto actúa como un trazador. En el apartado A-4 EL PROBLEMA ESPECIAL DE LA INTRUSION MARINA EN ACUIFEROS COSTEROS, se analiza un caso frecuente de gran importancia en los acuíferos españoles, en el cual esta hipótesis no puede ser asumida, empleándose un conjunto de ecuaciones más complejo para la resolución del problema.

El flujo másico a través de una sección  $dA$ , perpendicular a la dirección  $x$ , debido a los mecanismos de advección y dispersión hidrodinámica es, por unidad de tiempo.

$$\cdot \text{flujo másico por advección} = \bar{v}_x n \cdot c \, dA \quad (1)$$

siendo  $\bar{v}_x$  la componente según el eje  $x$  de la velocidad lineal media  $\bar{v}$  (siendo  $\bar{v} = v/n$ , y  $v$  la velocidad de Darcy).

$$\cdot \text{flujo másico por dispersión hidrodinámica} = -n \cdot D_x \frac{\partial c}{\partial x} \cdot dA \quad (2)$$

admitiendo que este flujo presenta una expresión matemática formalmente idéntica al flujo másico debido exclusivamente a la difusión molecular o iónica; este último es regido por la 1ª ley de Fick que puede ser expresada como  $F = -D \, dc/dx \, dA$ , que indica que el flujo másico que atraviesa por difusión molecular una sección transversal  $dA$  por unidad de tiempo es directamente proporcional al gradiente de concentraciones en la dirección considerada  $x$ ; el signo negativo indica que el flujo se produce en el sentido decreciente de las concentraciones; el factor de proporcionalidad  $D$  se denomina coeficiente de difusión molecular y alcanza, para iones tales como  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{HCO}_3^-$  y  $\text{SO}_4^{2-}$ , valores comprendidos entre  $1 \times 10^{-9}$  y  $2 \times 10^{-9}$   $\text{m}^2/\text{s}$  a  $25^\circ\text{C}$ . En medios porosos, el coeficiente alcanza valores muy inferiores debido a la presencia de la matriz sólida que provoca adsorción y

largos recorridos de los iones, por lo que se utilizan coeficientes de difusión molecular aparente  $D^* = \omega \cdot D$  donde  $\omega < 1$  es un factor empírico que pondera el efecto de la fase sólida del medio poroso en la difusión.

El factor de proporcionalidad en (2),  $D_x$ , se denomina coeficiente de dispersión hidrodinámica en la dirección x, y tiene por expresión:

$$D_x = \alpha_x \cdot \bar{v}_x + D^* \quad (3)$$

en donde  $\alpha_x \cdot \bar{v}_x$  representa la contribución de la dispersión mecánica en la dispersión hidrodinámica;  $\alpha_x$  es una propiedad intrínseca del medio poroso denominada dispersividad (en metros). Algunos autores dan como expresión más precisa la de  $\alpha_x \cdot \bar{v}_x^m$ , en donde m es una constante determinada empíricamente entre 1 y 2. A efectos prácticos m es considerada igual a 1 en materiales granulares. Teniendo en cuenta los valores usuales de  $D^*$  y que  $\alpha_x$  presenta normalmente valores comprendidos entre 1 y 40 m., puede deducirse que la contribución de la difusión molecular en (3) es despreciable a menos que  $\bar{v}$  sea excepcionalmente pequeña. Por otra parte, es lógico pensar que la dispersividad varía espacialmente con los cambios litológicos del medio poroso; no obstante, en la práctica habitual de los modelos matemáticos, las dispersividades ( $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ ) se suponen valores constantes. Smith y Schwartz (1980) sugieren que es esencial tener en cuenta la variación espacial de las dispersividades para una correcta simulación del movimiento de los solutos e indican que, si la velocidad de campo pudiera ser definida en detalle sería posible utilizar valores de laboratorio (microscópicos) para la dispersividad en lugar de los empleados en los modelos, generalmente más altos. Otros autores han señalado que los valores de dispersividad dependen de la escala del problema; es decir los valores determinados en campo por seguimiento del movimiento de un trazador, dependen de la distancia viajada por el mismo, de manera que para mayores distancias, se encontrarían un mayor número de heterogeneidades y, por tanto, serían necesarios mayores valores de dispersividad para describir la dispersión. Gelhar y otros (1979) emplean análisis estocástico para demostrar que, en teoría, la dispersividad podría ser aproximada por un valor constante para tiempos de recorrido y distancias grandes a partir de la fuente contaminante.

Si se denomina  $F_x$  al flujo másico total por unidad de tiempo y de área normal a la dirección x:

$$F_x = \bar{v}_x n c - n D_x \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4)$$

y haciendo similares consideraciones para las direcciones y, z:

$$F_y = \bar{v}_y n c - n D_y \frac{\partial c}{\partial y} \quad (5)$$

$$F_z = \bar{v}_z n c - n D_z \frac{\partial c}{\partial z} \quad (6)$$

El flujo másico total que entra en el elemento diferencial es:

$$F_x dy dz + F_y dx dz + F_z dx dy$$

El flujo másico total que sale del elemento es:

$$\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx\right) dy dz + \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy\right) dx dz + \left(F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz\right) dx dy$$

siendo por tanto el flujo neto en el elemento:

$$- \left( \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) dx dy dz$$

La aplicación de la ley de conservación de masas al elemento en estudio permite igualar el flujo neto (flujo que entra menos flujo que sale del elemento) a la variación de masa almacenada en el elemento, es decir:

$$\left( \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) dx dy dz = - n \frac{\partial c}{\partial t} dx dy dz \quad (7)$$

sustituyendo (4), (5) y (6) en (7) y simplificando se obtiene

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial c}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial c}{\partial z}) \right] -$$

$$- \left[ \frac{\partial}{\partial x} (\bar{v}_x c) + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{v}_y c) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{v}_z c) \right] = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (8)$$

ecuación que, teniendo en cuenta las hipótesis iniciales de medio poroso homogéneo y con flujo en régimen permanente y uniforme, se transforma en

$$\left[ D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right] -$$

$$- \left[ \bar{v}_x \frac{\partial c}{\partial x} + \bar{v}_y \frac{\partial c}{\partial y} + \bar{v}_z \frac{\partial c}{\partial z} \right] = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (9)$$

que es la denominada ecuación de advección-dispersión o ecuación general de la dispersión para las hipótesis inicialmente consideradas. Si los ejes cartesianos x, y, z hubieran coincidido con las direcciones principales de la dispersión, es decir, con la dirección del flujo subterráneo y las dos direcciones perpendiculares a ella, respectivamente, se tendría

$$D_x = D_L$$

$$D_y = D_z = D_T$$

siendo  $D_L$  y  $D_T$  los coeficientes de dispersión hidrodinámica longitudinal y transversal, habitualmente determinados o medidos en campo.

La generalización de la ecuación (9) a medios porosos anisótropos implica la consideración del coeficiente de dispersión hidrodinámica, que es representado matemáticamente bajo la forma de un tensor. Dada la gran dificultad en medir las distintas

componentes del tensor de dispersión, se asume que éste es de 2º orden, es decir, que queda caracterizado por sus tres componentes vectoriales o sus nueve componentes escalares, es decir:

$$D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix}$$

En consecuencia, el flujo másico total  $F_x$  (ecuación (4)) se escribiría ahora:

$$F_x = \bar{v}_x \cdot n \cdot c - n \left[ D_{11} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{13} \frac{\partial c}{\partial z} \right] \quad (10)$$

y análogamente (5) y (6) se convertirán para un medio anisótropo

$$F_y = \bar{v}_y \cdot n \cdot c - n \left[ D_{21} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{22} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{23} \frac{\partial c}{\partial z} \right] \quad (11)$$

$$F_z = \bar{v}_z \cdot n \cdot c - n \left[ D_{31} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{32} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{33} \frac{\partial c}{\partial z} \right] \quad (12)$$

sustituyendo (10), (11) y (12) en (7) y simplificando

$$\left[ D_{11} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_{22} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_{33} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + (D_{23} + D_{32}) \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} + (D_{13} + D_{31}) \frac{\partial^2 c}{\partial z \partial x} + (D_{12} + D_{21}) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \right] - \quad (13)$$



$$-\left[ \bar{v}_x \frac{\partial c}{\partial x} + \bar{v}_y \frac{\partial c}{\partial y} + \bar{v}_z \frac{\partial c}{\partial z} \right] = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (13)$$

que es la ecuación general de la dispersión para medios porosos homogéneos y anisótropos.

2ª Ecuación general de la dispersión con presencia de reacciones químicas de adsorción-desorción

Para mostrar cómo afecta a la ecuación general de la dispersión anteriormente obtenida la consideración de la existencia de reacciones químicas en el sistema acuífero, se analiza el caso de las reacciones de adsorción-desorción. En la actualidad puede afirmarse que el problema no radica tanto en la resolución numérica de las ecuaciones generales que se obtienen para cada tipo de reacción, como en la fase anterior, es decir, en la formulación matemática de fenómenos químicos complejos, y a veces, no bien conocidos.

Si se parte de la ecuación (9), expresada para una sola dimensión a efectos simplificativos, se tendrá, con la presencia de fenómenos de adsorción:

$$D_1 \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - \bar{v}_1 \frac{\partial c}{\partial l} + \frac{\rho_b}{n} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (14)$$

en donde  $\rho_b$  es la densidad del material que forma el medio poroso y  $S$  es la masa del soluto en estudio adsorbida por unidad de masa de sólido. Por consiguiente, el nuevo término introducido en la ecuación representa el cambio en la concentración del soluto en la fase líquida por adsorción o desorción.

Dado que la variable  $S$  es comúnmente una función de la concentración  $c$ ,  $S = f(c)$ , siempre que las reacciones sean rápidas respecto a la velocidad del flujo subterráneo, puede escribirse

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial c} \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \quad (15)$$

y por tanto

$$-\frac{\rho_b}{n} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\rho_b}{n} \cdot \frac{\partial S}{\partial c} \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \quad (16)$$

En donde el término  $\partial S / \partial c$  representa la distribución del soluto estudiado entre las fases sólida y líquida del medio poroso. En el caso de solutos con concentraciones bajas o moderadas es muy frecuente obtener en experiencias de laboratorio, para amplias variaciones de la concentración, relaciones del tipo

$$S = K_d c^b \quad (17)$$

siendo  $K_d$  y  $b$  coeficientes que dependen, fundamentalmente, de la naturaleza del soluto y el medio poroso. la ecuación (17) recibe el nombre de isoterma de Freundlich (dado que las experiencias de laboratorio se realizan normalmente a temperatura constante) y se denomina lineal cuando el coeficiente  $b$  es igual a 1; por lo que puede escribirse

$$\frac{ds}{dc} = K_d \quad (18)$$

de esta forma, sustituyendo (16) y (18) en (14) se tiene

$$D_1 \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - \bar{v}_1 \frac{\partial c}{\partial l} = \frac{\partial c}{\partial t} \left( 1 + \frac{\rho_b}{n} \cdot K_d \right) \quad (19)$$

forma en la que quedaría la ecuación monodimensional de la dispersión con influencia de reacciones de adsorción-desorción. Afortunadamente, la simplificación que significa (18) es frecuente para muchos solutos de interés en problemas de contaminación, por lo que (19) tiene un carácter general; en estos casos  $K_d$  (denominado coeficiente de distribución) es una representación válida de la distribución del soluto entre las fases sólida y líquida del medio poroso.

La relación entre la naturaleza de una reacción química y el problema de su formulación matemática puede verse para otro tipo de reacciones frecuentes en aguas subterráneas tales como las de precipitación-disolución, oxidación-reducción, complejación, etc. por ejemplo en Rubin (1983).

### 3º Limitaciones en la aplicación de la ecuación general de la dispersión

Muchos investigadores han notado que la ecuación anteriormente obtenida, no simula con precisión el transporte de solutos especialmente cuando la distancia viajada por aquéllos es pequeña respecto a la fuente o foco contaminante; en concreto, curvas de penetración obtenidas en laboratorio no se ajustan al comportamiento teórico predicho por la ecuación general.

En efecto, en el caso de medios porosos de tipo estratificado, tales como depósitos aluviales, para los que la dispersión macroscópica presenta especial importancia, puede obtenerse una ecuación de transporte modificada.

Si se considera el medio estratificado bidimensional (figura A-9), en el cual la permeabilidad sólo depende de la variable  $z$ , puede considerarse a la permeabilidad como una variable aleatoria de media  $K=E[K]$  y desviación respecto a la media  $k$ , de manera que  $E[k]=0$ . Teniendo en cuenta el cumplimiento de la ley de Darcy y que la velocidad lineal media  $U$  es una variable también aleatoria de media  $U=E[U]$ .

$$U = U + u = K \cdot i/n = (K+k) \cdot i/n \quad (20)$$

su desviación  $u$  podrá escribirse como

$$\frac{u}{U} = \frac{k}{K} \quad (21)$$

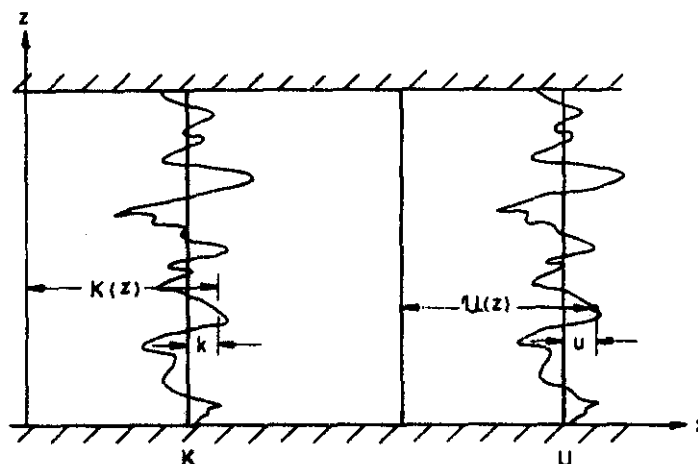


Fig. A-9. Representación esquemática de un acuífero estratificado con variaciones verticales de la permeabilidad y de la velocidad lineal media (según Gelhar y otros, 1979)

La ecuación general (8) adaptada al caso en estudio se escribiría

$$\frac{\partial}{\partial x} (D_L \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_T \frac{\partial C}{\partial z}) = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (C U) \quad (22)$$

siendo  $D_L$  y  $D_T$  los coeficientes longitudinal y transversal respectivamente; dichos coeficientes y la concentración se consideran también como variables aleatorias con:

$$\begin{aligned} C(x,z,t) &= C(x,t) + c(x,z,t) & C &\equiv E[c] & E[c] &= 0 \\ D_L &= D_L + d_L & D_L &\equiv E[D_L] & E[d_L] &= 0 \\ D_T &= D_T + d_T & D_T &\equiv E[D_T] & E[d_T] &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

Empleando estas expresiones en (22), y considerando que las condiciones medias son independientes de  $z$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (UC) + \frac{\partial}{\partial x} (uc) = \frac{\partial}{\partial x} (D_L \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (d_L \frac{\partial C}{\partial x}) + (d_T \frac{\partial C}{\partial z}) \quad (24)$$

que es una ecuación diferencial estocástica, es decir con parámetros estocásticos. Empleando un método de análisis estocástico y el cambio de variable  $r = x - U \cdot t$  con  $C(r,t)$ , (24) queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= (A + a_L) U \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} - B \frac{\partial^3 C}{\partial r^2 \partial t} - 3 a_L AU \frac{\partial^3 C}{\partial r^3} + \\ &+ 3 a_L B \frac{\partial^4 C}{\partial r^3 \partial t} + (a_L BU + 9/4 a_L^2 AU) \frac{\partial^4 C}{\partial r^4} + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

en donde  $a_L$  es la dispersividad longitudinal media y  $A, B$  función de parámetros estocásticos. El análisis de esta ecuación general del transporte medio permite llegar a las siguientes conclusiones:

- Durante el desarrollo de los procesos de dispersión que tienen lugar en el transporte de solutos, hay desviaciones importantes respecto de la clásica distribución normal (modelo de Fick) de concentraciones,

especialmente para tiempos cortos o pequeñas distancias viajadas respecto al foco contaminante.

- En general, para tiempos grandes y largas distancias recorridas el comportamiento del soluto sigue el modelo de Fick, si bien en ciertas situaciones el tiempo necesario para alcanzar dicho comportamiento puede ser demasiado grande, permitiendo al soluto alcanzar otras heterogeneidades en el acuífero, lo que invalidaría el uso del modelo de Fick.
- El coeficiente de dispersión para tiempos grandes tiene la forma de un producto de velocidad media por dispersividad, estando el valor asintótico (es decir, para tiempos grandes o largas distancias) de ésta relacionado con propiedades estadísticas del medio poroso.

#### 4º Transporte de solutos en medios fracturados

Los mecanismos por los que se produce el transporte de solutos en medios porosos fracturados son esencialmente análogos a los ya citados para medios porosos granulares, es decir, advección, dispersión mecánica, difusión por turbulencias y dispersión macroscópica (ahora de especial importancia), y reacciones químicas.

El tratamiento matemático de los problemas de flujo para este tipo de medios encierra, como es sabido, ciertas complejidades e incógnitas; en concreto, es necesario definir volúmenes elementales representativos mucho mayores que en los medios porosos granulares, a los cuales se les pueda asignar valores medios de las propiedades y parámetros hidrodinámicos. En definitiva se sustituye, como aproximación, un medio fracturado por un medio poroso equivalente en el que se pueden considerar válidas y aplicables las hipótesis y leyes usuales en hidrodinámica (Darcy, etc).

En los problemas de transporte suele ser empleado un tratamiento matemático similar; sin embargo, la escala a la que la sustitución del medio fracturado por el medio poroso granular es válida no es bien conocida en la práctica. En general debe suceder que en el volumen elemental representativo en el que se definen propiedades medias tales como permeabilidad, porosidad, etc. haya una gran densidad de fracturas, cuyas aperturas sean muy pequeñas respecto del volumen elegido.

Por otra parte, el análisis del proceso de transporte de solutos se complica dada la fuerte influencia que ejerce sobre él la geometría de las fracturas. Schwartz y otros (1983) y Schwartz y Smith (1984) han considerado el caso

genérico de un medio fracturado con dos familias de fracturas discontinuas u ortogonales (familia 1, alineada con la dirección del gradiente hidráulico; familia 2, conectando fracturas de la familia 1), estableciendo dos grupos de factores que afectan al transporte: 1º. Factores que determinan la permeabilidad de fracturas individuales, incluyendo la apertura media de cada familia de fracturas y la variabilidad de la apertura dentro de cada familia; 2º. Factores que determinan el orden espacial de intersección de fracturas y la conexión local de la red de fracturas, incluyendo la densidad de fracturas en cada familia y la longitud de las fracturas. Entre las más importantes consecuencias pueden destacarse las siguientes:

- El transporte es muy sensible a la variabilidad en la apertura de las fracturas.
- La conexión en la red de fracturas tiene gran influencia en la magnitud del transporte dispersivo.
- La reducción en la densidad de fracturas para la familia 1 produce un retardo en el transporte y un incremento de la dispersión macroscópica, mientras que en la familia 2 produciría una disminución de ésta, y provocaría una curva de penetración con la fracción inicial más retrasada y la fracción final más adelantada.

#### A.4 EL PROBLEMA ESPECIAL DE LA INTRUSION MARINA EN ACUIFEROS COSTEROS

Se comentó en el apartado A-3. REPRESENTACION CONCEPTUAL DE LA DISPERSION. LA ECUACION GENERAL DE LA DISPERSION Y LIMITACIONES EN SU APLICACION, al plantear las hipótesis de partida para la obtención de la ecuación general de la dispersión, que el soluto actúa como un trazador en los procesos de transporte; es decir, no modifica esencialmente las propiedades físicas del fluido, tales como densidad y viscosidad dinámica.

En los acuíferos costeros, no puede estudiarse el problema de la intrusión salina bajo esta hipótesis puesto que el soluto (ClNa) modifica las propiedades del agua dulce (especialmente la densidad), de manera que existe un fuerte contraste en las propiedades físicas del agua dulce (fluido no contaminado) y el agua salinizada (fluido contaminado). Se trata por tanto de la presencia de dos fluidos miscibles en movimiento a través de un medio poroso, existiendo una zona de dispersión o mezcla entre ambos (figura A-10).

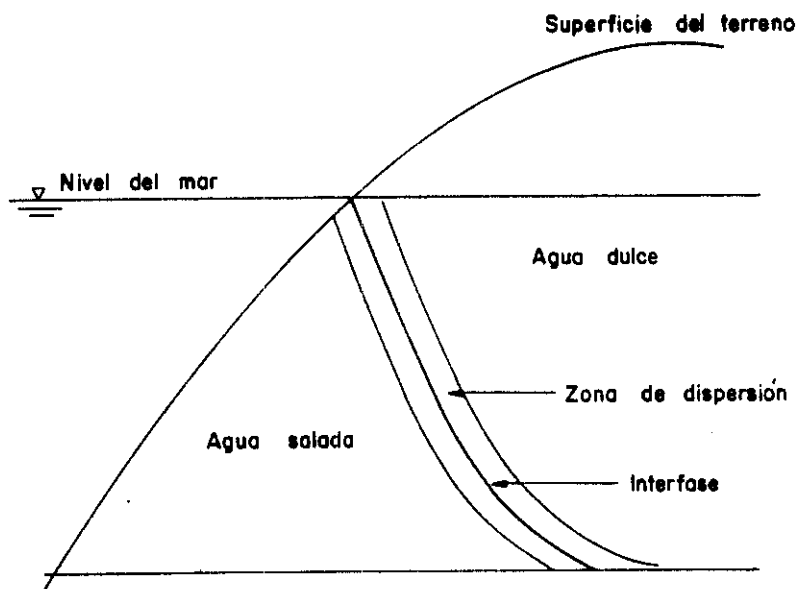


Fig. A-10. Representación esquemática de un sistema acuífero costero (según Ogata, 1970)

Es por tanto necesario considerar la densidad para analizar la distribución de concentraciones en el acuífero; ejerce una influencia tan grande en el flujo, que la posición de una partícula de fluido contaminado para cualquier tiempo dado está fuertemente condicionada por ella. Es decir, la descripción de la velocidad del flujo subterráneo es dependiente del equilibrio dinámico existente entre ambos fluidos. Por consiguiente, la definición de los procesos de transporte en el acuífero requiere el conocimiento completo de las propiedades de los fluidos y del flujo subterráneo.

La ecuación general de la dispersión, suponiendo que no hay presencia de reacciones químicas queda, teniendo en cuenta que ahora la velocidad depende del espacio:

$$D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = \frac{\partial c}{\partial t} + \text{div} (\vec{v} \cdot c) \quad (26)$$

Expresándose la velocidad lineal, vectorialmente, por aplicación de la ley de Darcy, como

$$\vec{v} = - \frac{K}{\rho g} (\nabla p - \rho \vec{g}) \quad (27)$$

en donde  $K$  es la permeabilidad de Darcy,  $\rho$  es la densidad del fluido en función de la concentración del mismo y  $p$  la presión del fluido.

Como puede observarse, la ecuación general (26) es ahora una ecuación diferencial no lineal, dado que sus coeficientes (las velocidades) son función de la concentración (a través de la densidad).

Por consiguiente el problema del transporte de sales (ClNa) exige la resolución de (26) acoplada con (27), más las correspondientes condiciones inicial y de contorno.